

# Fe-C-Ta 三元系相关关系的实验测定与热力学计算

徐展源, 欧阳雪枚, 尹付成, 李 智

(湘潭大学 材料设计及制备技术湖南省重点实验室, 湖南 湘潭 411105)

**摘 要:**采用差热分析(DTA)测定了 Fe-C-Ta 三元系中 Fe-XC-0.1Ta 和 Fe-XC-0.5Ta 2 个垂直截面,并选取 Fe-2.93C-0.1Ta 和 Fe-2.31C-0.5Ta 2 种合金,对其相变过程进行了分析。利用 CALPHAD 方法,并结合实验数据对该体系的相关系进行了热力学优化。结果表明,计算结果与实验结果符合较好。该体系富铁角的液相面投影存在 4 个四相恒温反应: Liquid+bcc  $\leftrightarrow$  fcc+TaC, Liquid  $\leftrightarrow$  bcc+Fe<sub>2</sub>Ta+TaC, Liquid  $\leftrightarrow$  Fe<sub>3</sub>C+TaC+fcc, Liquid+Ta<sub>2</sub>C  $\leftrightarrow$  TaC+Fe<sub>2</sub>Ta, 反应温度分别为 1443.26、1413.90、1122.42 及 1508.64 °C。Fe-XC-0.1Ta 合金和 Fe-XC-0.5Ta 合金在 726.6 °C 发生共析反应。

**关键词:** Fe-C-Ta; 差热分析; 相图; CALPHAD

中图分类号: TG113.12

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2017)01-0097-07

钽是强碳、氮化物形成元素,所形成的碳、氮化合物硬度极高且在高温下非常稳定,因此钽作为析出强化和固溶强化元素得到广泛的研究与应用<sup>[1]</sup>。Berthod 等人<sup>[2]</sup>研究了 TaC 强化的富铬铁基和铁镍基合金在 100~1200 °C 之间的热膨胀行为。Tanigawa 等人<sup>[3]</sup>的研究表明, TaC 颗粒的析出对材料的蠕变性能有较大的改善作用。Xia 等人<sup>[4]</sup>研究了 TaC 对核聚变堆用低活化铁素体/马氏体(RAFM)钢晶粒粗化的影响。Berthod 等人<sup>[5,6]</sup>通过实验并结合计算研究了热处理温度对含钽合金组织的影响。郑亮等人<sup>[7]</sup>研究了不同钽含量对低 Cr 高 W 铸造镍基高温合金显微组织的影响。孙跃军等人<sup>[8]</sup>研究了 Ta 对镍基单晶合金微观组织及蠕变机制的影响规律。赵坦等人<sup>[9]</sup>研究了 Ta 对第 2 代定向柱晶合金中初生碳化物的形成与分解的影响。冷崇燕等人<sup>[10]</sup>研究了不同 Ta 离子注入剂量对 Ti6Al4V 合金耐磨性的影响。史显波等人<sup>[11]</sup>研究了钽在 Fe-C-Ta 合金中的强化作用及机制。然而,钽作为合金元素在商业用钢中的应用还很少,在钢中的作用机制仍不十分清楚,因此研究钽元素在钢中的作用机理具有重要的实际意义。

相图是合金成分设计及热加工工艺制定的重要依据,其中垂直截面在实际应用中显得尤为重要。20 世纪 50 年代以来对 Fe-C-Ta 三元系的关注主要集中在等温截面、液相面及相的研究上。Raghavan 等人<sup>[12]</sup>研究了该体系的 1100 °C 等温截面,Amara 等人<sup>[13]</sup>测定了

富铁角的液相面。Xia 等人<sup>[4]</sup>研究了体系在 780 和 1000 °C 下的扩散通道。Okamoto 等人<sup>[15]</sup>和 Frisk 等人<sup>[16]</sup>计算评估了 Ta-C 二元系,在此二元系中存在着 TaC 和 Ta<sub>2</sub>C 2 个中间相。Danon 等人<sup>[17]</sup>及 Witusiewicz 等人<sup>[18]</sup>等进一步优化了 Fe-Ta 二元系。Okamoto<sup>[19]</sup>对 Fe-C 双重相图进行了评估。对该三元系合金垂直截面的研究尚未见报道。因此,本工作采用差热分析方法(DTA)测定了 Fe-XC-0.1Ta 和 Fe-XC-0.5Ta 垂直截面,利用 CALPHAD 方法对该三元体系的相关系进行了热力学优化。将结果与已报道的实验结果相比较,以期更全面、准确地掌握该合金体系的相平衡信息,为新型含钽商业用钢的研究开发提供必要的理论依据。

## 1 差热分析实验

### 1.1 实验方法

利用磁控钨极非自耗电弧炉熔铸了 2 组 Fe-C-Ta 三元合金,共 22 个试样。实验所用原料为电解铁,电解钽和石墨,纯度均为 99.99%。配制试样时,用精度为 0.1 mg 的 FA1004 型电子分析天平称量原材料,总量为 6 g。为了使铸锭成分均匀,试样反复熔炼 5 次以上。考虑熔炼过程中碳的损失,使用 LECOCS600 型红外碳硫分析仪对制备好的试样的含碳量进行了检测,结果如表 1 所示。

差热分析是在 DSC-NETZSCH 404F 型差热分析仪上进行的。测试前,仪器测温系统用钨,锡,锌,

收稿日期: 2015-12-16

基金项目: 国家自然科学基金(51471141)

作者简介: 徐展源,男,1990 年生,硕士,湘潭大学材料科学与工程学院,湖南 湘潭 411105,电话: 0731-58298428, E-mail: xu201230071633@163.com

表 1 实验用合金成分及相变温度

Table 1 Composition and phase transformation temperatures of experimental alloy

Sample No.	Mass fraction, ω/%			Phase transformation temperature/°C			
	C	Ta	Fe				
A1	0	0.1	Bal.	760.6	907.5	1392.0	—
A2	0.57	0.1	Bal.	714.3	1422.0	1479.0	1487.0
A3	0.91	0.1	Bal.	714.1	1373.7	1460.0	1471.5
A4	1.15	0.1	Bal.	696.7	1366.0	—	1457.2
A5	1.46	0.1	Bal.	719.3	—	1272.9	1414.4
A6	1.73	0.1	Bal.	720.7	1258.7	—	1398.0
A7	2.00	0.1	Bal.	729.8	—	1170.0	1403.7
A8	2.30	0.1	Bal.	720.9	1197.7	1328.4	1411.1
A9	2.59	0.1	Bal.	720.6	—	1155.0	1393.8
A10	2.93	0.1	Bal.	719.6	1136.9	1335.9	—
A11	3.17	0.1	Bal.	721.4	1140.8	1248.0	—
B1	0	0.5	Bal.	766.7	931.1	1365.7	—
B2	0.30	0.5	Bal.	748.1	877.0	1448.0	—
B3	0.56	0.5	Bal.	720.5	1413.3	1475.5	—
B4	0.89	0.5	Bal.	716.9	1335.2	1388.4	1451.5
B5	1.17	0.5	Bal.	719.8	—	1393.0	1450.5
B6	1.46	0.5	Bal.	723.1	889.0	1240.5	1417.6
B7	1.72	0.5	Bal.	721.7	1026.9	1309.0	1399.0
B8	2.31	0.5	Bal.	722.0	1138.7	1338.0	—
B9	2.55	0.5	Bal.	723.3	1136.7	1315.5	—
B10	2.95	0.5	Bal.	722.7	1137.7	1251.5	—
B11	3.15	0.5	Bal.	735.0	1148.0	1248.0	—

银，铁 5 种纯金属校准。本实验的测试样品重约 200 mg，一面磨平以使其与氧化铝坩埚底部紧密接触，参比物为经高温烧结的空氧化铝坩埚。整个测试过程中通入高纯氩气防止样品氧化，通气速率为 80 mL/min。实验升温速率为 10 K/min，少数样品的部分温度段升温速率为 5 K/min。

1.2 实验结果与讨论

图 1 为典型合金的差热分析结果。由于合金在升温或降温过程中转变温度均出现不同程度的滞后，实验测得的反应温度与实际转变温度有一定的偏差，所以本工作中相变开始温度用升降温时的 DTA 曲线的基线与峰线的切线交叉点来标定升降温时的相变开始温度，用两者的平均值来表示相变温度<sup>[20]</sup>。实验测定的不同成分的合金的相变温度如表 1 所示，表中所列数据为 5 次测量结果的平均值。

图 1a 是 Fe-2.93C-0.1Ta 合金铸态试样升降温过程中的 DTA 曲线。从图中可以看出，该试样熔化过程中出现 3 个吸热峰，相变开始温度分别为 733.4、1138.2

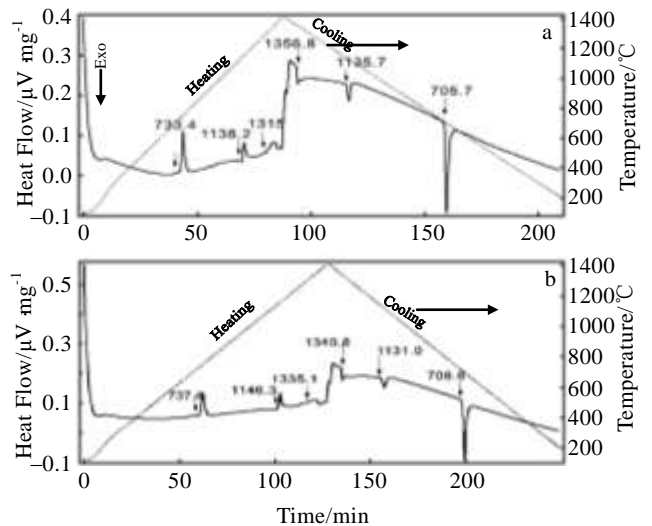


图 1 Fe-C-Ta 合金铸态试样 DTA 曲线  
Fig.1 DTA curves of as-cast samples of Fe-C-Ta alloy during heating and cooling: (a) Fe-2.93C-0.1Ta and (b) Fe-2.31C-0.5Ta

和 1315.0 °C。在冷却凝固过程中出现 3 个放热峰,相变开始温度分别为 1356.8、1135.7 和 705.7 °C。图 1b 是 Fe-2.31C-0.5Ta 合金铸态试样升降温过程中的 DTA 曲线。从图中可以看出,该试样熔化过程中出现 3 个吸热峰,相变开始温度分别为 737.4、1146.3 和 1335.1 °C。在冷却凝固过程中出现 3 个放热峰,相变开始温度分别为 1340.8、1131.0 和 706.6 °C。

根据前述的数据处理方法可知,Fe-2.93C-0.1Ta 合金的液相线温度为 1335.9 °C,在 719.6 °C 下发生共析反应。Fe-2.31C-0.5Ta 合金的液相线温度为 1338.0 °C,在 722.0 °C 下发生共析反应。

## 2 相图的热力学计算

### 2.1 热力学模型

#### 2.1.1 纯组元

纯组元的 Gibbs 自由能采用 SGTE<sup>[21]</sup>数据库中表达式,即:

$${}^0G_i^\Phi(T) = G_i^\Phi(T) - H_i^{\text{SER}} \quad (1)$$

式中,  $i$  为 Fe、C 或 Ta 组元,  $T$  为温度,  $H_i^{\text{SER}}$  为纯元素在 298.15 K 和 1 个大气压下的标准焓,  $G_i^\Phi$  为纯组元在一定温度下 Gibbs 自由能与标准态 Gibbs 自由能的差值。自由能与温度的关系为:

$${}^0G_i^\Phi = a + bT + cT \ln T + dT^2 + eT^3 + fT^{-1} + gT^7 + hT^{-9} \quad (2)$$

式中,  $a$ 、 $b$ 、 $c$ 、 $d$ ……为待定系数。

#### 2.1.2 液相与固溶体相

Fe-C-Ta 合金中的 Liquid、fcc、bcc 等相均采用了亚正规溶体模型<sup>[22]</sup>来描述,其 Gibbs 自由能表达式为:

$$G_m^\Phi = \sum_i x_i {}^0G_i^\Phi + RT \sum_i x_i \ln x_i + {}^E G_m^\Phi + {}^{\text{ms}} G_m^\Phi \quad (3)$$

其中,  $x_i$  表示组元  $i$  ( $i = \text{Fe}, \text{C}, \text{Ta}$ ) 的摩尔分数,  ${}^0G_i^\Phi$  为纯组元  $i$  ( $i = \text{Fe}, \text{C}, \text{Ta}$ ) 的摩尔自由能,  ${}^E G_m^\Phi$  表示摩尔过剩自由能,  ${}^{\text{ms}} G_m^\Phi$  表示磁性自由能,其表达式为:

$${}^{\text{ms}} G_m^\Phi = RT \ln(\beta^\Phi + 1) f(\tau), \tau = T/T_C^\Phi \quad (4)$$

式中,  $T_C^\Phi$  为磁性转变的临界温度,  $\beta^\Phi$  为摩尔原子磁矩。

#### 2.1.3 线性化合物

在 Fe-C 二元体系中的  $\text{Fe}_7\text{C}_3$  相,采用  $\text{M}_7\text{C}_3$  表示此线性化合物,其摩尔 Gibbs 自由能表达式为:

$$G_m^{\text{AnBm}} = n {}^0G_A + m {}^0G_B + a + bT \quad (5)$$

式中,未知参数  $a$  和  $b$  可以通过优化得到。

### 2.1.4 金属间化合物溶体相

在 Fe-C-Ta 体系中的 FeTa、 $\text{Fe}_2\text{Ta}$ 、 $\text{Ta}_2\text{C}$ 、TaC 相,根据它们各自的晶体结构等特点,利用不同的亚点阵模型来描述上述不同的相。以(A,B,C)<sub>x</sub>(A,B,C)<sub>y</sub>(A,B,C)<sub>z</sub> 为例:

$$\begin{aligned} G^\Phi = & \sum_i \sum_j \sum_k y_i^I y_j^{\text{II}} y_k^{\text{III}} {}^0G_{i;j;k} + xRT \sum_i y_i^I \ln y_i^I + \\ & yRT \sum_j y_j^{\text{II}} \ln y_j^{\text{II}} + zRT \sum_k y_k^{\text{III}} \ln y_k^{\text{III}} + \\ & \sum_{i_1, i_2} \sum_j \sum_k [y_{i_1}^I y_{i_2}^I y_j^{\text{II}} y_k^{\text{III}} \sum_n {}^n L_{i_1, i_2; j; k} (y_{i_1}^I - y_{i_2}^I)^n] + \quad (6) \\ & \sum_i \sum_{j_1, j_2} \sum_k [y_i^I y_{j_1}^{\text{II}} y_{j_2}^{\text{II}} y_k^{\text{III}} \sum_n {}^n L_{i; j_1, j_2; k} (y_{j_1}^{\text{II}} - y_{j_2}^{\text{II}})^n] + \\ & \sum_i \sum_j \sum_{k_1, k_2} [y_i^I y_j^{\text{II}} y_{k_1}^{\text{III}} y_{k_2}^{\text{III}} \sum_n {}^n L_{i; j; k_1, k_2} (y_{k_1}^{\text{III}} - y_{k_2}^{\text{III}})^n] \end{aligned}$$

${}^0G_{i;j;k}$  是  $\Phi$  相第 1 个点阵为  $i$  ( $i = \text{Fe}, \text{C}, \text{Ta}$ ), 第 2 个点阵为  $j$  ( $j = \text{Fe}, \text{C}, \text{Ta}$ ), 第 3 个点阵为  $k$  ( $k = \text{Fe}, \text{C}, \text{Ta}$ ) 时的吉布斯自由能。 ${}^n L_{i_1, i_2; j; k}$  是第 1 个点阵内两组元  $i_1, i_2$  ( $i_1, i_2 = \text{Fe}, \text{C}, \text{Ta}$  且  $i_1 \neq i_2$ ) 之间的相互作用参数,  ${}^n L_{i; j_1, j_2; k}$  与  ${}^n L_{i; j; k_1, k_2}$  用上述同样的方法表达。

### 2.2 计算结果与讨论

表 2 为通过优化得到的描述 Fe-C-Ta 三元系的热力学模型参数。图 2 为根据这些参数计算的该三元系的 1100 °C 等温截面及与实验结果的比较。计算结果能够与实验数据吻合较好。在 1100 °C 等温截面中存在 4 个三相区  $\text{Fe}_2\text{Ta} + \text{Ta}_2\text{C} + \text{TaC}$ 、 $\text{Fe}_2\text{Ta} + \text{FeTa} + \text{Ta}_2\text{C}$ 、 $\text{fcc} + \text{Fe}_2\text{Ta} + \text{TaC}$  及  $\text{Fe}_3\text{C} + \text{fcc} + \text{TaC}$ 。

在图 3 所示富铁角的液相面投影中,共存在着 4 个四相恒温反应。反应温度及与实验结果的比较如表 3 所示。计算所得液相面投影及反应温度与实验结果吻合较好,但是, U2 反应:  $\text{Liquid} + \text{Ta}_2\text{C} \leftrightarrow \text{TaC} + \text{Fe}_2\text{Ta}$  还有待实验的进一步验证。

图 4a 和图 4b 分别是计算所得的钽含量(质量分数)为 0.1%, 0.5%, 碳含量为 0%~3.5% 的 Fe-C-Ta 三元系垂直截面。从图中可以看出, Fe-XC-0.1Ta 系合金的垂直截面含有 3 个单相区、5 个两相区和 5 个三相区。其中, E 点的含碳量为 2.05%, 反应温度为 1146.4 °C, S 点含碳量为 0.77%, 共析反应温度为 726.6 °C, R 点碳含量为 0.58%。Fe-XC-0.5Ta 系合金的垂直截面含有 3 个单相区、5 个两相区和 5 个三相区。其中, E 点的含碳量为 2.07%, 反应温度为 1146.4 °C, S 点含碳量为 0.79%, 共析温度为 726.6 °C, R 点碳含量为 0.23%。

比较图 4a 和图 4b 发现,随着 Ta 含量的增加, R 点向左上方移动, fcc 单相区缩小, E 点、S 点向右移

动。在计算精度范围内，共晶反应和共析反应温度无变化，即 E 点、S 点没有上下移动，fcc+TaC 两相区面积增大。从图中可知，计算结果能够较好地吻合实验数据。

表 2 通过优化得到的描述 Fe-C-Ta 三元系的热力学模型参数

Table 2 Thermodynamic parameters describing the Fe-C-Ta system obtained by optimization

Phase and models	Thermodynamic parameters/J mol <sup>-1</sup>	Reference
Liquid: (C, Fe, Ta) <sub>1,0</sub>	${}^0 L_{C, Fe}^{Liq} = -124320 + 28.5T$	[23]
	${}^1 L_{C, Fe}^{Liq} = 19300$	[23]
	${}^2 L_{C, Fe}^{Liq} = 49260 - 19T$	[23]
	${}^0 L_{Fe, Ta}^{Liq} = -35806.85 + 6.67T$	[17]
	${}^1 L_{Fe, Ta}^{Liq} = -7151.11 + 8.36T$	[17]
	${}^2 L_{Fe, Ta}^{Liq} = -25785.04 + 6.19T$	[17]
	${}^0 L_{C, Ta}^{Liq} = -173413 - 7.186T$	[16]
	${}^1 L_{C, Ta}^{Liq} = 23643$	[16]
	${}^0 L_{C, Fe, Ta}^{Liq} = -435500 - 8.2T$	This work
	${}^1 L_{C, Fe, Ta}^{Liq} = 4245 - 345T$	This work
bcc: (Fe, Ta) <sub>1</sub> (C, Va) <sub>3</sub>	${}^0 G_{Fe: C}^{bcc} = 322050 + 75.667T + GHSERFE + GPFBCC + 3GHSERCC + 3GPCGRA$	[23]
	${}^0 T_{CFe: C}^{bcc} = 1043$	[23]
	${}^0 \beta_{Fe: C}^{bcc} = 2.22$	[23]
	${}^0 L_{Fe: C, Va}^{bcc} = -190T$	[23]
	${}^0 L_{Fe, Ta: Va}^{bcc} = 8770.23 + 2.46T$	[17]
	${}^1 L_{Fe, Ta: Va}^{bcc} = -16912.44 + 0.228T$	[17]
	${}^0 G_{Ta: C}^{bcc} = 601379 - 61.123T + GHSERTA + 3GGRACC$	[16]
	${}^0 L_{Ta: C, Va}^{bcc} = -749073$	[16]
	${}^0 L_{Fe, Ta: C}^{bcc} = -550000 - 10T$	This work
	fcc: (Fe, Ta) <sub>1</sub> (C, Va) <sub>1</sub>	${}^0 G_{Fe: C}^{fcc} = 77207 - 15.877T + GFEECC + GHSERCC + GPCFCC$
${}^0 T_{CFe: C}^{fcc} = -201$		[23]
${}^0 \beta_{Fe: C}^{fcc} = -2.1$		[23]
${}^0 L_{Fe: C, Va}^{fcc} = -34671$		[23]
${}^0 L_{Fe, Ta: Va}^{fcc} = -3137.0 - 9.12T$		[23]
${}^0 L_{Fe, Ta: C, Va}^{fcc} = -8300 + 8001T$		This work
${}^1 L_{Fe, Ta: C, Va}^{fcc} = 200T$		This work
$M_7C_3: (Fe)_7(C)_3$	${}^0 G_{Fe: C}^{M_7C_3} = 75000 - 48.2168T + 7GHSERFE + 3GHSERCC$	[23]
$Fe_2Ta: (Fe, Ta, C)_2(Fe, Ta, C)_1$	${}^0 G_{Fe: Fe}^{Fe_2Ta} = 15000 + 3GHSERFE$	[17]
	${}^0 G_{Ta: Ta}^{Fe_2Ta} = 15000 + 3GHSERTA$	[17]

	${}^0 G_{\text{Ta: Fe}}^{\text{Fe}_2\text{Ta}} = 30000 + 105310.45 - 35.27T + 2\text{GHSERTA} + \text{GHSEFE}$	[17]
	${}^0 G_{\text{Fe: Ta}}^{\text{Fe}_2\text{Ta}} = -105310.45 + 35.27T + \text{GHSERTA} + 2\text{GHSEFE}$	[17]
Continued		
	${}^0 L_{\text{Fe: Ta}; *}^{\text{Fe}_2\text{Ta}} = 45970 - 6.6T$	[17]
	${}^0 L_{*; \text{Fe, Ta}}^{\text{Fe}_2\text{Ta}} = -14914 + 14.6T$	[17]
$\text{FeTa: (Fe, Ta)}_7\text{Ta}_2(\text{Fe, Ta})_4$	${}^0 G_{\text{Fe: Ta: Fe}}^{\text{FeTa}} = -65000 + 3173211.95 - 115.567T - 393068.11 + 117.397T + 7\text{GFCCFE} + 2\text{GHSERTA} + 4\text{GHSEFE}$	[17]
	${}^0 G_{\text{Fe: Ta: Ta}}^{\text{FeTa}} = -393068.11 + 117.397T + 7\text{GFCCFE} + 6\text{GHSERTA}$	[17]
	${}^0 G_{\text{Ta: Ta: Fe}}^{\text{FeTa}} = 3173211.95 - 115.567T + 9\text{GHSERTA} + 4\text{GHSEFE}$	[17]
	${}^0 G_{\text{Ta: Ta: Ta}}^{\text{FeTa}} = 65000 + 13\text{GHSERTA}$	[17]
	${}^0 L_{\text{Fe, Ta: Ta}; *}^{\text{FeTa}} = 43319.562 + 55.53267T$	[17]
	${}^0 L_{*; \text{Ta: Fe, Ta}}^{\text{FeTa}} = 238945.5705 + 110.0088T$	[17]
$\text{Ta}_2\text{C: Ta}_1(\text{C, Va})_{0.5}$	${}^0 G_{\text{Ta: Va}}^{\text{Ta}_2\text{C}} = \text{GHCPTA}$	[16]
	${}^0 G_{\text{Ta: C}}^{\text{Ta}_2\text{C}} = -107522.86 + 142.2667T - 26.880T \times \ln(T) - 5.73939 \times 10^{-3} T^2$	[16]
	${}^0 L_{\text{Ta: C, Va}}^{\text{Ta}_2\text{C}} = -6917.554$	[16]
$\text{TaC: (Ta, Fe)}_1(\text{C, Va})_1$	${}^0 G_{\text{Ta: Va}}^{\text{TaC}} = \text{GFCCTA}$	[16]
	${}^0 G_{\text{Ta: C}}^{\text{TaC}} = -163843.55 + 266.903T - 44.9575T \ln(T) - 3.6198 \times 10^{-3} T^2$	[16]
	$+ 594677T^{-1} - 2.3107 \times 10^9 T^{-3} + 1.1924 \times 10^{13} T^{-5} - 3.5156 \times 10^{16} T^{-7}$	[16]
	${}^0 L_{\text{Ta: C, Va}}^{\text{TaC}} = -60408.46 + 4.173T$	[16]
	${}^0 L_{\text{Ta, Fe: C, Va}}^{\text{TaC}} = 408.46 + 74.173T$	This work
	${}^0 L_{\text{Fe, Ta: C}}^{\text{TaC}} = -5000 + 120T$	This work

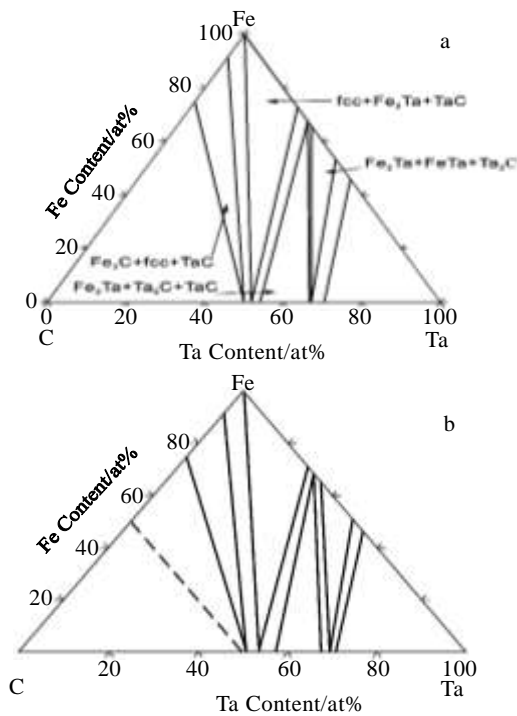


Fig.2 Calculated isothermal section of Fe-C-Ta system at 1100 °C (a) and comparison with experimental results [12] (b)

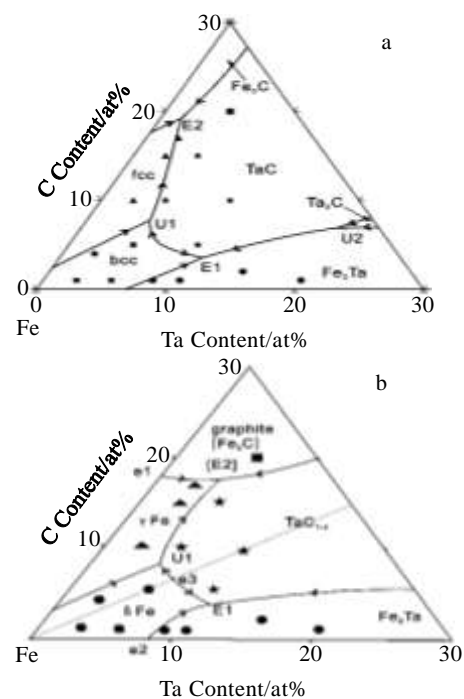


图 2 计算的 Fe-C-Ta 三元系 1100 °C 等温截面及与实验结果的比较

图 3 计算的 Fe-C-Ta 三元系富铁角的液相面投影及与实验结果的比较

Fig.3 Calculated liquidus projection of Fe-C-Ta system in the Fe-rich corner (a) and comparison with experimental results<sup>[13]</sup> (b)

表 3 恒温反应温度与实验结果的比较

**Table 3 Comparison between the temperature of nonvariant reactions and the experimental temperature**

	Reaction	Calculated temperature/°C	Experimental temperature/°C
U1	Liquid+bcc↔fcc+TaC	1443.26	1435 <sup>[13]</sup>
E1	Liquid↔bcc+Fe <sub>2</sub> Ta+TaC	1413.90	1426 <sup>[13]</sup>
E2	Liquid↔Fe <sub>3</sub> C+TaC+fcc	1122.42	1133 <sup>[13]</sup>
U2	Liquid+Ta <sub>2</sub> C↔TaC+Fe <sub>2</sub> Ta	1508.64	—

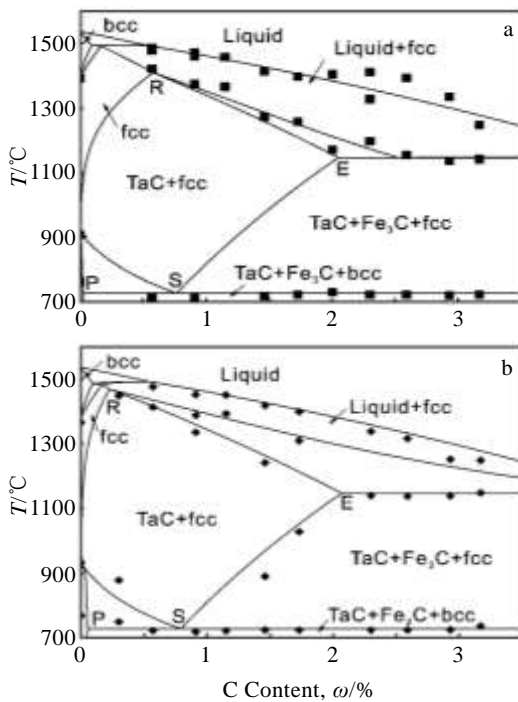


图 4 计算的 Fe-C-Ta 合金的垂直截面及与实验结果的比较  
Fig.4 Calculated vertical sections of the Fe-C-Ta ternary alloy and comparison with experimental results: (a) Fe-XC-0.1Ta and (b) Fe-XC-0.5Ta

### 3 结 论

1) 用差热分析可以测定含钽量（质量分数）分别为 0.1%，0.5% 的 Fe-C-Ta 三元系的相变温度，得到两个体系的垂直截面。

2) 在垂直截面中，随着钽含量的增加，R 点向左上方移动，fcc 单相区缩小，E 点向右移动，S 点向右移动，即 fcc+TaC 两相区面积增大。

3) 利用 CALPHAD 方法，结合实验数据，对 Fe-C-Ta 三元系进行了热力学优化，得到了描述该体系的热力学模型参数，计算结果与实验数据吻合较好。

### 参考文献 References

[1] Zhou Juqiu(周菊秋), Zeng Fangping(曾芳屏). *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 1998, 27(1): 26

[2] Berthod P, Aranda L, Hamini Y. *Materials Science* [J], 2011, 47(3): 319

[3] Tanigawa H, Sakasegawa H, Hashimoto N *et al. Journal of Nuclear Materials* [J], 2007, 367: 42

[4] Xia Z, Zhang C, Huang Q *et al. Journal of Iron and Steel Research, International* [J], 2011, 18(9): 47

[5] Berthod P, Hamini P, Aranda L *et al. Calphad* [J], 2007, 31(3): 351

[6] Berthod P, Hamini Y, Hericher L *et al. Calphad*[J], 2007, 31(3): 361

[7] Zheng Liang(郑亮), Gu Chenqing(谷臣清), Zhang Guoqing(张国庆). *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2005, 34(2): 194

[8] Sun Yuejun(孙跃军), Zhang Jun(张军). *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2012, 41(9): 1615

[9] Zhao Tan(赵坦), Zhang Jian(张健), Chen Guang(陈光) *et al. Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2009, 38(6): 1038

[10] Leng Chongyan(冷崇燕), Zhang Xu(张旭), Zhou Rong(周荣) *et al. Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2008, 37(3): 556

[11] Shi Xianbo(史显波), Zhao Lianyu(赵连玉), Yan Wei(严伟) *et al. Journal of Iron and Steel Research*(钢铁研究学报)[J], 2013, 25(12): 58

[12] Raghavan V, Ghosh G. J. *Alloy Phase Diagrams*[J], 1985, 1: 13

[13] Amara S E, Kesri R, Hamar-Thibault S *et al. Zeitschrift Für Metallkunde*[J], 2000, 91(12): 1020

[14] Xia C, Jin Z. *Surface and Coatings Technology*[J], 2000, 130(1): 29

[15] Okamoto H. *Journal of Phase Equilibria and Diffusion*[J],

- 1998, 19(1):88
- [16] Frisk K, Fernández Guillermet A. *Journal of Alloys and Compounds*[J], 1996, 238(1): 167
- [17] Danon A, Servant C. *Journal of Nuclear Materials*[J], 2003, 321(1): 8
- [18] Witusiewicz V T, Bondar A A, Hecht U *et al. Intermetallics* [J], 2011, 19(7): 1059
- [19] Okamoto H. *Journal of Phase Equilibria*[J], 1992, 13(5): 543
- [20] Hao Shiming(郝士明), Chen Hui(陈辉), Liu Xingjun(刘兴军). *Journal of Northeastern University, Natural Science*(东北大学学报,自然科学版)[J], 1993, 14(2): 150
- [21] Dinsdale A T. *Calphad*[J], 1991, 15(4): 317
- [22] Hardy H K. *Acta Metallurgica*[J], 1953, 1(2): 202
- [23] Gustafson P. *Metallurgical Transactions A*[J], 1987, 18(2): 175

## Experimental Investigation and Thermodynamic Calculation of the Fe-C-Ta System

Xu Zhanyuan, Ouyang Xuemei, Yin Fucheng, Li Zhi

(Key Laboratory of Materials Design and Preparation Technology of Hunan Province, Xiangtan University, Xiangtan 411105, China)

**Abstract:** Two vertical sections of the Fe-C-Ta system with 0.1 wt% and 0.5 wt% Ta were experimentally investigated by DTA, and the phase transformation sequences of the alloys Fe-2.93C-0.1Ta and Fe-2.31C-0.5Ta were analyzed. A thermodynamic calculation of this system was carried out using CALPHAD technique. The results show that the thermodynamically calculated results agree well with the experimental data. There are four nonvariant reactions in the liquidus projection of Fe-C-Ta system in the Fe-rich corner: Liquid+bcc  $\leftrightarrow$  fcc+TaC, Liquid  $\leftrightarrow$  bcc+Fe<sub>2</sub>Ta+TaC, Liquid  $\leftrightarrow$  Fe<sub>3</sub>C+TaC+fcc, and Liquid+Ta<sub>2</sub>C  $\leftrightarrow$  TaC+Fe<sub>2</sub>Ta. The temperatures of the nonvariant reactions are as following: 1443.26 °C, 1413.90 °C, 1122.42 °C, and 1508.64 °C. The eutectoid reaction of the alloys Fe-2.93C-0.1Ta and Fe-2.31C-0.5Ta occurs at 726.6 °C.

**Key words:** Fe-C-Ta; DTA; phase diagram; CALPHAD

Corresponding author: Yin Fucheng, Ph. D., Professor, School of Materials Science and Engineering, Xiangtan University, Xiangtan 411105, P. R. China, Tel: 0086-731-58298428, E-mail: fuchengyin@xtu.edu.cn