

学校编码: 10384

分类号_____密级

学号: 20720141150092

UDC

厦 门 大 学

硕 士 学 位 论 文

部分 Fe 基高温合金三元系相图的实验
研究与热力学计算

Experimental Investigation and Thermodynamic
Assessments in the Fe-based ternary systems

陈冰

指导教师姓名: 王翠萍 教授

专 业 名 称: 材料工程

论文提交日期: 2017 年 月

论文答辩时间: 2017 年 月

学位授予日期: 2017 年 月

答辩委员会主席:

评 阅 人:

2017 年

厦门大学博硕士学位论文摘要库

厦门大学学位论文原创性声明

本人呈交的学位论文是本人在导师指导下，独立完成的研究成果。本人在论文写作中参考其他个人或集体已经发表的研究成果，均在文中以适当方式明确标明，并符合法律规范和《厦门大学研究生学术活动规范（试行）》。

另外，该学位论文为（）课题（组）的研究成果，获得（）课题（组）经费或实验室的资助，在（）实验室完成。（请在以上括号内填写课题或课题组负责人或实验室名称，未有此项声明内容的，可以不作特别声明。）

声明人（签名）：

年 月 日

厦门大学博硕士学位论文摘要库

厦门大学学位论文著作权使用声明

本人同意厦门大学根据《中华人民共和国学位条例暂行实施办法》等规定保留和使用此学位论文，并向主管部门或其指定机构送交学位论文（包括纸质版和电子版），允许学位论文进入厦门大学图书馆及其数据库被查阅、借阅。本人同意厦门大学将学位论文加入全国博士、硕士学位论文共建单位数据库进行检索，将学位论文的标题和摘要汇编出版，采用影印、缩印或者其它方式合理复制学位论文。

本学位论文属于：

1. 经厦门大学保密委员会审查核定的保密学位论文，
于 年 月 日解密，解密后适用上述授权。

2. 不保密，适用上述授权。

（请在以上相应括号内打“√”或填上相应内容。保密学位论文应是已经厦门大学保密委员会审定过的学位论文，未经厦门大学保密委员会审定的学位论文均为公开学位论文。此声明栏不填写的，默认为公开学位论文，均适用上述授

声明人（签名）：

年 月 日

厦门大学博硕士学位论文摘要库

摘要

目前，铁基高温合金已经成为国防、能源、航空以及核工业等领域广泛应用的主要高温材料之一。相图是材料设计的基础，对新材料的研发具有十分重要的指导意义。本研究采用实验研究与热力学计算相结合的方法对部分铁基高温合金三元系相图进行了研究，主要研究结果如下：

(1) 本研究采用合金法、电子探针显微分析仪(EPMA)和 X 射线衍射(XRD)技术，测定了 Fe-Mo-Nb 三元系在 1000°C、1200°C 以及 1300°C 的等温截面相图。实验结果表明，具有相同 D85 晶体结构的 $\mu\text{Fe}_7\text{Nb}_6$ 和 $\mu\text{Fe}_7\text{Mo}_6$ 相并未形成连续的固溶体化合物相，出现了 $\text{BCC}(\text{Mo},\text{Nb})+\mu\text{Fe}_7\text{Nb}_6+\varepsilon\text{Fe}_2\text{Nb}$ ， $\text{BCC}(\text{Fe})+\varepsilon\text{Fe}_2\text{Nb}+\mu\text{Fe}_7\text{Mo}_6$ 和 $\text{BCC}(\text{Mo},\text{Nb})+\varepsilon\text{Fe}_2\text{Nb}+\mu\text{Fe}_7\text{Mo}_6$ 三相平衡。结合文献报道，以本研究的实验结果为依据，采用 CALPHAD 方法计算了该三元系的相图，计算结果与实验结果取得较好的一致性。

(2) 采用合金法、电子探针显微分析仪(EPMA)和 X 射线衍射(XRD)技术，对 Fe-Ta-Nb 三元系在 1100°C、1200°C 和 1300°C 时的等温截面相图进行了实验测定。实验结果表明，具有相同 C14 晶体结构的 $\varepsilon\text{Fe}_2\text{Nb}$ 和 $\varepsilon\text{Fe}_2\text{Ta}$ 相形成了连续的 $\varepsilon\text{Fe}_2(\text{Nb},\text{Ta})$ 化合物相；同时具有相同 D85 晶体结构的 $\mu\text{Fe}_7\text{Nb}_6$ 和 $\mu\text{Fe}_7\text{Ta}_6$ 相形成了连续的 $\mu\text{Fe}_7(\text{Nb},\text{Ta})_6$ 固溶体化合物相。基于本研究的实验结果，通过 CALPHAD 方法计算了 Fe-Ta-Nb 三元系相图，获得了自洽性良好的热力学参数。

(3) 采用合金法、电子探针显微分析仪(EPMA)和 X 射线衍射(XRD)技术，测定了 Cr-Mo-Nb 三元系在 1000°C 和 1200°C 时的等温截面相图。在 1000°C 和 1200°C 的实验结果中均出现 $\text{BCC}_1+\text{BCC}_2$ 的两相分离区。结合本研究的实验结果和相关的实验报道，利用 CALPHAD 方法优化与计算了该三元系的相图，同时计算了 Nb 元素的添加对 Cr-Mo 二元系中 BCC 相的两相分离的影响，结果表明 Nb 元素使 Cr-Mo 二元系中 BCC 相的两相分离温度明显提高。

关键词：铁基高温合金；CALPHAD；相图；热力学；平衡组织

厦门大学博硕士论文摘要库

Abstract

Iron-based superalloys are widely used in the field of high-temperature applications like components for jet engines and gas turbines, including blades, disks, rotors, and combustor / burner cans, as well as compressor and turbine cases. Phase diagram is the basis of material design, which has a significance guide to the research and development of the new material. In this work, phase equilibria of part Iron-based superalloys ternary systems were studied using a combined method of experimentally determined and thermodynamic assessment. Major contents are listed below:

(1) the phase equilibria of the Fe-Mo-Nb ternary system at 1000 °C, 1200 °C and 1300 °C were experimentally determined using a combined method of electron probe microanalysis and X-ray diffraction on the equilibrated alloys. The obtained experimental results show that the existences of several three-phase equilibria (*i.e.*, $\text{BCC}(\text{Mo,Nb})+\mu\text{Fe}_7\text{Nb}_6+\varepsilon\text{Fe}_2\text{Nb}$, $\text{BCC}(\text{Fe})+\varepsilon\text{Fe}_2\text{Nb}+\mu\text{Fe}_7\text{Mo}_6$ and $\text{BCC}(\text{Mo,Nb})+\varepsilon\text{Fe}_2\text{Nb}+\mu\text{Fe}_7\text{Mo}_6$) are identified in all studied isothermal sections. Based on the experimental data, the phase equilibria of Fe-Mo-Nb ternary system were also thermodynamically optimized using CALPHAD method. And the calculated results are in good agreement with the experimental investigations in the Fe-Mo-Nb ternary system.

(2) the phase equilibria of the Fe-Ta-Nb ternary system at 1100 °C, 1200 °C and 1300°C were experimentally determined. The investigations lead to following conclusions: (1) the $\mu\text{Fe}_7\text{Ta}_6$ and $\mu\text{Fe}_7\text{Nb}_6$ phases form a $\mu\text{Fe}_7(\text{Ta,Nb})_6$ monophasic; (2) the laves $\varepsilon\text{Fe}_2\text{Ta}$ and $\varepsilon\text{Fe}_2\text{Nb}$ phases also form a $\varepsilon\text{Fe}_2(\text{Ta,Nb})$ monophasic in the current work. A consistent thermodynamic data set for Fe-Ta-Nb ternary system was obtained using CALPHAD method. And the calculated phase diagrams are in satisfactory agreement with the experimental investigations of the Fe-Ta-Nb ternary

system in this work.

(3) In the present work, the phase equilibria of the Cr-Mo-Nb ternary system at 1000 °C and 1200 °C were experimentally determined using a combined method of electron probe microanalysis and X-ray diffraction on the equilibrated alloys. The existence of three-phase equilibria $BCC_1+BCC_2+Cr_2Nb$ is identified in all studied isothermal sections. Based on the experimental data of phase equilibria, the Cr-Mo-Nb ternary system was also thermodynamically optimized using the CALPHAD method. The BCC phase separation of the Cr-Mo system with different Nb additions also was calculated, which is in good agreement with the experimental investigations in the Cr-Mo-Nb ternary system.

Key words: Iron-based superalloys; CALPHAD; Phase diagrams; Thermodynamic; Phase equilibration

目录

摘要	I
Abstract.....	III
第一章 绪论	1
1.1 Fe 基高温合金的研究概况	1
1.1.1 铁基高温合金的种类及应用	2
1.1.2 铁基高温合金中合金化元素的作用	3
1.2 相图实验测定及相图计算	5
1.2.1 相图的实验测定	5
1.2.2 材料设计的新途径及 CALPHAD 方法概述	5
1.2.2.1 材料设计的新途径	5
1.2.2.2 CALPHAD 方法概述	7
1.3 本研究的研究目的及主要内容	9
参考文献	11
第二章 实验方法与热力学模型	14
2.1 本研究中采用的实验方法	14
2.1.1 合金样品的制备	14
2.1.2 热处理方法	14
2.1.3 显微组织观察	15
2.1.4 成分分析	15
2.1.5 X-ray 结构分析	15
2.2 本研究中采用的热力学模型	15
2.2.1 纯组元	16
2.2.2 液相和端际固溶体体相	16

2.2.3 化学计量比化合物.....	18
2.2.4 金属间化合物固溶体.....	18
参考文献	22
第三章 Fe-Mo-Nb 三元系相平衡的实验研究与热力学计算.....	23
3.1 引言	23
3.2 Fe-Mo-Nb 三元系相图.....	23
3.2.1 基础二元系相图.....	23
3.2.1.1 Fe-Nb 二元系相图	23
3.2.1.2 Fe-Mo 二元系相图.....	25
3.2.1.3 Mo-Nb 二元系相图.....	25
3.2.2 Fe-Mo-Nb 三元系的相图信息.....	26
3.3 Fe-Mo-Nb 三元系等温截面相图的实验研究.....	26
3.3.1 实验方法.....	26
3.3.2 Fe-Mo-Nb 三元系相图的实验结果与讨论.....	27
3.4 Fe-Mo-Nb 三元系相图的热力学优化与计算.....	28
3.4.1 Fe-Mo-Nb 三元系相图的计算结果.....	29
3.5 小结	30
参考文献	52
第四章 Fe-Ta-Nb 三元系相平衡的实验研究与热力学计算.....	56
4.1 引言.....	56
4.2 Fe-Ta-Nb 三元合金系相图	56
4.2.1 基础二元系相图.....	56
4.2.1.1 Fe-Ta 二元系相图	56
4.2.1.2 Fe-Nb 二元系相图	57
4.2.1.3 Ta-Nb 二元系相图.....	58
4.2.2 Fe-Ta-Nb 三元合金系相图	59

4.3 Fe-Ta-Nb 三元系等温截面相平衡的实验研究	59
4.3.1 实验方法	59
4.3.2 Fe-Ta-Nb 三元系的实验结果与讨论	60
4.4 Fe-Ta-Nb 三元系相图的热力学优化与计算	61
4.4.1 Fe-Ta 二元系相图的热力学再优化与计算	61
4.4.2 Fe-Ta-Nb 三元系相图的计算结果	61
4.5 小结	62
参考文献	80
第五章 Cr-Mo-Nb 三元系相平衡的实验研究与热力学计算	85
5.1 引言	85
5.2 Cr-Mo-Nb 三元合金系相图	85
5.2.1 基础二元系相图	85
5.2.1.1 Cr-Mo 二元系相图	85
5.2.1.2 Cr-Nb 二元系相图	87
5.2.1.3 Mo-Nb 二元系相图	87
5.2.2 Cr-Mo-Nb 三元合金系相图	88
5.3 Cr-Mo-Nb 三元系等温截面相图的实验研究	89
5.3.1 实验方法	89
5.3.2 Cr-Mo-Nb 三元系的实验结果与讨论	89
5.4 Cr-Mo-Nb 三元系相图的热力学优化与计算	90
5.5 小结	91
参考文献	106
第六章 结论	113
致谢	115
攻读硕士学位期间科研成果	116

厦门大学博硕士学位论文摘要库

CONTENTS

Abstract in Chinese	I
Abstract in English	III
CHAPTER 1 Introduction	1
1.1 Research status of Iron-based superalloys	1
1.1.1 Classification and application of Iron-based superalloys	2
1.1.2 The role of alloy elements in Iron-based superalloys	3
1.2 Experimental determination and calculation of phase diagram	5
1.2.1 Experimental determination of phase diagram	5
1.2.2 New approach to material research and introduction of CALPHAD method.....	5
1.2.2.1 New approach to material research.....	5
1.2.2.2 Introduction of CALPHAD method.....	7
1.3 Objective and major contents of this work	9
References	11
CHAPTER 2 Experimental methods and thermodynamic models	14
2.1 Experimental methods used in this work	14
2.1.1 Preparation of alloy samples	14
2.1.2 Heat treatment method.....	14
2.1.3 Observation of microstructures.....	15
2.1.4 Determination of alloy composition	15
2.1.5 Analyzation of structures by XRD	15
2.2 Thermodynamic models used in this work	15
2.2.1 Pure elements model.....	16

2.2.2 Liquid and solution model	16
2.2.3 Stoichiometric phase model	18
2.2.4 Extended solid solution model	18
References	22
CHAPTER 3 Experimental investigation and thermodynamic calculation of the phase equilibria in the Fe-Mo-Nb ternary system	23
3.1 Introduction	23
3.2 Phase equilibria information of the Fe-Mo-Nb ternary system	23
3.2.1 Basic binary system	23
3.2.1.1 Fe-Nb binary system	23
3.2.1.2 Fe-Mo binary system	25
3.2.1.3 Mo-Nb binary system	26
3.2.2 Fe-Mo-Nb ternary system	26
3.3 Experimental investigation of the Fe-Mo-Nb ternary system	26
3.3.1 Experimental method	26
3.3.2 Experimental results and discussion	27
3.4 Thermodynamic optimization and calculation of the Fe-Mo-Nb ternary system	28
3.4.1 of the Fe-Mo-Nb ternary system of the Fe-Mo-Nb ternary system	29
3.5 Conclusions	30
References	52
CHAPTER 4 Experimental investigation and thermodynamic calculation of the phase equilibria in the Fe-Ta-Nb ternary system	56
4.1 Introduction	56
4.2 Phase equilibria information of the Fe-Ta-Nb ternary system	56
4.2.1 Basic binary system	56

Degree papers are in the "[Xiamen University Electronic Theses and Dissertations Database](#)". Full texts are available in the following ways:

1. If your library is a CALIS member libraries, please log on <http://etd.calis.edu.cn/> and submit requests online, or consult the interlibrary loan department in your library.
2. For users of non-CALIS member libraries, please mail to etd@xmu.edu.cn for delivery details.

厦门大学博硕士论文摘要库