

Термодинамическое моделирование системы Fe-Si-O в широком интервале температур и давлений¹

Ильиных Н.И.*,**

* Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт металлургии Уральского отделения РАН (ИМЕТ УрО РАН), Екатеринбург

** Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Уральский государственный педагогический университет»

В настоящее время сплавы на основе железа, в частности, железокремниевые сплавы, широко используются как материалы со специальными электротехническими свойствами. Одним из основных свойств данной группы сплавов является их высокая коррозионная стойкость. Следует отметить, что расплавы системы Fe-Si широко исследованы как экспериментально, так и с применением различных модельных представлений [1]. Однако очень важно изучить поведение этих материалов в экстремальных условиях и агрессивных средах. Одним из эффективных способов решения этой проблемы является применение термодинамического моделирования, которое позволяет сократить объем дорогостоящих экспериментальных исследований.

Расчет термодинамического равновесия произвольных многокомпонентных систем заключается в определении всех равновесных параметров, термодинамических свойств, а также химического и фазового состава [1-2].

В настоящей работе с использованием методики термодинамического моделирования и программного комплекса TERRA [2-3] проведено исследование взаимодействия соединений системы Fe-Si (FeSi, FeSi₂, Fe₃Si и Fe₅Si₃) в широком интервале температур (300-4000 К) и давлений (10⁵-10⁸ Па). Исследованы температурные зависимости массовой доли компонентов конденсированной фазы и парциальных давлений компонентов газовой фазы, образующихся при нагревании указанных выше соединений. Показано, что при повышении температуры химический состав исследованных систем претерпевает существенные изменения; при повышении давления растет температура, при которой происходит разрушение оксидов. Соединения FeSi и Fe₃Si являются достаточно устойчивыми к окислению вплоть до температуры 3400 К, при которой происходит их разложение. При взаимодействии с

кислородом FeSi₂ разрушается: его заменяют FeSi, чистый кремний Si и оксид SiO₂. Соединение Fe₅Si₃ устойчиво лишь в диапазоне температур 700-1800 К, при других температурах конденсированная фаза состоит, в основном, из Fe₃Si и FeSi.

Изучено взаимодействие FeSi с кислородом при различном исходном содержании кислорода. Показано, что при соотношении FeSi:O₂=60:40 (масс.%) происходит полное окисление, причем конденсированная фаза состоит исключительно из оксидов и двойных оксидов: SiO₂, Fe₂O₃, Fe₃O₄, Fe₂SiO₄.

Исследованы температурные зависимости энтальпий, энтропий и внутренних энергий системы Fe-Si при различных давлениях. Показано, что эти зависимости не являются монотонными. На графиках зависимостей I(T), S(T), U(T) наблюдаются резкие изломы при температурах, соответствующих значительным изменениям химического состава конденсированной и газовой фаз.

При анализе полученных результатов следует учитывать, что используемый метод расчета предназначен для моделирования предельно равновесных состояний сложных систем и не позволяет находить «траекторию» перехода к равновесному состоянию.

Список литературы:

- [1] Ильиных Н.И., Куликова Т.В., Моисеев Г.К. Состав и равновесные характеристики металлических расплавов бинарных систем на основе железа, никеля и алюминия. Екатеринбург: УрО РАН, 2006. 236 с.
- [2] Синярев Г.Б., Ватолин Н.А., Трусов Б.Г., Моисеев Г.К. Применение ЭВМ для термодинамических расчетов металлургических процессов. М.: Наука, 1983. 263
- [3] Трусов Б.Г. Программная система моделирования фазовых и химических равновесий при высоких температурах // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Приборостроение, 2012. С. 240-249.

¹ Работа выполнена по Государственному заданию ИМЕТ УрО РАН