

学校编码: 10384  
学号: 20720101150057

分类号\_\_\_\_\_密级\_\_\_\_\_  
UDC\_\_\_\_\_

厦 门 大 学

硕 士 学 位 论 文

部分取向硅钢合金体系热力学数据库的  
建立及合金设计

Thermodynamic Database and Alloy Design in some  
Oriented Silicon Steel Systems

胡 杨

指导教师姓名: 王翠萍教授

专业名称: 材料加工工程

论文提交日期: 2013年5月

论文答辩日期: 2013年 月

学位授予日期: 2013年 月

2013年 5月

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，均适用上述授权。）

声明人（签名）：

年 月 日

厦门大学博硕士学位论文摘要库

## 摘要

硅钢亦称电工钢，是电力和电讯工业用以制造发电机、电动机、变压器、互感器、继电器以及其它电器仪表的重要磁性材料。相图是材料设计的重要理论基础，在金属材料成分设计中有重要应用，因此，有必要掌握取向硅钢的相图和热力学信息。本论文通过实验测定和热力学计算两种途径，对取向硅钢部分铁基相平衡进行了实验测定和热力学计算，主要研究工作如下：

(1) 实验测定了 Fe-Si-Zr 三元系在 1000℃ 和 1100℃ 时全成分范围的等温截面相图，并且发现一个新相。基于本研究的实验结果和文献报道的实验计算数据，利用 CALPHAD 技术，对 Fe-Si-Zr 三元系相图进行了热力学优化与计算。

(2) 实验测定了 Fe-Si-Mn 和 Fe-Si-S 三元系在 1100℃, 1200℃ 和 1300℃ 富铁侧等温截面相图。基于本研究的实验结果和文献报道的实验计算数据，利用 CALPHAD 技术，对 Fe-S、Si-S 两个二元系和 Fe-Si-Mn、Fe-Si-S 两个三元系相图进行了热力学优化与计算。

(3) 基于本研究的热力学计算结果和文献报道的其他二元系和三元系热力学信息，建立了 Fe-Si-Mn-Al-C-S-Zr 七元系相图的热力学数据库。

本研究获得的相平衡实验结果以及优化获得的热力学参数，将作为取向硅钢热力学数据库的一个重要组成部分，同时，该研究结果将为取向硅钢的成分设计及制备工艺提供重要的理论依据。

关键词： 取向硅钢； CALPHAD； 相图； 热力学

厦门大学博硕士学位论文摘要库

## Abstract

The phase diagram is an important theoretical basis for materials design, which plays an important role on the designing composition of metal material. Therefore, it is necessary to acknowledge phase diagram and thermodynamic information of oriented silicon steel. The experimental determination and thermodynamic assessment of phase equilibria in the partial Fe-based alloys of oriented silicon steel systems were carried out in this paper. The major research is listed as follows:

(1) The phase equilibria of the Fe-Si-Zr ternary system at 1000°C and 1100°C have been experimentally determined in this paper, and a new phase are found in both temperatures. Based on the experimental results of this study and reported literature, CALPHAD technology has been used to do research for thermodynamic optimization and calculation of the Fe-Si-Zr ternary phase diagrams.

(2) The phase equilibria in the Fe-rich corner of the Fe-Si-Mn and Fe-Si-S ternary system at 1100°C, 1200°C and 1300°C have been experimentally determined in this paper. Based on the experimental results of this study and reported literature, CALPHAD technology has been used to do research for thermodynamic optimization and calculation of the Fe-S, Si-S binary phase system and Fe-Si-Mn, Fe-Si-S ternary phase diagrams.

(3) Based on the research results and reported literature of other binary and ternary thermodynamic information, the establishment of thermodynamic database for the Fe-Si-Mn-Al-C-S-Zr system has been made in this paper.

The experimental results and thermodynamic parameters acquired in this study will serve as an important part of the thermodynamic database of oriented silicon steel. At the same time, the results in this paper will provide an important theoretical basis for component design of oriented silicon steel and preparation process.

Keywords: Oriented silicon steel; CALPHAD; Phase diagram; Thermodynamics

厦门大学博硕士学位论文摘要库

# 目 录

摘要.....	I
Abstract.....	III
<b>第一章 绪论 .....</b>	<b>1</b>
<b>1.1 硅钢概述 .....</b>	<b>1</b>
1.1.1 国内外硅钢的发展现状.....	1
1.1.2 取向硅钢的生产工艺.....	3
1.1.3 取向硅钢的性能特点.....	5
1.1.4 合金元素对取向硅钢性能的作用.....	5
<b>1.2 相图及相图计算方法 .....</b>	<b>7</b>
1.2.1 相图及其测定方法.....	8
1.2.2 相图计算方法.....	10
1.2.3 相图计算中常用的热力学模型.....	16
<b>1.3 取向硅钢相图的研究现状 .....</b>	<b>20</b>
<b>1.4 本研究的目的和内容 .....</b>	<b>21</b>
<b>参 考 文 献 .....</b>	<b>22</b>
<b>第二章 实验方法与热力学模型 .....</b>	<b>24</b>
<b>2.1 本研究中采用的实验方法 .....</b>	<b>24</b>
2.1.1 合金样品的制备.....	24
2.1.2 热处理方法.....	24
2.1.3 显微组织观察.....	25
2.1.4 成分分析.....	25
2.1.5 X-ray 结构分析.....	25
<b>2.2 本研究中采用的热力学模型 .....</b>	<b>26</b>
2.2.1 纯组元.....	26
2.2.2 液相和端际固溶体相.....	27

2.2.3 化学计量比化合物相 .....	29
2.2.4 金属间化合物溶体相 .....	29
<b>参 考 文 献 .....</b>	<b>31</b>
<b>第三章 Fe-Si-Zr 三元系相图的实验测定与热力学计算 .....</b>	<b>32</b>
<b>3.1 引言 .....</b>	<b>32</b>
<b>3.2 Fe-Si-Zr 三元系的实验相图信息 .....</b>	<b>32</b>
3.2.1 基础二元系 .....	32
3.2.2 Fe-Si-Zr 三元系 .....	34
<b>3.3 Fe-Si-Zr 三元系相平衡的实验测定 .....</b>	<b>42</b>
3.3.1 实验方法 .....	42
3.3.2 Fe-Si-Zr 三元系相图的实验结果与讨论 .....	42
<b>3.4 Fe-Si-Zr 三元系相图的热力学优化与计算 .....</b>	<b>60</b>
3.4.1 热力学优化与计算过程 .....	60
3.4.2 计算结果与讨论 .....	60
<b>参 考 文 献 .....</b>	<b>71</b>
<b>第四章 Fe-Si-(S, Mn) 三元系富铁侧相图实验测定与热力学计算 .....</b>	<b>74</b>
<b>4.1 引言 .....</b>	<b>74</b>
<b>4.2 Fe-Si-(S, Mn) 三元系的实验相图信息 .....</b>	<b>74</b>
4.2.1 基础二元系 .....	74
4.2.2 Fe-Si-(S, Mn) 三元系 .....	76
<b>4.3 Fe-Si-S 三元系富铁侧相图实验测定与热力学计算 .....</b>	<b>84</b>
4.3.1 实验方法 .....	84
4.3.2 Fe-Si-S 三元系相图的实验结果与讨论 .....	84
4.3.3 Fe-Si-S 三元系相图热力学优化与计算 .....	86
<b>4.4 Fe-Si-Mn 三元系富铁侧相图实验测定与热力学计算 .....</b>	<b>102</b>
4.4.1 实验方法 .....	102
4.4.2 Fe-Si-Mn 三元系相图的实验结果与讨论 .....	102
4.4.3 Fe-Si-Mn 三元系相图的热力学优化与计算 .....	104
<b>参 考 文 献 .....</b>	<b>118</b>

<b>第五章 部分取向硅钢系热力学数据库的建立及其应用</b> .....	<b>121</b>
5.1 引言 .....	121
5.2 Fe-Si-Mn-Al-C-S-Zr 系热力学数据库的建立 .....	121
5.2.1 Zr-X (C, Mn, S) 各二元系相图的热力学优化与计算 .....	121
5.2.2 Fe-Si-Mn-Al-C-S-Zr 系热力学数据库概述 .....	123
5.3 Fe-Si-Mn-Al-C-S-Zr 系热力学数据库的应用 .....	130
5.3.1 基础二元系相图的计算 .....	130
5.3.2 基础三元系相图的计算 .....	131
5.3.3 微量合金元素对取向硅钢中析出相的影响 .....	143
参 考 文 献 .....	153
<b>第六章 总结</b> .....	<b>156</b>
致 谢 .....	157
攻读硕士学位期间论文发表目录 .....	158

厦门大学博硕士学位论文摘要库

# CONTENTS

<b>Abstract in Chinese</b> .....	I
<b>Abstract in English</b> .....	III
<b>Chapter 1 Introduction</b> .....	<b>1</b>
<b>1.1 Summaries of silicon steel</b> .....	<b>1</b>
1.1.1 Development of the silicon steel .....	3
1.1.2 The production of processing in the silicon steel .....	5
1.1.3 Properties of oriented silicon steel .....	5
1.1.4 The effect of alloying elements in the properties of oriented silicon steel.....	5
<b>1.2 Phase diagram and CALPHAD method</b> .....	<b>7</b>
1.2.1 Phase diagram and its determination method.....	8
1.2.2 CALPHAD method .....	10
1.2.3 Thermodynamic model commonly used in the phase diagram calculation ....	16
<b>1.3 Phase diagram of oriented silicon steel</b> .....	<b>20</b>
<b>1.4 Major purpose and content of this work</b> .....	<b>21</b>
<b>Reference</b> .....	<b>22</b>
<b>CHAPTER 2 Experimental methods and thermodynamic models</b> ....	<b>24</b>
<b>2.1 Experimental methods used in this work</b> .....	<b>24</b>
2.1.1 The preparation of alloy samples .....	24
2.1.2 Heat treatment method .....	24
2.1.3 Observation of microstructures .....	25
2.1.4 Determination of alloy composition.....	25
2.1.5 Analyzation of structures by XRD .....	25
<b>2.2 Thermodynamic models used in this work</b> .....	<b>26</b>
2.2.1 Pure elements .....	26
2.2.2 Liquid and other solutions .....	27
2.2.3 Stoichiometric phases.....	29

2.2.4 Intermetallic compounds .....	29
<b>Reference .....</b>	<b>31</b>
<b>CHAPTER 3 Experimental determination and thermodynamic assessment in the Fe-Si-Zr ternary system .....</b>	<b>32</b>
<b>3.1 Introduction.....</b>	<b>32</b>
<b>3.2 Information on the Fe-Si-Zr ternary system .....</b>	<b>32</b>
3.2.1 Basic binary system.....	32
3.2.2 Fe-Si-Zr ternary system.....	34
<b>3.3 Experimental investigation of phase equilibria in the Fe-Si-Zr ternary system .....</b>	<b>42</b>
3.3.1 Experimental method .....	42
3.3.2 Results and discussion.....	60
<b>3.4 Thermodynamic assessment of phase equilibria in the Fe-Si-Zr ternary system .....</b>	<b>60</b>
3.4.1 Optimization procedure.....	60
3.4.2 Results and discussion.....	60
<b>Reference .....</b>	<b>71</b>
<b>CHAPTER 4 Experimental Determination and Thermodynamic Assessment at Fe-rich corner in Fe-Si-(S, Mn) ternary system.....</b>	<b>74</b>
<b>4.1 Introduction.....</b>	<b>74</b>
<b>4.2 Information on the Fe-Si-(S, Mn) ternary system.....</b>	<b>74</b>
4.2.1 Basic binary system.....	74
4.2.2 Fe-Si-(S, Mn) ternary system .....	76
<b>4.3 Experimental determination and thermodynamic assessment at Fe-rich corner in Fe-Si-S ternary system .....</b>	<b>84</b>
4.3.1 Experimental method .....	84
4.3.2 Experimental results and discussion .....	84
4.3.3 Optimization procedure and results.....	86

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](mailto:etd@xmu.edu.cn) for delivery details.

厦门大学博硕士论文摘要库