

ВЛИЯНИЕ ВИСМУТА НА ФАЗОВЫЕ РАВНОВЕСИЯ, РЕАЛИЗУЮЩИЕСЯ В СИСТЕМАХ «ЖЕЛЕЗО – ЛЕГИРУЮЩИЙ ЭЛЕМЕНТ»

А.В. Рябов, Е.А. Трофимов

Южно-Уральский государственный университет, филиал в г. Златоусте

Проведено термодинамическое моделирование тройных систем Fe–C–Bi, Fe–Ni–Bi и Fe–Mn–Bi в интервале температур 0–1800 °С при давлении 1 бар. Моделирование проводилось с использованием программного пакета FactSage (версия 7.0). Построены вертикальные разрезы диаграмм состояния указанных тройных систем при постоянной концентрации висмута 0,1 мас. % (типичной для промышленных висмутсодержащих сталей повышенной обрабатываемости резанием). Результаты расчётов показывают, что добавление висмута в двойные сплавы «железо – легирующий элемент» уже в количестве 0,1 мас. % приводит к образованию жидкой или твёрдой фазы на основе висмута при температурах ниже температуры плавления основной массы металла во всех исследованных интервалах концентраций. При этом висмут в количестве 0,1 мас. % полностью усваивается расплавом на основе железа. В то же время довольно высокое парциальное давление висмута при температурах существования металлического расплава на основе железа свидетельствует о возможных больших потерях висмута при легировании сталей. Результаты расчёта не противоречат известным сведениям о поведении висмутсодержащих сталей при выплавке и последующей обработке; это показывает, что, несмотря на отсутствие оптимизированных описаний двойных систем Bi–C, Bi–Ni и Bi–Mn, представленная в базах данных FSstel и FactPS пакета FactSage информация может корректно и результативно использоваться для моделирования фазовых равновесий в многокомпонентных легкообрабатываемых сталях, легированных висмутом.

Ключевые слова: железо; висмут; Fe–C–Bi; Fe–Ni–Bi; Fe–Mn–Bi; термодинамика; диаграммы состояния; программный пакет FactSage; стали повышенной обрабатываемости.

Известные недостатки легкообрабатываемых марок стали, обеспечивающих возможность комплексной автоматизации производства, диктуют необходимость поиска и совершенствования новых способов улучшения условий процесса резания металлических материалов, в том числе и за счет редко использующихся легирующих элементов, одним из которых является висмут [1–3].

В литературе присутствуют данные по влиянию висмута на свойства стали и ее обрабатываемость резанием, но имеется мало информации о физико-химических условиях растворения висмута в железе и его сплавах. При этом авторы работ, посвящённых данной теме зачастую исследуют условия (давление, концентрации компонентов систем), которые довольно далеки от реализующихся в процессе производства [4–6].

При создании новых висмутсодержащих сплавов необходима информация о взаимодействии висмута и других легирующих элементов в системах на основе железа и о том, как это взаимодействие будет сказываться на картине фазовых равновесий в многокомпонентных системах

Целью настоящей работы стало проведение термодинамического моделирования систем вида Fe–X–Bi (где X – C, Ni, Mn) интервале условий, характерных для процесса получения висмутсо-

держащих легированных сталей. Выбор в качестве третьего элемента углерода, никеля и марганца обусловлен тем, что эти элементы относятся к типичным компонентам сталей, которые присутствуют в их составе в достаточно больших количествах.

Для термодинамического моделирования использован блок Phase Diagram программного пакета FactSage [7, 8] (версия 7.0) производства Thermfact (Канада) и GTT Technologies (Германия).

Расчёт проводился с помощью баз данных FSstel и FactPS, входящих в комплект программного пакета.

Исходные условия для моделирования:

- общее давление газовой фазы – 1 бар (при этом учитывалась возможность отклонения поведения этой фазы от модели идеального газа);
- содержание висмута в составе исследованных систем – 0,1 мас. %, что примерно соответствует реальному количеству висмута, вводимому в металл при выплавке легкообрабатываемых сталей [9];
- интервал температур 0–1800 °С.

На предварительных стадиях исследования были рассчитаны фазовые диаграммы систем Fe–Bi, Fe–C, Fe–Ni, Fe–Mn. Результаты расчётов сопоставлены с известными литературными данными и сделан вывод об адекватности значений

термодинамических параметров, входящих в используемые базы данных.

Помимо координат границ фазовых равновесий в процессе расчёта определено положение изобар для газообразного висмута, находящегося в виде одноатомного газа (преобладающая в данных условиях форма). Информация о парциальном давлении висмута полезна как для анализа возможных его потерь при легировании, так и с точки зрения оценки экологических последствий реализации технологии легирования сталей висмутом.

Результаты расчёта представлены на рис. 1–3. Возле большинства фаз переменного состава (расплава, твёрдых растворов с кристаллическими решётками ОЦК и ГЦК) во избежание разночтений в скобках представлено вещество (или вещества), которое составляет основу данной фазы. Фаза, обозначенная как «альфа-Mn» представляет собой твёрдый раствор железа в альфа-марганце. Помимо фаз переменного состава в системах присутствуют индивидуальные твёрдые вещества: висмут, а также графит (система Fe–Bi–C) и MnBi (система Fe–Bi–Mn). В процессе расчёта учитывалась возможность образования в системе Fe–Bi–Ni соединения NiBi (данные по нему содержатся в базе FactPS), однако, согласно результатам расчёта это вещество в данных условиях в системе не образуется.

Изобары для парциального давления висмута (тонкие серые линии на рис. 1–3) рассчитаны для 0,1; 1; 10; 100, 1000 и 10 000 Па.

Анализируя представленные результаты, следует учитывать, что, согласно описанию, в базе FSstel до настоящего времени не оптимизированы данные для систем Bi–C, Bi–Ni, Bi–Mn. В резуль-

тате на диаграммах присутствуют твёрдые растворы, расчёт термодинамических параметров для которых проводился без учёта возможности присутствия в их составе висмута (такие фазы отмечены звёздочкой). Кроме того в этой ситуации термодинамическое описание взаимодействия между висмутом и третьим элементом в составе фаз переменного состава неполноценно, поскольку параметры использованных моделей, описывающих такое взаимодействие, очевидно приравнены к нулю.

Вместе с тем можно надеяться, что возможные отклонения от реальности в наших случаях не носят критического характера. Рассчитывать на это позволяют, во-первых, вид фазовых диаграмм систем Bi–Ni, Bi–Mn (согласно данным [10, 11], растворимость висмута в альфа-марганце и никеле с ГЦК решёткой практически равна нулю), а, во-вторых, относительно небольшие количества легирующих элементов в составе моделируемых систем.

Общий вывод из результатов анализа проведённых расчётов, можно свести к следующему. Для изученных систем добавление висмута в двойную систему Fe–X уже в количестве 0,1 мас. % приводит к образованию, при температурах ниже температуры плавления основной массы металла во всех заданных интервалах концентраций, дополнительной фазы (расплава на основе висмута, а при его кристаллизации – твёрдого висмута), которая, очевидно, будет оказывать влияние на обрабатываемость стали при механической обработке металла. При этом, согласно результатам проведённых расчётов, висмут в количестве 0,1 мас. % полностью

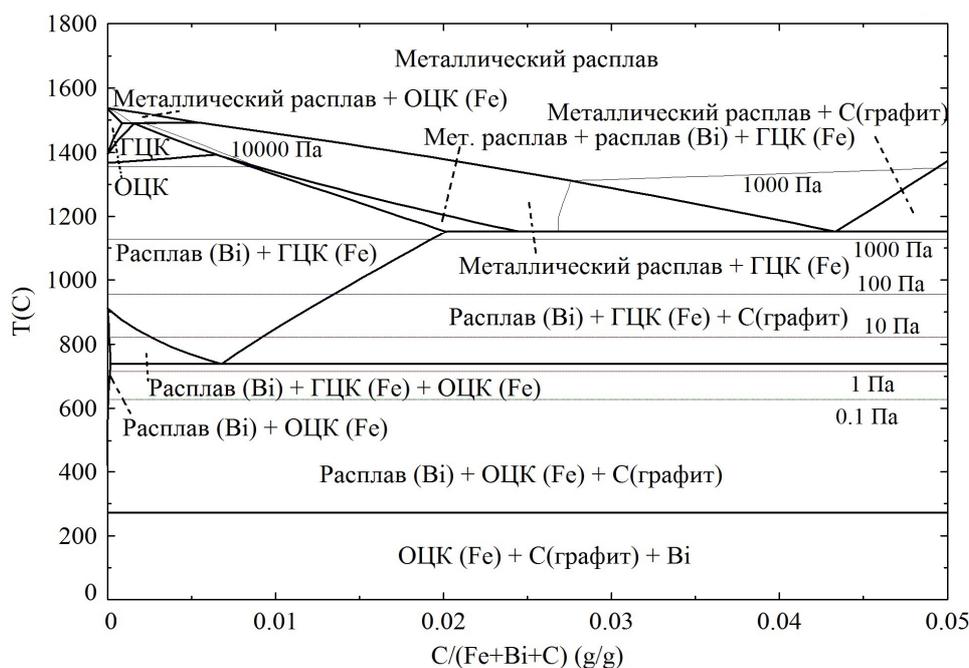


Рис. 1. Фазовая диаграмма системы Fe–Bi–C для [Bi] = 0,1 мас. % и общего давления в системе 1 бар

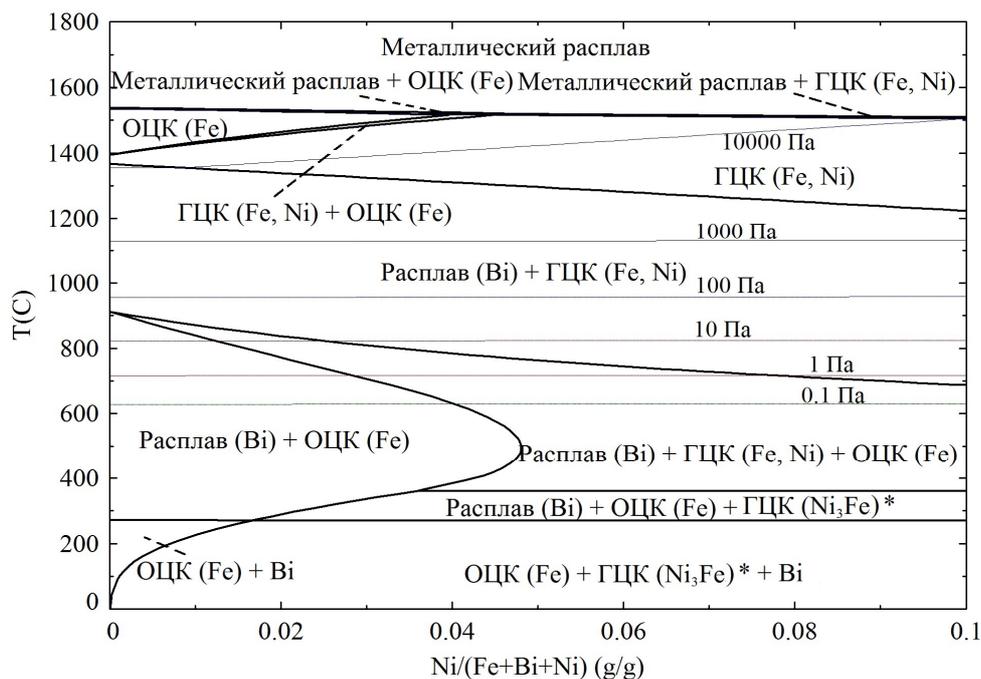


Рис. 2. Фазовая диаграмма системы Fe–Bi–Ni для [Bi] = 0,1 мас. % и общего давления в системе 1 бар

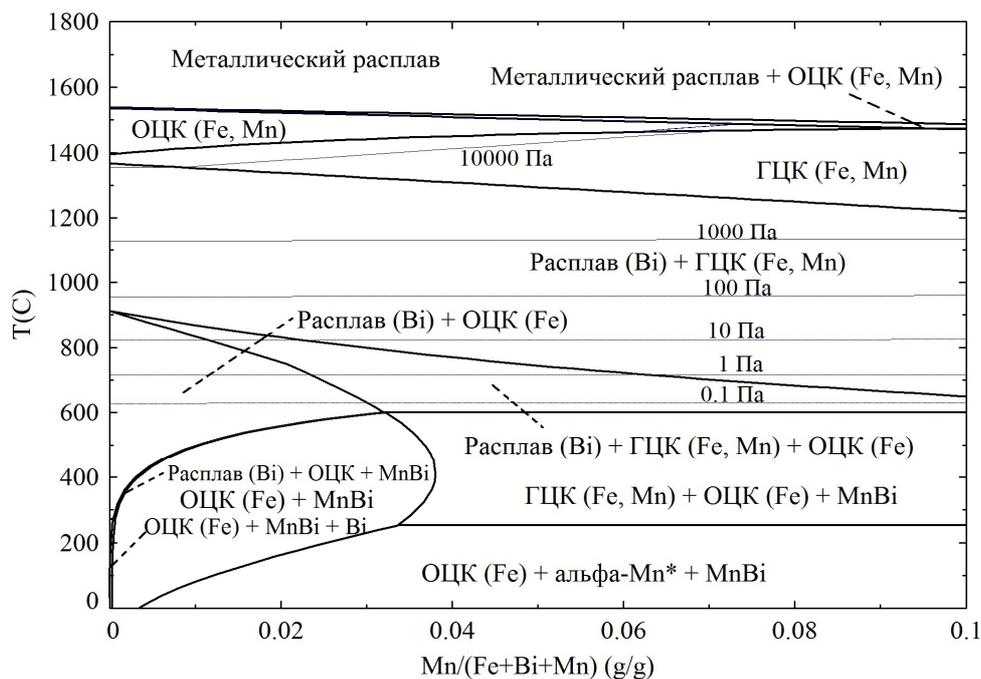


Рис. 3. Фазовая диаграмма системы Fe–Bi–Mn для [Bi] = 0,1 мас. % и общего давления в системе 1 бар

усваивается расплавом на основе железа. В то же время довольно высокое парциальное давление висмута при температурах существования металлического расплава на основе железа свидетельствует о возможных больших потерях висмута при легировании сталей. Результаты расчёта не противоречат известной информации о легировании сталей висмутом и позволяют рассчитывать на то, что данные, представленные в базах данных FSstel

и FactPS, могут быть корректно и результативно использованы для моделирования фазовых равновесий, реализующихся в многокомпонентных системах, отражающих реальный состав висмутосодержащих легкообрабатываемых сталей.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант № 13-08-00638.

Литература/References

1. Wu D., Li Z. Study on the Machinability of Free Cutting Non-Lead Austenitic Stainless Steels. *Advanced Materials Research*, 2012, vol. 430–432, pp. 306–309. DOI: 10.4028/www.scientific.net/AMR.430-432.306
2. Liu H.T., Chen W.Q. Hot Ductility of Eco-Friendly Low Carbon Resulphurised Free Cutting Steel with Bismuth. *Ironmaking and Steelmaking*, 2014, vol. 41, no. 1, pp. 19–25. DOI: 10.1179/1743281212Y.0000000095
3. Li Z., Wu D., Lv W. Application of Rare Earth Elements in Lead-Free “Green Steel”. *Advanced Materials Research*, 2012, vol. 518–523, pp. 687–690. DOI: 10.4028/www.scientific.net/AMR.518-523.687
4. Юхин Ю.М., Михайлов Ю.И. Химия висмутовых соединений и материалов / отв. ред. Е.Г. Авакумов. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2001. – 359 с. [Yukhin Yu.M., Mikhaylov Yu.I. *Khimiya vismutovykh soedineniy i materialov* (Chemistry of Bismuth Compounds and Materials). Novosibirsk, Siberian Branch RAS Publ., 2001. 359 p.]
5. Денисов В.М., Белоусова Н.В., Моисеев Г.К. и др. Висмутосодержащие материалы: строение и физико-химические свойства. Екатеринбург: УрО РАН, 2000. 527 с. [Denisov V.M., Belousova N.V., Moiseev G.K. et al. *Vismutsoderzhashchie materialy: stroenie i fiziko-khimicheskie svoystva* (Bismuth-Containing Materials: Structure and Physico-Chemical Properties). Ekaterinburg, Ural Branch RAS Publ., 2000. 527 p.]
6. Славинский М.П. Физико-химические свойства элементов. М.: Metallurgiya, 1952. 763 с. [Slavinskiy M.P. *Fiziko-khimicheskie svoystva elementov* (Physico-Chemical Properties of Elements). Moscow, Metallurgiya Publ., 1952. 763 p.]
7. Bale C.W., Chartrand P., Degterov S.A., Eriksson G., Hack K., Ben Mahfoud R., Melançon J., Pelton A.D., Petersen S. FactSage Thermochemical Software and Databases. *Calphad*, 2002, vol. 26, no. 2, pp. 189–228. DOI: 10.1016/S0364-5916(02)00035-4
8. Bale C.W., Bélisle E., Chartrand P., Degterov S.A., Eriksson G., Hack K., Jung I.H., Kang Y.B., Melançon J., Pelton A.D., Robelin C., Petersen S. FactSage Thermochemical Software and Databases – Recent Developments. *Calphad*, 2009, vol. 33, no. 2, pp. 295–311. DOI: 10.1016/j.calphad.2008.09.009
9. Ryabov A.V., Chumanov I.V. Study and Possibility of Making New Easy-to-Cut Corrosion-Resistant Steel. *Russian Metallurgy (Metally)*, 2012, vol. 2012, no. 12, pp. 1065–1067. DOI: 10.1134/S0036029512120117
10. Massalski T.B. Bi–Mn (Bismuth–Manganese). *Binary Alloy Phase Diagrams, Second Edition*. Massalski T.B. (Ed.). ASM International, Materials Park, Ohio, 1990, vol. 1, pp. 759–762. DOI: 10.1002/adma.19910031215
11. Nash P. Bi–Ni (Bismuth–Nickel). *Binary Alloy Phase Diagrams, Second Edition*. Massalski T.B. (Ed.). ASM International, Materials Park, Ohio, 1990, vol. 1, pp. 768–769. DOI: 10.1002/adma.19910031215

Рябов Андрей Валерьевич, канд. техн. наук, доцент кафедры общей металлургии, Южно-Уральский государственный университет, филиал в г. Златоусте; avrmetall@yandex.ru.

Трофимов Евгений Алексеевич, д-р хим. наук, доцент кафедры общей металлургии, Южно-Уральский государственный университет, филиал в г. Златоусте; tea7510@gmail.com.

Поступила в редакцию 24 сентября 2015 г.

DOI: 10.14529/met150419

EFFECT OF BISMUTH ON PHASE EQUILIBRIA IN IRON-BASE BINARY SYSTEMS

A.V. Ryabov, avrmetall@yandex.ru,
E.A. Trofimov, tea7510@gmail.com

South Ural State University, Zlatoust Branch, Zlatoust, Russian Federation

The paper presents the results of the thermodynamic modelling of ternary systems Fe–C–Bi, Fe–Ni–Bi and Fe–Mn–Bi in the temperature range from 0 to 1800 °C at pressure equal to 1 bar. The modelling was made using FactSage software package (version 7.0). The vertical sections of phase diagrams of the listed ternary systems are constructed for the constant bismuth concentration equal to 0.1 wt. %, which is typical for commercial bismuth-doped free-machining steels. Calculation results show that when 0.1 wt. % of Bi is added to iron-base binary alloys, a liquid or solid bismuth-base phase is formed at temperatures below the melting temperature of

the bulk of metal in all the studied ranges of concentrations. This amount of bismuth is completely absorbed by the iron-base melt. At the same time, high partial pressure of bismuth at the temperatures when the iron base melt is in a liquid form indicates that the loss of bismuth is possible when adding bismuth to steel. These results of calculation do not contradict to the known facts about the behaviour of bismuth steels in melting and further treatment. Thus, even despite the absence of optimized descriptions of the Bi–C, Bi–Ni and Bi–Mn binary systems, the information contained in FSstel and FactPS databases of the FactSage package can be correctly and effectively used for the modeling of phase equilibria in bismuth-doped free-machining steels.

Keywords: iron; bismuth; Fe–C–Bi; Fe–Ni–Bi; Fe–Mn–Bi; thermodynamics; phase diagrams; FactSage software package; free-machining steels.

Received 24 September 2015

ОБРАЗЕЦ ЦИТИРОВАНИЯ

Рябов, А.В. Влияние висмута на фазовые равновесия, реализующиеся в системах «железо – легирующий элемент» / А. В.Рябов, Е.А. Трофимов // Вестник ЮУрГУ. Серия «Металлургия». – 2015. – Т. 15, № 4. – С. 142–146. DOI: 10.14529/met150419

FOR CITATION

Ryabov A.V., Trofimov E.A. Effect of Bismuth on Phase Equilibria in Iron-Base Binary Systems. *Bulletin of the South Ural State University. Ser. Metallurgy*, 2015, vol. 15, no. 4, pp. 142–146. (in Russ.) DOI: 10.14529/met150419