

文章编号: 1006-3080(2026)02-0204-09

DOI: 10.14135/j.cnki.1006-3080.20250603002

磷酸铁生产全流程模拟及水系统集成

丁保玲, 杨敏博, 冯 霄

(西安交通大学化学工程与技术学院, 西安 710049)

摘要: 依据工业生产数据, 在 Aspen Plus 软件中建立了以七水硫酸亚铁和磷酸二氢铵为主要原料、以双氧水为氧化剂, 通过氧化反应生成二水磷酸铁, 然后再经过洗涤、干燥、煅烧后得到磷酸铁产品的生产全流程。针对磷酸铁生产过程中高水耗问题, 通过改变卧螺离心机的使用数量、优化原料溶解过程用水和洗涤过程用水的方式, 进行水系统集成与优化研究。流程模拟结果显示, 磷酸铁产量为 2.52 万 t/a, 与设计值的相对误差为 0.8%; 综合考虑纯水消耗量和设备费用, 使用 4 个卧螺离心机效果最佳。通过水系统集成, 纯水消耗量减少了 85.88%, 洗涤过程的废水排放量减少了 99.24%。

关键词: 磷酸铁合成; 全流程模拟; 水系统集成优化; 直接回用; 水夹点技术

中图分类号: TQ021.8

文献标志码: A

近年来, 新能源汽车发展迅速, 锂电池材料作为新能源汽车产业的重要环节, 需求巨大。磷酸铁锂具有良好的循环稳定性、优异的热稳定性, 其在安全性和循环寿命等方面优势突出, 为动力电池的首选正极材料^[1-2]。磷酸铁作为磷酸铁锂正极材料的前驱体, 主要生产方式有氧化沉淀法^[3-4]、共沉淀法^[5]、超声化学法、水热法^[6]、溶胶-凝胶法^[7]等。

以生产原料分类, 磷酸铁的工业化生产包括钠法、铁法、铵法。钠法是硫酸亚铁经磷酸酸化后与过氧化氢反应得到磷酸二氢铁, 最后用氢氧化钠溶液调节 pH 值, 再经陈化、过滤、水洗得到磷酸铁, 该方法的劣势在于副产物硫酸钠难处理, 价值低^[8-9]。铁法工艺最简单, 采用铁粉或者铁块与磷酸反应得到磷酸二氢亚铁, 经双氧水氧化后即得到磷酸铁, 该路线废水少, 比较环保, 但稳定性差, 且对铁源和磷酸纯度要求高, 成本较高^[3, 5, 10]。铵法主要是指硫酸亚铁溶液与磷酸二氢铵反应, 经沉淀、过滤、干燥、焙烧后得到磷酸铁, 该方法成本优势高且副产品硫酸铵价值高, 工艺路线技术成熟、生产成本低, 是一种适合于工业生产的方法^[11-13]。

在铵法制磷酸铁生产流程中, 需要大量的纯水用于原料的溶解和粗产品的洗涤, 同时产生大量的酸性洗水。酸性洗水的再生流程复杂、能耗高, 给工厂带来显著的成本负担。在洗涤过程中排出的废水存在回用的可能, 为了响应国家可持续发展和节约资源的战略, 磷酸铁生产流程的用水优化具有重要意义。然而, 现有研究主要集中在生产工艺和废水处理等方面^[7, 14-16], 鲜有关于该生产流程中的用水和节水的研究。

水系统集成技术的主要方法分为两种: 水夹点法和数学规划法^[17-19]。水夹点技术以最小需水量为目标, 通过分析操作单元之间的水质匹配, 寻找“夹点”实现水的最大回用, 具有直观、计算量小、易于理解的优点, 但在处理复杂约束和多目标优化时较为受限。数学规划法则基于线性或非线性优化模型, 系统地考虑水量、水质、成本等多重因素, 求得全局最优解, 适用于大型、复杂系统, 但模型构建和求解过程较复杂。

针对上述问题, 本文以磷酸铁生产过程(七水硫酸亚铁和磷酸二氢铵为原料)为对象, 运用 Aspen

收稿日期: 2025-06-03

基金项目: 云南省科技厅重大科技专项项目(202302AF080003)

作者简介: 丁保玲(2000—), 女, 山东泰安人, 硕士生, 主要研究方向为水系统集成优化。E-mail: dbl2000@stu.xjtu.edu.cn

通信联系人: 杨敏博, E-mail: yangmb@xjtu.edu.cn

引用本文: 丁保玲, 杨敏博, 冯 霄. 磷酸铁生产全流程模拟及水系统集成[J]. 华东理工大学学报(自然科学版), 2026, 52(2): 204-212.

Citation: DING Baoling, YANG Minbo, FENG Xiao. Full-Process Simulation of Iron Phosphate Production and Integration of Water Systems[J]. Journal of East China University of Science and Technology, 2026, 52(2): 204-212.

Plus 进行了全流程模拟。根据现有的生产流程和模拟数据,分析了各单元的用水特征,确定了各单元用水数据,据此对磷酸铁生产流程进行水系统集成优化。

1 生产流程介绍

七水硫酸亚铁和磷酸二氢铵反应生成磷酸铁的生产工艺流程如图 1 所示。生产原料七水硫酸亚铁和磷酸二氢铵分别依次经过加水溶解、板框过滤器

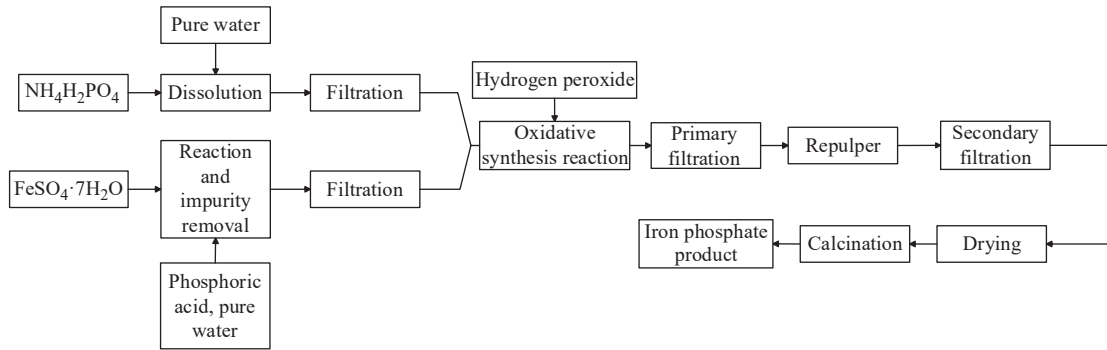


图 1 磷酸铁生产工艺流程图

Fig. 1 Process flow diagram of iron phosphate production

2 磷酸铁生产流程模拟

2.1 原料预处理

本文使用 Aspen Plus V12 模拟软件,物性方法选择 ELECNRTL。以 $w=85\%$ 的七水硫酸亚铁和 $w=98\%$ 的磷酸二氢铵为主要原料,在 $w=27\%$ 双氧水和 $w=85\%$ 磷酸的参与下反应生成磷酸铁。洗涤用水和溶解原料用水为纯水,七水硫酸亚铁中除有效成分外其他物质组成如表 1 所示,磷酸二氢铵除有效成分和水外,仅含 $w=1.5\%$ 的 $Pb_3(PO_4)_2$ 。通过与 $160\text{ }^\circ\text{C}$ 的蒸汽换热,将常温纯水加热为 $75\text{ }^\circ\text{C}$ 的热纯水,作为两级过滤的洗涤水,在 Aspen Plus 中,换热器选用 HeatX。在原料溶解过程中,将部分蒸汽冷凝水 ($90\text{ }^\circ\text{C}$) 与常温纯水混合至 $50\text{ }^\circ\text{C}$ 后用于溶解七水硫酸亚铁;磷酸二氢铵的溶解使用常温纯水。

七水硫酸亚铁的流量为 7.58 t/h 、磷酸二氢铵流量为 2.07 t/h 。其中,七水硫酸亚铁原料液中加入磷酸溶液调节磷铁质量比和溶液 pH,磷酸质量流量为 0.46 t/h 。七水硫酸亚铁和磷酸二氢铵溶解得到的原料液分别进行过滤,脱除原料中的大部分杂质,获得尽量纯净的原料液,以消除杂质对主要反应的影响,在 Aspen Plus 中,板框过滤器选用 CfFilter。过滤硫酸亚铁溶液的板框出口压力设定为 0.4 MPa ,温度设定为 $54\text{ }^\circ\text{C}$,出口固体水含量(质量分数,下同)为 0.5 。过

洗涤后转入反应釜,经过氧化还原反应生成粗产品——二水磷酸铁,反应釜流出的粗产品经过一次挤压移除大部分液体,将反应获得的固体粗产品经过两级洗涤去除绝大部分杂质。其中,一级过滤后的滤饼送入浆化槽,加入纯水和磷酸搅洗,将二水磷酸铁进行陈化处理,后转入二级过滤器进行过滤洗涤。两级过滤后所得固体粗产品经过干燥脱除固体中的游离水,再经过焙烧去除结晶水,将二水磷酸铁转化为磷酸铁,最终得到磷酸铁产品。

滤磷酸二氢铵溶液的板框出口压力设定为 0.4 MPa ,温度设定为 $80\text{ }^\circ\text{C}$,出口固体水含量为 0.67 。原料预处理阶段的模拟流程如图 2(a) 所示。

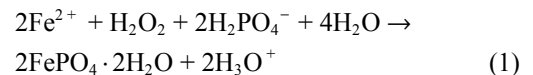
表 1 七水硫酸亚铁杂质组成

Table 1 Impurity composition of ferrous sulfate heptahydrate

w/%						
H ₂ O	MgSO ₄	MnSO ₄	Al ₂ (SO ₄) ₃	K ₂ SO ₄	Na ₂ SO ₄	PbSO ₄
7.14	0.21	0.07	6.56	0.91	0.10	0.01

2.2 反应过程

将过滤后的原料液转入反应釜,并在反应釜内加入双氧水作为氧化剂,双氧水质量流量为 1.48 t/h 。反应温度为 $90\text{ }^\circ\text{C}$,压力为常压,二价铁离子在氧化剂的作用下转化为三价铁离子,并生成二水磷酸铁粗产品。在 Aspen Plus 中,反应釜选用 RStoic,反应釜内反应如式 (1) 所示。



此处,亚铁离子完全反应转化为二水磷酸铁,且不考虑副反应。将反应釜生成的二水磷酸铁粗产品通过一次挤压移除绝大多数水,获得固体粗产品。反应釜和粗产品挤压阶段的模拟如图 2(b) 所示。

2.3 粗产品洗涤及再浆

将获得的粗产品依次通过一级过滤、再浆、二

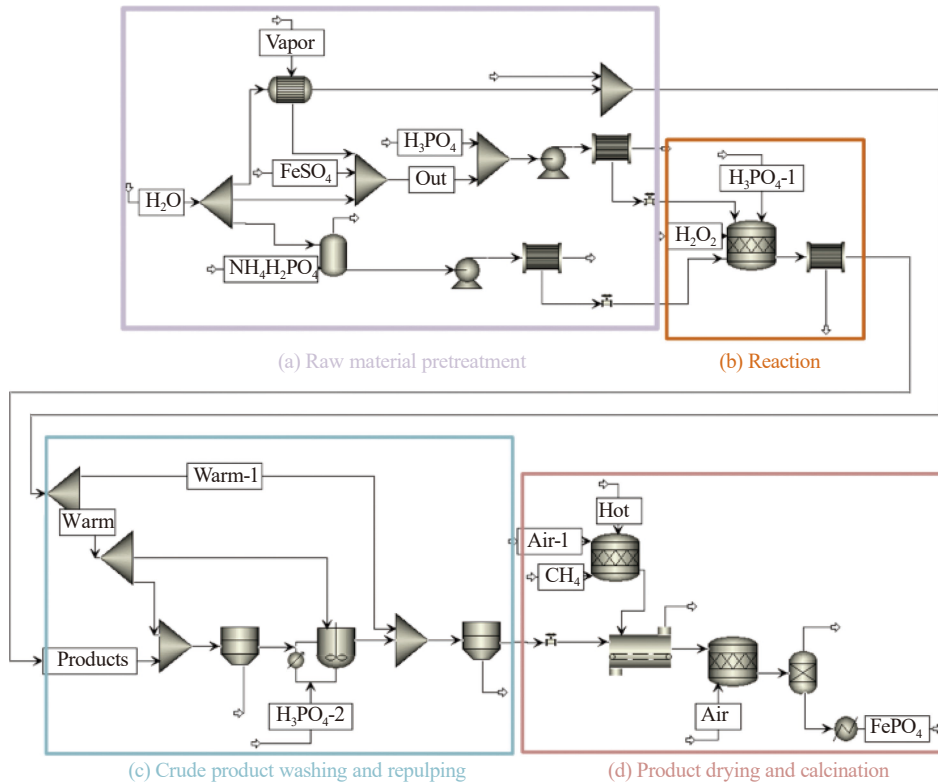


图 2 磷酸铁生产流程模拟

Fig. 2 Iron phosphate production process simulation

级过滤操作,去除杂质,洗涤用水为与蒸汽换热后的 75 °C 热纯水。一级过滤和再浆过程所用热纯水量与二级过滤所用热纯水量的质量比为 2 : 1,再浆过程所用热纯水量为粗产品物料的 1.5 倍^[20]。再浆过程中除热纯水外,还需加入磷酸,使陈化过程中的 pH 值保持在 1~2^[21],加入 $w=85\%$ 的磷酸,其流量为 0.117 t/h,使陈化反应 pH 保持在 1.8。过滤洗涤过程使用卧螺离心机,操作温度为 75 °C,在 Aspen Plus 中,离心机选用 CFuge;再浆过程为二水磷酸铁的陈化过程,将无定形的二水磷酸铁晶体通过结晶转化为单斜晶体^[20-21],陈化过程温度为 70 °C^[20],压力 0.2 MPa,在 Aspen Plus 中,再浆过程的反应器选用 Crystallizer,所建立的上述洗涤及再浆模拟流程如图 2(c) 所示。

2.4 产品干燥和煅烧

所得产品经过干燥移除固体产品中的游离水,固体干燥器所需热量通过天然气燃烧提供。干燥后的磷酸铁再经回转窑煅烧、脱除结晶水,煅烧温度设定为 500 °C^[5],压力设定为 93.5 kPa。煅烧涉及反应如式 (2)。



煅烧后的产品经过换热器降温,获得 55 °C 的常压磷酸铁产品。在 Aspen Plus 中,天然气燃烧和煅烧

的反应釜均选用 RStoic,固体干燥器选用 Dryer,上述流程如图 2(d) 所示。

2.5 模拟结果

以上述方案建成磷酸铁生产过程的全流程模型,产品流股中磷酸铁的质量分数为 99.68%,产品中主要杂质为 H₂O、H₃PO₄、H₂SO₄。模拟所得产品质量流量为 3.5 t/h,按照每年生产工作时长为 7200 h 计算得年产量为 2.52 万 t,与工厂设计值 2.5 万 t/a 接近,误差为 0.8%。在磷酸铁生产流程中,原料预处理和粗产品过滤工段共使用纯水 165.12 t/h,产品量与耗水量质量比约为 1 : 47。表 2 对比了模拟所得产品质量与企业质量要求,从表中数据可以看出,模拟所得产品质量满足企业要求,说明上述模拟流程可靠。

3 粗产品过滤离心机数量优化

在两级粗产品过滤洗涤过程中,提高离心机的数量可以降低纯水的消耗,但离心机数量的增加会同步增加生产设备的投资费用,在纯水消耗量和设备费用的两项约束下适当增加离心机的数量可以在一定程度上减少生产成本。

除洗涤外其他流程不变,在 Aspen Plus 中只增加离心机数量,模拟离心机数量的变化对热纯水投

表2 模拟产品质量与企业质量要求对比
Table 2 Comparison of simulated product quality and enterprise quality requirements

Type	w/%						
	Water	Sulfur	Magnesium	Aluminum	Manganese	Sodium	Potassium
Enterprise quality requirement	<0.4	≤0.06	≤0.005	≤0.05	≤0.01	≤0.005	≤0.01
Simulated product quality	0.07	0.01	1.37×10^{-5}	3.33×10^{-4}	8.65×10^{-6}	1.07×10^{-5}	1.32×10^{-4}

入量的影响。其中,同一级中使用的热纯水量等分后通入此级各个离心机。由于杂质 SO_4^{2-} 和 HSO_4^- 仅在原料投入时引入生产流程,无其他进口,且 SO_4^{2-} 和 HSO_4^- 质量分数足够大,在洗涤时质量分数变化明显,可以代表洗涤效果。因此,在探究离心机使用数量、用水单元进出口关系和水极限复合曲线的绘制过程中,均选用 SO_4^{2-} 和 HSO_4^- 为关键杂质组分。以二级过滤后滤饼中关键组分 SO_4^{2-} 和 HSO_4^- 的

质量分数为判断依据,改变热纯水的使用量(流量),使得洗涤效果达到滤饼中关键组分 SO_4^{2-} 和 HSO_4^- 的质量分数之和不高于 5.2×10^{-5} 。由上述流程进行模拟,所得不同数量离心机使用热纯水量的结果如表3所示,表中括号内表示在两级洗涤中每级使用的离心机数量,如(1+1)表示在使用两个离心机时,一级洗涤使用1个离心机,二级洗涤使用1个离心机,以此类推。

表3 不同数量离心机使用热纯水使用量和过滤结果对比
Table 3 Comparison of hot pure water usage and filtration results in situations with the different number of centrifuges

Number of centrifuge	Flow rate of hot pure water/(t·h ⁻¹)	Total mass fraction of SO_4^{2-} and HSO_4^- in the filter cake	Product output/(t·h ⁻¹)	Mass fraction of iron phosphate
				in the product/%
Two (1+1)	144.58	5.185×10^{-5}	3.51	99.68
Three (2+1)	67.88	5.184×10^{-5}	3.51	99.67
Four (2+2)	45.73	5.191×10^{-5}	3.50	99.73
Five (3+2)	38.63	5.200×10^{-5}	3.50	99.70
Six (4+2)	34.88	5.181×10^{-5}	3.50	99.68

通过表中数据可以看出,当离心机数量由2个增加到3个时,热纯水使用量减少53.05%;离心机数量由3个增加到4个时,热纯水使用量减少32.63%;离心机数量由4个增加到5个时,热纯水使用量减少15.53%;离心机数量由5个增加到6个时,热纯水使用量减少9.71%。综上所述,离心机数量由2个逐渐增加到4个时,对于减少热纯水的效果较为显著,而当离心机数量由4个增加到6个时,对于减少热纯水的效果较小,同时每增加一个离心机需要投入一定的设备和场地成本。考虑热纯水的消耗量和设备费用两个方面,使用4个卧螺离心机效果最佳。

离心机依照洗涤顺序编号为4-1、4-2、4-3、4-4。在本工作中,为了避免引入新杂质对流通股中原有离子产生影响,以及对流通股产生扰乱,采用将离心机4-1的出口洗涤水与纯水不同的配比来调整杂质含量。各个离心机的洗涤标准如表4所示,根据上述方法确定的4个离心机进出口中杂质含量变化如图3和图4所示。

从图4可以看出,离心机4-3和4-4滤饼和洗水中的磷酸根的含量下降,而离心机4-1和4-2中并没有出现这种现象。通过对比再浆前后滤饼中二水磷

4 磷酸铁生产流程水系统集成优化

4.1 用水单元特征分析

4.1.1 离心机进出口流股的浓度关系 通过不断调整卧螺离心机进口的水量和杂质质量分数,可以获得卧螺离心机的进出口流股的浓度关系,进而确定离心机进出口的极限流股浓度。为方便表述,将4个

表4 各个离心机洗涤标准
Table 4 Washing standards for various centrifuges

Centrifuge	Total mass fraction of SO_4^{2-} and HSO_4^- in the filter cake
4-1	5.8740×10^{-3}
4-2	1.2543×10^{-3}
4-3	1.931×10^{-4}
4-4	5.19×10^{-5}

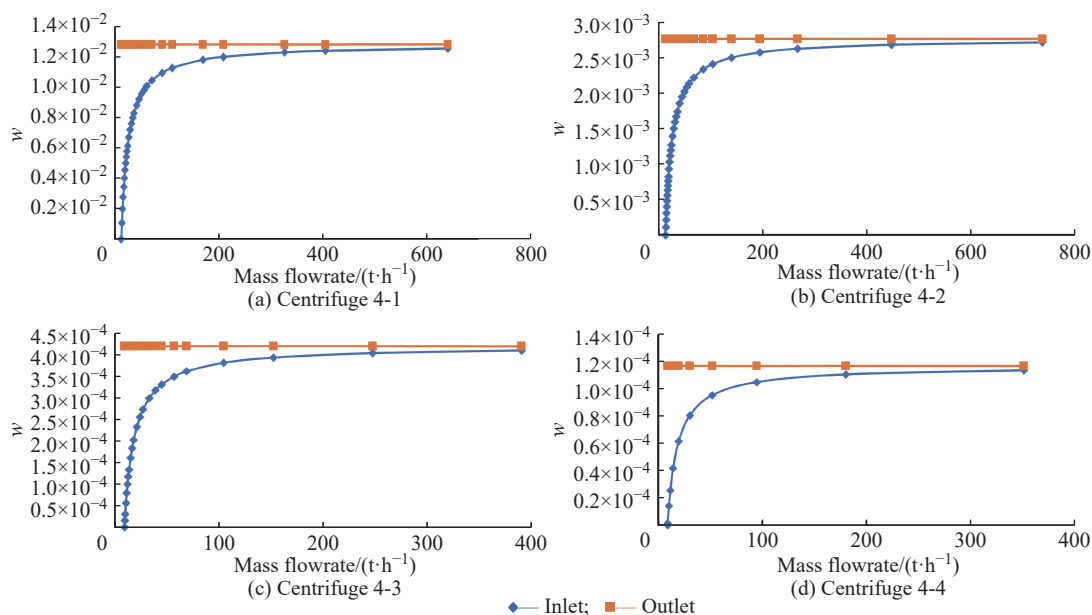


图 3 4 个卧螺离心机的进出口流股中 SO_4^{2-} 和 HSO_4^- 总的质量分数

Fig. 3 Total mass fraction of SO_4^{2-} and HSO_4^- in the inlet and outlet flow streams of four horizontal screw centrifuges

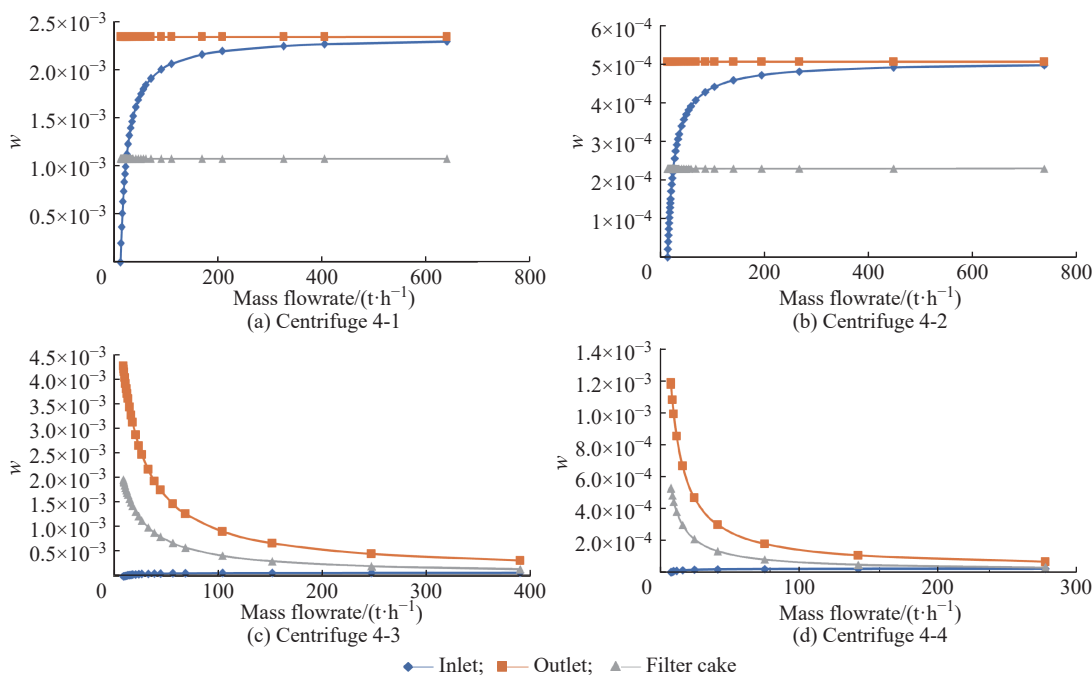


图 4 4 个卧螺离心机的进出口流股中 H_3PO_4 、 H_2PO_4^- 、 HPO_4^{2-} 和 PO_4^{3-} 总的质量分数

Fig. 4 Total mass fraction of H_3PO_4 、 H_2PO_4^- 、 HPO_4^{2-} and PO_4^{3-} in the inlet and outlet flow streams of four horizontal screw centrifuges

酸铁的质量流量发现,再浆操作中引入了大量磷酸,而在离心机 4-3 中存在的大量磷酸会与有价离子,如铁离子,发生反应生成二水磷酸铁,从而使得滤饼中二水磷酸铁固体增多,游离 Fe^{2+} 、 Fe^{3+} 和 PO_4^{3-} 减少。

4.1.2 硫酸亚铁溶解单元进出口流股的浓度关系

七水硫酸亚铁原料中有效成分质量分数只占 85%,存在大量杂质。洗涤水中杂质含量较少,水质较好,所以原料溶解用水可以考虑回用洗涤水。硫酸亚铁原料溶解过程需要加入磷酸调节铁磷比,而过滤洗

涤产生的洗涤水中对硫酸亚铁溶解过程产生影响的关键杂质极少,并含有 0.18% 的磷酸,因此,将过滤洗涤产生的废水回用于硫酸亚铁溶解过程不仅可以减少新鲜水的消耗,还可以减少磷酸的投入。以第一个离心机的洗涤水回用到硫酸亚铁的溶解过程为例,探究回用洗涤水对该过程新鲜水和磷酸投入量的影响。在此回用过程中,以硫酸亚铁溶液含水量为 83.60%、pH 为 2.27 两个条件为依据,所得回用洗涤水对硫酸亚铁溶解过程的影响如图 5 所示,硫酸亚

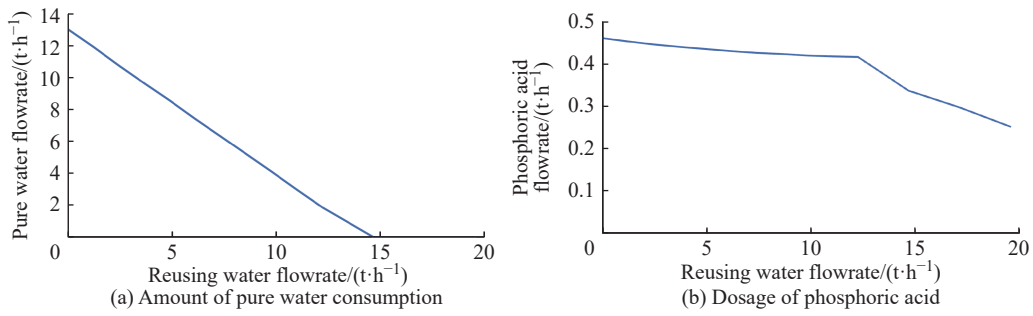


图5 回用洗涤水对硫酸亚铁溶解过程新鲜水和磷酸用量的影响

Fig. 5 Influences of reused washing water on the pure water and phosphoric acid consumption in the dissolution process of ferrous sulfate

铁溶解过程的水进出口关系如图6所示。

采用洗涤水溶解硫酸亚铁时, 洗涤水中含有的少量过氧化氢和磷酸根会与原料中的亚铁离子发生反应, 产生二水磷酸铁固体。然而, 这部分新生成的固体产品会在原料过滤步骤被除去, 导致一部分原料被提前消耗, 从而使最终的磷酸铁产品的产量变少。回用的洗涤水可以完全替代纯水, 即只使用洗涤水而不加入纯水, 但洗涤水的使用量不宜过多, 以免造成磷酸铁产品的过度损失。

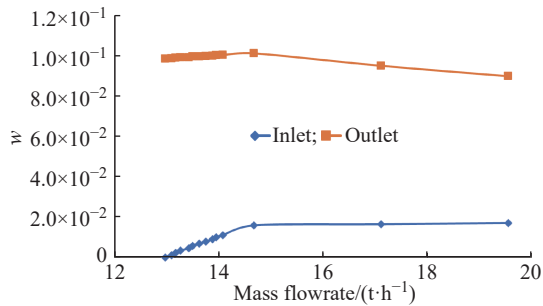


图6 硫酸亚铁溶解过程的进出口水中 SO_4^{2-} 和 HSO_4^- 的总质量分数

Fig. 6 Total mass fraction of SO_4^{2-} and HSO_4^- in the inlet and outlet water in the dissolution process of ferrous sulfate

4.1.3 磷酸二氢铵溶解单元进出口流股的浓度关系

磷酸二氢铵杂质含量较少, 因此该溶解过程对水质要求较硫酸亚铁高。以第2个离心机的洗涤水回用到磷酸二氢铵的溶解过程为例, 探究回用洗涤水对该过程新鲜水消耗量的影响。在此回用过程中, 以磷酸二氢铵溶液水含量 78.60% 为依据。所得回用洗涤水对磷酸二氢铵溶解过程的影响如图7所示, 磷酸二氢铵溶解过程的水进出口关系如图8所示。

在回用洗涤水到磷酸二氢铵溶解过程中, 洗涤水会影响磷酸二氢铵溶液的 pH 值, 采用纯水溶解磷酸二氢铵时, 溶液 pH 值为 3.6, 当回用洗涤水为 6.7 t/h 时, 溶液 pH 值已降至 3.0 以下, 而过酸的环境会增强关键组分磷酸二氢根的解离反应, 因此回用洗涤水不应过多。由图中可以看出, 当回用洗涤水流量为 6.70 t/h 时, 可以减少 87% 的新鲜水。

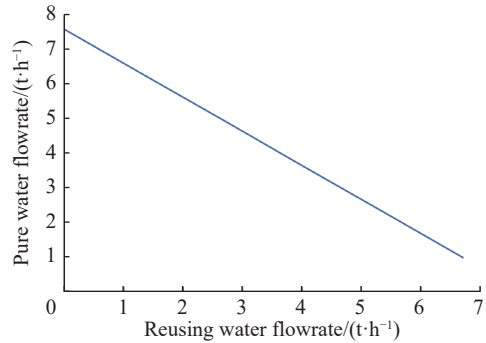


图7 回用洗涤水对磷酸二氢铵溶解过程新鲜水用量的影响

Fig. 7 Influence of reused washing water on the pure water consumption in the dissolution process of ammonium dihydrogen phosphate

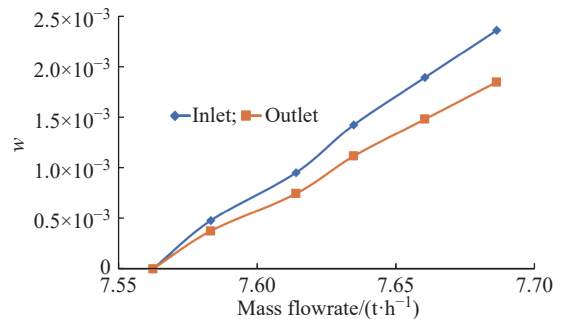


图8 磷酸二氢铵溶解过程的水中的 SO_4^{2-} 和 HSO_4^- 总质量分数

Fig. 8 Total mass fraction of SO_4^{2-} and HSO_4^- in the inlet and outlet water in the dissolution process of ammonium dihydrogen phosphate

4.1.4 极限进出口流股浓度及负荷的确定

根据图3所示4个离心机的进出口流股数据关系, 以及图6和图8所示两个溶解单元的进出口流股数据关系, 确定的用水单元极限数据如表5所示。其中, 将硫酸亚铁溶解过程编号为溶解1, 磷酸二氢铵溶解过程编号为溶解2, 这两个溶解单元用水与4个洗涤单元不同, 主要表现在溶解单元出口的流股为合成原料, 不能参与水回用过程, 因此只有进水而没有出水。为表示这种特殊之处, 将两个溶解单元的极限出口浓度设置为极大, 而使其他单元不能使用溶解单元的出

表 5 关键用水单元的极限进出口数据

Water-using unit	Water flowrate/ (t·h ⁻¹)	Limiting inlet mass fraction/ 10 ⁻⁶	Limiting outlet mass fraction/ 10 ⁻⁶	Load/ (kg·h ⁻¹)
Dissolution 1	15.57	16 135	20000	60.18
Dissolution 2	7.66	1894	20000	138.69
Centrifuge 4-1	15.98	1978	12 784	172.68
Centrifuge 4-2	15.98	460	2 765	36.83
Centrifuge 4-3	11.45	74	420	3.96
Centrifuge 4-4	11.45	16	116	1.15

水。考虑到设备的负荷限制,根据使用纯水时流率的 1.2 倍水量对应的进口杂质浓度确定极限进口浓度,其中溶解 2 单元由于溶液 pH 限制,取磷酸二氢铵溶液 pH=3 时对应的进口杂质浓度。

4.1.5 极限复合曲线的绘制 对表 5 中的 6 个用水单元进行洗涤水直接回用水网络的设计,采用图示法确定夹点位置,由图 9 可知,夹点位置在杂质浓度为 $12\,784 \times 10^{-6}$ 处。极限供水线的斜率为极限供水量的倒数,由此可以计算出最小新鲜水流量为 23.32 t/h,采用图示法确定过滤和溶解过程需要的最小新鲜水流量为未集成时新鲜水使用量的 35.19%。

根据图 9 所示极限曲线,采用最小匹配数法进行直接回用水网络设计,得到的最优直接回用水网络如图 10 所示。

4.2 水网络洗涤效果验证

由 4.1.5 节生成的水网络所得用水数据,使用 Aspen Plus 模拟软件对该水网络洗涤效果进行验证。在绘制极限复合曲线时,只考虑了各进出口单元浓度的关系,而未考虑进出口流量的变化,但在验证水网络时发现,由于滤饼中含有水分,因此对于 4 个洗涤单元而言存在生成水。针对这一问题,本文保持纯水的用量不变,来验证水网络的可行性。针对水损失和水生成的处理方式是将各单元出水根据水网络中出水数据按比例分配给其他单元。由上述处理方式验证水网络,得到集成前后滤饼杂质对比数据,如表 6 所示。

由表 6 数据可以看出,集成后关键杂质 SO_4^{2-} 和 HSO_4^- 的质量分数显著降低了 65.90%,其他杂质的含量同样有所降低。通过对比集成前后第一次挤压阶段的过滤器发现,水系统集成后,回用至原料溶解阶段的洗涤水中含有杂质和大量的水,使得进入第一次挤压阶段过滤器的流股中水量增大,导致在这个

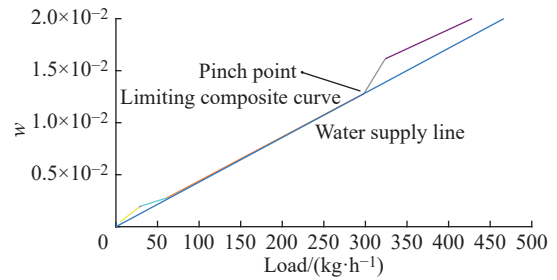


图 9 极限复合曲线

Fig. 9 Limiting composite curve

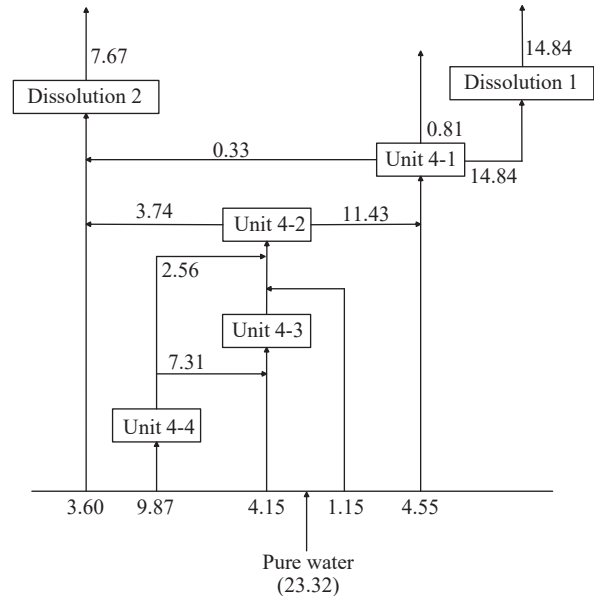


图 10 直接回用水网络设计方案(单位: t/h)

Fig. 10 Design of direct reuse water network (Unit: t/h)

表 6 集成前后过滤完成后滤饼杂质含量对比

Table 6 Comparison of impurity contents of cake after filtration before and after water integration

Component	Mass fraction/%	
	Before integration	After integration
H_3PO_4	2.89×10^{-2}	2.51×10^{-2}
H_3O^+	5.03×10^{-3}	4.54×10^{-3}
H_2PO_4^-	2.38×10^{-2}	2.25×10^{-2}
$\text{SO}_4^{2-}, \text{HSO}_4^-$	5.19×10^{-3}	1.77×10^{-3}
NH_4^+	6.10×10^{-4}	2.10×10^{-4}
Mg^{2+}	6.12×10^{-6}	2.09×10^{-6}
Al^{3+}	1.49×10^{-4}	5.09×10^{-5}
Mn^{2+}	3.88×10^{-6}	1.32×10^{-6}
Na^+	4.78×10^{-6}	1.63×10^{-6}
K^+	5.90×10^{-5}	2.01×10^{-5}

阶段中更多的杂质被排出。因此,在后续洗涤中,集成后的粗产品中的杂质较未集成时略微减少,洗涤结束后滤饼中杂质含量也少。第一次挤压阶段的过

滤器排出废水中杂质流量的对比如表7所示。

由表8可以看出,集成后的水网络纯水使用量与集成前相比减少了64.81%;由于洗水本身为酸性废水,回用至再浆和原料溶解时磷酸的使用量减少了4.33%。

本文使用集成后的水网络模拟所得的产品质量流量为3.50 t/h,产品流股中磷酸铁的质量分数为99.82%;集成前产品质量流量为3.50 t/h,产品流股中磷酸铁的质量分数为99.73%,集成后产品中磷酸铁的质量分数提高了0.09%。与2.5节建成的生产流程对比,集成后的水网络的用量减少了85.88%,同时洗涤过程废水排放量减少了99.24%。

表7 集成前后第一次挤压阶段过滤器排出杂质对比

Table 7 Comparison of impurities discharged by the filter in the first extrusion stage before and after water integration

Component	Flow rate/(kg·h ⁻¹)	
	Before integration	After integration
H ₃ PO ₄	360.41	451.61
H ₃ O ⁺	122.41	134.05
H ₂ PO ₄ ⁻	101.20	118.03
SO ₄ ²⁻ , HSO ₄ ⁻	2524.41	2719.96
NH ₄ ⁺	293.92	316.87
Mg ²⁺	2.97	3.20
Al ³⁺	72.53	78.15
Mn ²⁺	1.88	2.03
Na ⁺	2.32	2.50
K ⁺	28.64	30.86

表8 集成前后用水单元消耗纯水量对比

Table 8 Comparison of pure water consumption by water-using units before and after water integration

Water-using unit	Pure water consumption/(t·h ⁻¹)	
	Before integration	After integration
Dissolution 1	12.97	0
Dissolution 2	7.56	3.60
4-1	13.32	4.55
4-2	13.32	1.15
4-3	9.55	4.15
4-4	9.55	9.87
Total	66.27	23.32

5 结论

本工作使用 Aspen Plus V12 软件对以七水硫酸

亚铁和磷酸二氢铵为原料的磷酸铁生产过程进行了全流程模拟。针对磷酸铁生产过程中的用水单元进行了用水特征分析,从卧螺离心机数量和水系统集成两方面进行了用水优化研究。

(1) 增加卧螺离心机的数量可以减少热纯水的用量,综合考虑节水效果和设备投资,使用4个离心机为宜。

(2) 水系统集成使纯水的用量减少了85.88%;同时减少了洗涤过程的废水排放,废水排放量减少了99.24%。

(3) 水系统集成降低了磷酸铁产品中的杂质含量,产品中磷酸铁的含量提高了0.09%;通过回用洗水,使得磷元素重新被利用,提高了有价离子的利用效率,原料溶解和再浆阶段的磷酸使用量降低了4.33%。

本研究为磷酸铁生产流程的用水和节水提供了理论指导和方法依据。未来研究需进一步考量实际工业生产中的多重约束条件(如设备可靠性、工艺兼容性、成本效益比等),推动本方法及成果在复杂工业场景中的验证与实际应用。

参考文献:

- [1] ZHANG Y, HUO Q Y, DU P P, *et al.* Advances in new cathode material LiFePO₄ for lithium-ion batteries[J]. Synthetic Metals, 2012, 162(13/14): 1315-1326.
- [2] YI T F, LI X Y, LIU H P, *et al.* Recent developments in the doping and surface modification of LiFePO₄ as cathode material for power lithium ion battery[J]. Ionics, 2012, 18(6): 529-539.
- [3] 李永佳,魏润宏,鲁劲华,等. 电池级磷酸铁的制备及性能[J]. 化工进展, 2021, 40: 2227-2233.
- [4] 冯志昊. 低成本磷酸铁前驱体及磷酸铁锂正极材料的制备及性能研究[D]. 西安: 长安大学, 2022.
- [5] 柯君雄,王鏢,王彦强,等. 一种磷酸铁的制备方法[J]. 化工管理, 2023(19): 157-162.
- [6] SONG Y N, ZAVALIY P, MASATSUGU S, *et al.* New iron(III) phosphate phases: Crystal structure and electrochemical and magnetic properties[J]. Inorganic Chemistry, 2002, 41(22): 5778-5786.
- [7] 任相宇,刘少葵,刘勇奇,等. 磷酸铁前驱体制备方法研究进展[J]. 矿冶工程, 2022, 42: 92-95.
- [8] 盛国臣,余欣鑫,管庆永,等. 高性能电池级磷酸铁制备工艺过程控制研究[J]. 化工矿物与加工, 2025, 54: 25-34.
- [9] 孙少先,应皆荣. 氧化沉淀-陈化晶化法制备 FePO₄·2H₂O 及 LiFePO₄[J]. 电源技术, 2018, 42(10): 1473-1476.
- [10] 胡培,史德友,徐杉,等. 一种铁粉制备电池级磷酸铁的制

- 备方法: CN201910572856.9[P]. 2019-12-27.
- [11] JIANG D P, ZHANG X G, ZHAO T, *et al.* An improved synthesis of iron phosphate as a precursor to synthesize lithium iron phosphate[J]. *Bulletin of Materials Science*, 2020, 43(1): 1-8.
- [12] PENG Z D, CAO Y B, ZHOU Y L, *et al.* Synthesis of LiFePO_4 using $\text{FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ byproduct from TiO_2 production as raw material[J]. *Rare Metals*, 2009, 28(6): 612-617.
- [13] 刘彩, 程先明, 冯文平, 等. 电池级磷酸铁的合成工艺优化及其性能研究 [J]. *盐科学与化工*, 2024, 53: 17-22.
- [14] 李会娟. 电池级无水磷酸铁生产工艺研究 [J]. *化纤与纺织技术*, 2024, 53(9): 42-44.
- [15] 庄力, 程军军, 董凯, 等. 磷酸铁钠法工艺生产废水“零排放”工程实例 [J]. *广东化工*, 2025, 52: 97-99.
- [16] 张忠朝. 磷酸铁生产废水预处理高效沉淀池出水浊度高的原因及改进措施 [J]. *生态产业科学与磷氟工程*, 2025, 40(3): 94-98.
- [17] 白洁, 冯霄. 水系统集成方法分析 [J]. *化工进展*, 2006(12): 1471-1476, 1488.
- [18] 王天华, 冯霄. 水系统集成技术在甲醇厂的应用 [J]. *化学工程*, 2008, 36(4): 71-74.
- [19] 张云希, 冯霄, 刘桂莲. 再生循环水系统引入再生过程后夹点位置 [J]. *化工学报*, 2014, 65(6): 2179-2185.
- [20] 盛国臣, 彭海南, 李绍清, 等. 二水磷酸铁陈化过程对磷酸铁品质及形貌的影响研究 [J]. *生态产业科学与磷氟工程*, 2024, 39: 12-16.
- [21] 朱志全, 王春云, 陈玲. 一种针状纳米级二水磷酸铁的制备与表征 [J]. *江西化工*, 2018(6): 58-60.

Full-Process Simulation of Iron Phosphate Production and Integration of Water Systems

DING Baoling, YANG Minbo, FENG Xiao

(School of Chemical Engineering and Technology, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

Abstract: Based on industrial production data, the complete production process of iron phosphate was established in Aspen Plus V14 software. The process primarily uses ferrous sulfate heptahydrate and ammonium dihydrogen phosphate as raw materials, with hydrogen peroxide as the oxidant. The oxidation reaction yields iron phosphate dihydrate, and the final iron phosphate product is obtained through subsequent washing, drying, and calcination stages. Aiming to address the issue of high water consumption in the iron phosphate production process, research on water system integration and optimization was conducted. This was achieved by varying the number of horizontal screw centrifuges and optimizing water usage in both the raw material dissolution and product washing stages. The process simulation results show an annual iron phosphate output of 25 200 t, with a relative error of 0.8% compared to the design value. Taking into account both pure water consumption and equipment costs, the optimal configuration was determined to be the use of four horizontal screw centrifuges. Through water system integration, pure water consumption was reduced by 85.88%, and wastewater discharge from the washing process was cut by 99.24%.

Key words: synthetic ferric phosphate; full process simulation; water system integration; direct reuse; water pinch technology

(责任编辑: 王晓丽)