

文章编号: 1000-324X(2002)03-0399-08

含氧化锆的氧化物系统计算相图研究与进展

许 涛¹, 李 麟², 王佩玲¹, Omer Van Der Biest³, Jef Vleugels³

(1. 中国科学院上海硅酸盐研究所高性能陶瓷和超微结构国家重点实验室, 上海 200050; 2. 上海大学材料科学与工程系, 上海 200072; 3. 鲁汶大学冶金与材料工程系, 比利时鲁汶 B-3001)

摘 要: 氧化锆是一种重要的高性能陶瓷材料。由于其优良的力学和电学性能, 在结构陶瓷和功能陶瓷两个方面都有着广泛的应用前景。本文在简述计算相图发展和原理的基础上, 综述了近年来对含氧化锆系统计算相图的研究, 总结了一些重要体系的研究结果, 指出计算相图方法将对该系统材料的组分设计起重大的促进作用。

关 键 词: 相图; 相图计算; 氧化锆

中图分类号: TQ 174 **文献标识码:** A

1 引言

相图和材料科学之间, 有着广泛而又密切的联系。在发展新材料, 改善材料性能和设计制备流程时, 系统的相关性和平衡作用, 往往是考虑的主要因素之一, 决定着材料的显微结构和性能^[1]。

关于陶瓷系统相图的工作可追溯至本世纪初叶。早期研究的组元主要是氧化硅、氧化铝、碱和碱土金属的氧化物。目前, 组元除氧化物外, 已扩展至硫化物、氮化物、氧氮化物和碳化物等, 广泛涉及各种结构材料和功能材料^[1]。

绘制相图的主要实验手段是: 差热分析、化学分析、金相显微镜、X射线结构分析、电子探针、电子显微镜等。但是, 用实验方法绘制相图是一件十分细致而又艰巨的工作, 准确度也存在一些问题。实验中经常遇到的困难有: 2000°C以上的高温下经常出现试验样品的蒸发, 以及样品与坩埚材料之间发生化学反应; 一些相图高温下的液相线难以测准, 多用虚线表示; 低温下由于遇到动力学困难, 固相内的扩散速度很慢, 往往测不到真正的平衡组成, 得不出真正的固溶体平衡曲线; 液相冷却时经常遇到过冷的问题, 只好用外推或内插的方法得到一条完整的曲线。此外, 由于近年来科学和工业技术的进步, 新化合物和新系统不断开发, 相图组元数目也与日俱增。以200个组元为例, 可组成的二~六元系共计约有 8.5×10^{10} 个, 用实验来完成测定是难以想像的, 而实际可用于研究的组元数目远远不止200个。因此, 相图的实验测定落后于实际要求是难以避免的。

收稿日期: 2001-04-20, **收到修改稿日期:** 2001-06-06

基金项目: 上海科技发展基金资助项目; 高性能陶瓷和超微结构国家重点实验室资助项目; 中国科技部与比利时弗拉芒大区科技合作项目(BIL 99/10)

作者简介: 许 涛(1976-), 男, 博士研究生。

随着热力学理论和计算机科学的发展,用计算机来绘制相图成为一种比较便捷的方法.通过计算机计算相图和平衡数据不仅节省时间和减少实验工作量,而且可以绕过某些系统的实验困难,既具有其可行性,又具有必要性.希拉特(Hillert M.)^[2]对此曾作出精辟论述:

“由于计算机技术的发展,现今冶金学家应该停止做那些计算机能完成的工作,而将精力集中于在相平衡中应用热力学原理,当然要依靠计算机去完成复杂的数学计算.”

氧化锆和含氧化锆材料的传统应用是:铸造用的砂和粉,耐火材料,陶瓷,涂层材料,磨料.然而,氧化锆基材料的热力学和电学性能,使它能在先进陶瓷和工程陶瓷中有广泛的应用^[3].

纯氧化锆(ZrO_2)有三种晶型.单斜相(m)稳定在室温.加热至 1170°C 转变为四方相(t),在 2370°C 四方相转变为立方相,立方相一直稳定到氧化锆熔点(2680°C).在冷却时氧化锆发生可逆相变.这些相转变是马氏体性质的.四方到单斜相变伴随着约3%~5%的体积变化,这足以使陶瓷产生严重裂纹.

添加某些金属氧化物(CaO , MgO , Y_2O_3 , Sc_2O_3 和稀土氧化物等)能避免氧化锆 $t-m$ 转变,并且高温立方相和四方相能稳定在较低温度.这些金属氧化物和氧化锆生成固溶体,除了在阴离子亚晶格引入缺位产生高离子电导外,还能稳定四方相和立方相^[3].这些相存在于窄的组成区并与温度有关,因此掌握含锆氧化物体系的相图对研究氧化锆材料具有重要的指导意义.

氧化锆基材料的相图是复杂的,同一系统来自不同研究者的相图的相边界的确切位置往往不一致,对相图中某些化合物的存在尚有争议.粉末和陶瓷制备方法对相图的结果也有很大影响,亚稳相、有序化和沉淀的存在都和热处理有关,这些都进一步增加了系统的复杂性^[3].

目前对该系统的计算相图已有不少研究工作,对于一些重要的二元系和三元系的研究已获得了一批有价值的优化相图和热力学数据.

本文将首先简述计算相图的发展现状和基本原理,然后综述近年来对氧化锆系统的计算相图研究工作,并总结一些重要体系的研究结果.

2 计算相图的发展过程

相图计算科学有着漫长的历史发展过程.早在1908年, Van Larr 就进行了相图计算的尝试,首次用正规溶液模型计算了二元系相平衡,得到了一系列形成偏晶、共晶、包晶、倒退固溶度(retrograde solubility)和溶解间隙(miscibility gap)的二元相图^[4].

然而由于热力学数据的缺乏和计算的复杂性,直到60年代中期,计算相图的工作仍然进展缓慢.此后,随着热力学数据的精确测量和收集评估,相图计算技术兴起并在简单体系中得到应用.在前人工作^[5,6]的基础上,以考夫曼(Kaufman L.)^[7]和希拉特(Hillert M.)^[8]为代表,形成了一门新的介于热力学,相平衡和计算机科学之间的交叉分支学科:相图计算(CALPHAD: CALculation of PHase Diagram),其实质是相图和热化学的计算机耦合,并在简单体系的计算中得到了成功的应用.

1980年以来,计算相图方法不断发展和完善,其主要标志是溶液理论模型的深化和冶金与材料集成热化学数据库(Integrated Thermochemical Database)的建立.希拉特等^[9~13]提出和发展的亚晶格-化合物能模型(Sublattice-Compound Energy Model),及佩尔顿(Pelton

A.D.) 和布兰德尔 (Blander M.)^[14~16] 提出和发展的扩展似化学理论 (Extended Quasi Chemical Theory), 已成为 Thermo-Calc 和 FACT 系统溶液数据库中描述溶液相热力学性质的基本模型.

目前, 计算相图方法在合金设计和多元、多相工业体系中得到了广泛的应用; 多功能数据库的研制和扩展、网络化, 以及相应计算机软件的开发, 也在不断发展之中^[17].

3 计算相图的原理和方法

根据经典热力学理论, 当一个体系在恒温恒压下达达到平衡, 其充要条件是吉布斯自由能 G 的微小变化必须大于或等于零, 即:

$$(\delta G)_{T,P} \geq 0$$

根据该充要条件, 可通过以下两种方法对相图进行计算.

3.1 等化学势法

相平衡时, 有关系式

$$\mu_i^\alpha = \mu_i^\beta \quad (i = 1, 2, \dots, n)$$

其中 μ_i^α 和 μ_i^β 分别为组元 i 在 α 相和 β 相中的化学势.

固定了压力后, 上式为

$$\mu_i^\alpha(x_1, x_2, \dots, x_n, T) = \mu_i^\beta(x_1, x_2, \dots, x_n, T)$$

上式中, x_1, x_2, \dots, x_n 为各平衡相的组元成分. 若以温度 T 为参变量, 就可列出含有 n 个等式的联立方程组, 解此方程组就可求出平衡相的组元成分 (x_1, x_2, \dots, x_n) .

3.2 自由能最小法

体系自由能一般可记为:

$$G = \sum_i n_i(\mu_i^0 + RT \ln P + RT \ln x_i) + \sum_j n_j(\mu_j^0 + RT \ln a_j)$$

其中, n_i, n_j 分别表示气相和凝聚相的物质的量, μ_i^0 和 μ_j^0 分别表示气相和凝聚相的标准化学势, a_j 为活度. 由于相平衡时, 体系自由能须达最小值, 故求出体系自由能的最小值, 并以最小值时的各相成分作为平衡相成分.

4 相图和热力学性质的优化分析及其预测

计算相图方法根据所研究体系中各相的特点, 集热力学性质、相平衡数据、晶体结构、磁性、有序-无序转变等信息为一体, 建立描述体系中各相的热力学模型和相应的自由能表达式, 其中的可调参数通过实测的热力学和相图数据, 经过优化计算获得或用各种经验方法估算, 最后基于多元相平衡的热力学条件计算相图, 以最终获得体系的具有热力学自洽性 (thermodynamic self-consistency) 的相图和描述各相热力学性质的优化参数^[17].

4.1 相图和热力学性质的优化分析

相图和热力学性质优化分析的关键步骤之一, 是描述各相热力学模型和热力学性质解析表达式中可调参数的优化计算. 优化计算的优劣以重现实验测量值为主要依据, 同时还

要由二元系外推到高元体系进行检验^[17]。溶液相的热力学数据类型不同,但主要分为三类:相平衡数据(液相线、固相线等);混合焓等量热数据;活度数据。由于这些数据使用了不同的实验测定方法和来自不同的研究者,因此难以保证体系所有热力学性质之间的热力学自洽性。计算相图方法尤其是相图和热力学性质的优化分析技术的发展,可以在一定的热力学模型基础上,用计算机对体系不同来源的热力学数据和相平衡资料进行热力学自相一致的分析,得到一组含有“最佳”优化参数的热力学表达式,用以计算二元相图和预示多元系的热力学性质及平衡关系。这种方法不仅可以把所有热力学性质联系起来,充分利用原始数据和数据间的交叉信息,而且可以提高拟合精度并保证最终拟合结果在总体上的热力学自洽性。常用的优化分析技术有线性最小二乘法、强化最小二乘法、高斯最小二乘法和贝耶斯最小二乘法^[17]。

4.2 多元系热力学性质和相图的预测

4.2.1 体系热力学性质的解析表达式的建立

为了借助计算机储存、检索和处理热力学数据,并由二元系数据预测多元系的热力学性质,必须建立体系热力学性质的解析表达式。其方法是选择一定的数学表达式,根据最小二乘原理由体系的实验数据,拟合确定表达式中的待定系数,从而获得二元、三元乃至多元系热力学性质的解析表达式。常用的有幂级数表达式、Redlich-Kister 展开式、勒让德多项式和解析表达式的改进形式。

4.2.2 由二元系性质预测多元系性质和相图

多元系热力学性质和相图的预测建立在对二元系热力学性质优化计算的基础上。以三元系为例,其关键是选择由三个组元两两组成的三个二元系中哪一点的数值进行插值来预示三元系的性质,据此对相图进行计算。不同的方法选择了不同的权重因子,但权重因子的选择应使最终的表达式能还原为正规溶液模型。如果三个二元系采取相同形式的权重因子便为对称模型;反之,则为非对称的模型。对称方法有 Kohler 方法^[18]、Colinet 方法^[19]、Muggianu 方法^[20]和周国治方法^[21]。不对称方法有 Bonnier 方法^[22]、Toop 方法^[23]、Hillert 方法^[24]等。

5 含氧化锆的氧化物系统计算相图的研究与进展

5.1 实验相图研究

由于氧化锆基材料的重要性,对该系统的实验相图已有大量的研究,各种相图手册中均可找到一些该系统的相图。目前已有专门的相图手册^[25]出版,查阅非常方便。尽管如此,已发表的相图的数量与需求相比,还是远远不足,尤其是三元系和更高元系的相图,仍然非常缺乏。而且由于陶瓷系统相图测定过程中的困难,其准确性也难以评估。

5.2 二元系的计算相图

对由 ZrO_2 与另一氧化物组成的二元系的相图,利用计算相图方法进行研究和优化,是一项有意义的工作。由于已有相当数量的实验相图的积累,对其进行研究,不仅可获得优化的相图,而且可以获得较准确的实验难以测定的热力学数据,以此来外推至高元系,对高元系相图进行预测,或者用于其他热力学计算。

已有相当数量的二元系被计算优化过,主要有以下这些体系:

ZrO_2 -MO 系统: $M=Ca, Mg, Sr$, 等

$\text{ZrO}_2\text{-M}_2\text{O}_3$ 系统: $M=\text{Al, Fe, Sc, Y, rare earth, 等}$

$\text{ZrO}_2\text{-MO}_2$ 系统: $M=\text{Ce, Hf, Ti, Si, U, 等}$

不同研究者所具体采用的计算方法并不相同, 所获得的结果也不完全相同. 对一些重要二元系的研究已获得一些有价值的结果.

$\text{ZrO}_2\text{-Y}_2\text{O}_3$ 系统是一个重要的含氧化锆二元体系, 对它的实验相图已有相当多的研究, 但是不同研究者绘制的相图并不完全一致.

Degtyarev 等^[26] 对该系统进行了计算, 但他们的估算只建立在最少量的实验数据之上, 与其他实验相图也不尽相符.

Du 等^[27] 对该系统已有的实验结果进行收集评估和优化计算, 获得了与实验结果符合较好的优化相图, 以及优化过的热力学数据, 可用于其他热力学计算.

其优化后的晶格稳定参数见表 1, 优化相图见图 1.

表 1 ZrO_2 和 $\text{YO}_{1.5}$ 的晶格稳定参数^[27]

Table 1 Lattice stability parameters of ZrO_2 and $\text{YO}_{1.5}$ (J/mol of cation, T in K)^[27]

| | |
|--|---|
| ${}^0G^{\text{l}}\text{-ZrO}_2=0.0$ | ${}^0G^{\text{l}}\text{-YO}_{1.5}=0.0$ |
| ${}^0G^{\text{c}}\text{-ZrO}_2=-87986.6+29.496T$ | ${}^0G^{\text{h}}\text{-YO}_{1.5}=-56735.0+20.9200T$ |
| ${}^0G^{\text{t}}\text{-ZrO}_2=-93954.8+31.755T$ | ${}^0G^{\text{c}'}\text{-YO}_{1.5}=-67419.3+25.1050T$ |
| ${}^0G^{\text{m}}\text{-ZrO}_2=-99978.8+35.898T$ | ${}^0G^{\text{t}}\text{-YO}_{1.5}=-35617.5+26.4625T$ |
| | ${}^0G^{\text{m}}\text{-YO}_{1.5}=-14697.5+29.9150T$ |

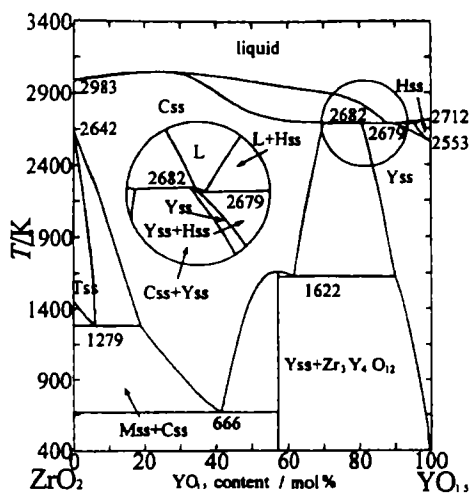


图 1 $\text{ZrO}_2\text{-YO}_{1.5}$ 系统的计算相图^[27]

Fig. 1 Calculated $\text{ZrO}_2\text{-YO}_{1.5}$ phase diagram^[27]

Li 等^[28] 在 Du 等^[27] 的工作基础上, 利用其优化过的 ZrO_2 热力学数据, 对 $\text{ZrO}_2\text{-CeO}_2$ 体系进行了优化计算, 获得了与实验相图符合较好的计算相图.

其优化后的热力学数据见表 2 和表 3, 优化相图见图 2.

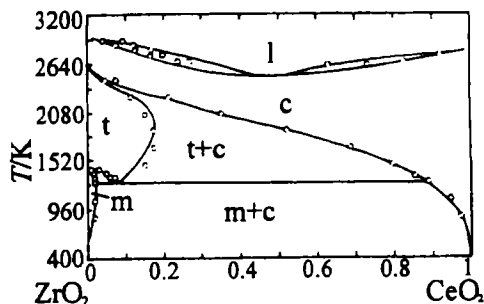


图 2 $\text{ZrO}_2\text{-CeO}_2$ 系统的计算相图^[28]

Fig. 2 Calculated $\text{ZrO}_2\text{-CeO}_2$ phase diagram^[28]

Yokokawa 等^[29] 采用简单的亚正规溶液模型, ZrO_2 的数据取自文献, 而另一氧化物的热力学数据则考虑其价态和离子半径进行估算, 计算了 $\text{ZrO}_2\text{-MO}$ ($M=\text{Mg, Ca, Sr}$), $\text{ZrO}_2\text{-MO}_{1.5}$ ($M=\text{Sc, Y, La, rare earth}$), $\text{ZrO}_2\text{-MO}_2$ ($M=\text{Ti, Hf, Ce}$) 系统的一系列相图.

表 2 CeO₂ 的晶格稳定参数^[28]
Table 2 Lattice stability parameters of CeO₂
(J/mol of cation, T in K)^[28]

| |
|---|
| ${}^0G^{l-\text{CeO}_2}=0.00$ |
| ${}^0G^{c-\text{CeO}_2}=-195800.00+70.018T$ |
| ${}^0G^{t-\text{CeO}_2}=-87917.50+39.783T$ |
| ${}^0G^{m-\text{CeO}_2}=-11697.50+288.915T$ |

表 3 计算后的 CeO₂-ZrO₂ 系统溶液参数^[28]
Table 3 Calculated solution parameters of CeO₂-ZrO₂ system(J/mol of cation, T in K)^[28]

| Phase | K_3 | K_4 |
|--------|-------------------------|-----------------------|
| liquid | $-243651.45+58.96182T$ | $123981.04-47.84299T$ |
| c | $108583.50-54.62258T$ | $60175.77-24.91597T$ |
| t | -54284.36 | |
| m | $-146064.78-238.20385T$ | |

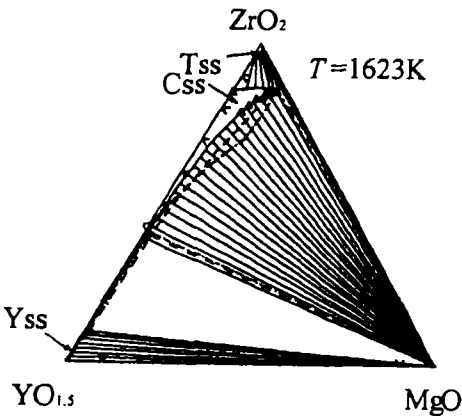


图 3 经计算的 ZrO₂-YO_{1.5}-MgO 系统在 1623K 的等温截面^[30]
Fig. 3 Calculated isothermal section of ZrO₂-YO_{1.5}-MgO system at 1623K^[30]

5.3 三元系的计算相图

三元系的实验相图非常缺乏，已有的实验相图其准确性也难以评估。计算相图方法采用已知的二元相图估算组分间相互作用的表征参数，以估算三元相图或更高元相图。

Du 等^[30] 结合 ZrO₂-MgO, ZrO₂-YO_{1.5} 和 YO_{1.5}-MgO 三个系统的计算结果，采用 Bonnier 方法对 ZrO₂-YO_{1.5}-MgO 系统进行了计算。计算结果与实验数据符合得较好(见图 3)。

Yokokawa 等^[29] 对 ZrO₂-YO_{1.5}-MO_x (M=transition metal) 系统进行了计算，获得了不同价态的过渡金属氧化物在氧化钇稳定氧化锆 (YSZ) 中的溶解度，以此来考虑过渡金属氧化物系列溶解度随价态和离子尺寸的变化规律。

最近 Li 等^[31] 采用取代模型和 Muggianu 方法，计算了 ZrO₂-Y₂O₃-CeO₂ 系统的富锆一角在不同温度下的相图，计算结果与实验检测结果符合很好。计算获得的四方相固溶体、单斜相固溶体和立方相固溶体的吉布斯自由能，可供实验参数使用。

已经被优化计算过的三元系有：

$\text{ZrO}_2\text{-CaO-MgO}$, $\text{ZrO}_2\text{-CaO-Y}_2\text{O}_3$, $\text{ZrO}_2\text{-Y}_2\text{O}_3\text{-MgO}$,
 $\text{ZrO}_2\text{-Y}_2\text{O}_3\text{-CeO}_2$, $\text{ZrO}_2\text{-Y}_2\text{O}_3\text{-TiO}_2$, $\text{ZrO}_2\text{-CeO}_2\text{-La}_2\text{O}_3$,
 $\text{ZrO}_2\text{-Y}_2\text{O}_3\text{-Fe}_2\text{O}_3$, $\text{ZrO}_2\text{-SiO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3$, $\text{ZrO}_2\text{-SiO}_2\text{-UO}_2$, 等

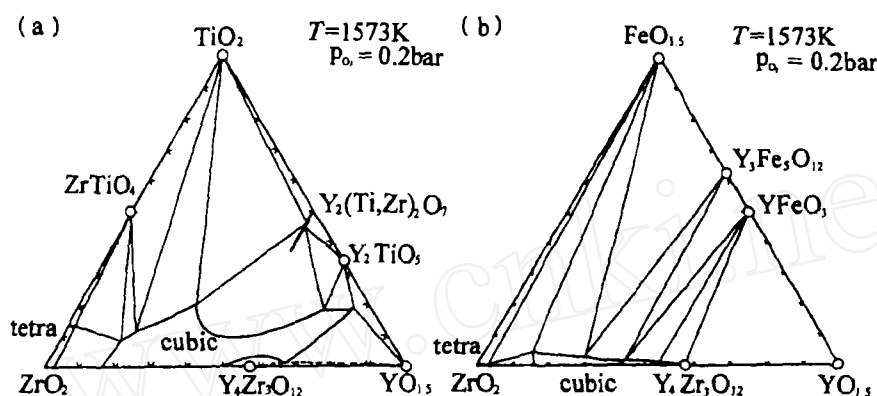


图 4 经计算的 $\text{ZrO}_2\text{-YO}_{1.5}\text{-MO}_x$ 系统在 1573K 的相图

Fig. 4 Calculated phase relations in the $\text{ZrO}_2\text{-YO}_{1.5}\text{-MO}_x$ systems at 1573K

(a) $\text{MO}_x=\text{TiO}_x$; (b) $\text{MO}_x=\text{FeO}_x$ ^[29]

6 结语

氧化锆基材料既是一种重要的结构陶瓷材料, 又是一种用得最广泛的氧离子固体电解质. 由于其优良的力学和电学性能, 在结构陶瓷和功能陶瓷两方面都有着广泛的应用前景. 材料的性能与其相结构有着密切的关系, 因此, 对该系统的相图进行研究是必要而且迫切的. 但是由于实验测定中的困难, 实验相图的数目, 远远落后于实际需求. 不同来源的实验相图往往并不一致, 有些还存在着争议, 其准确性也有待进一步的实验验证. 在这种情况下, 从已有数据中尽量有效地提取信息, 利用计算相图技术对氧化锆基材料的相图进行研究和优化, 是一项有意义而又可行的工作, 将对氧化锆基材料的组分设计和性能研究起重大的促进作用.

参考文献

- [1] 郭祝昆, 林祖纘, 严东生. 高温相平衡与相图. 上海: 上海科学技术出版社, 1987.
- [2] Hillert M. In: Cohen M ed. Phase Transformation. Cleveland, Ohio: ASM Metals Park, 1969. Chapter 5: Calculation of Phase Equilibria.
- [3] Swain M V 主编, 郭景坤, 等译. 陶瓷的结构与性能. 北京: 科学出版社, 1998.
- [4] Van Larr J J. Z. Physik. Chem., 1908, **63**: 216; 64, 257.
- [5] Meijering J L. Philips Research Reports, 1950, **5**: 333-356.
- [6] Kubaschewski O, Chart T G. J. Inst. Metals, 1965, **93**: 329-338.
- [7] Kaufman L, Bernstein H. Computer Calculation of Phase Diagrams. New York & London: Academic Press, 1970.
- [8] Hillert M. J. Phase Equilib., 1998, **19** (3): 206-212.

- [9] Hillert M, Staffansson L I. *Acta Chem. Scand.*, 1970, **24**: 3618-3626.
- [10] Sundman B, Agren J. *J. Phys. Chem. Solids*, 1981, **42** (4): 297-301.
- [11] Andersson J O, Guillermet A F, Hillert M, et al. *Acta Metall.*, 1986, **34** (3): 437-445.
- [12] Hillert M, Jansson B, Sundman B, et al. *Metall. Trans. A*, 1985, **16A** (2): 261-266.
- [13] Hillert M, Jansson B, Sundman B. *Z. Metallkd.*, 1988, **79** (2): 81-87.
- [14] Pelton A D, Blander M. *Metall. Trans. B*, 1986, **17B**: 805-815.
- [15] Blander M, Pelton A D. *Geochim. Cosmochim. Acta*, 1987, **51** (1): 85-95.
- [16] Pelton A D, Blander M. *CALPHAD*, 1988, **12** (1): 97-108.
- [17] 乔芝郁, 许志宏, 刘洪霖编著. 冶金和材料计算物理化学. 北京: 冶金工业出版社, 1999.
- [18] Kohler F. *Monatsh. Chemie*, 1960, **91**: 738-740.
- [19] Colinet C. *D E S Univ. Grenoble, FRANCE*, 1967.
- [20] Muggianu Y M, Gambino M, Bros J P. *J. Chimie Physique*, 1975, **72** (1): 83-88.
- [21] Chou K C. *CALPHAD*, 1987, **11** (3): 293-300.
- [22] Bonnier E, Caboz R. *C. R. Acad. Sci.*, 1960, **250** (3): 527-529.
- [23] Toop G W. *Trans. Met. Soc. AIME*, 1965, **233**: 850-855.
- [24] Hillert M. *CALPHAD*, 1980, **4** (1): 1-12.
- [25] Ondik H M, McMurdie H F ed. *Phase Diagrams For Zirconium and Zirconia Systems*. Westerville, Ohio: The American Ceramic Society, 1998.
- [26] Degtyarev S A, Voronin G F. *CALPHAD*, 1988, **12** (1): 73-82.
- [27] Du Y, Jin Z P, Huang P Y. *J. Am. Ceram. Soc.*, 1991, **74** (7): 1569-1577.
- [28] Li L, Xu Z Y, Ao Q. *J. Mater. Sci. Technol.*, 1996, **12**: 159-160.
- [29] Yokokawa H, et al. In: Badwal S P S, Bannister M J, Hannink R H J ed. *Science and Technology of Zirconia V*. Lancaster, Pennsylvania: Technomic Publishing, 1993. 59-68.
- [30] Du Y, Jin Z P, Huang P Y. *J. Am. Ceram. Soc.*, 1991, **74** (9): 2107-2112.
- [31] Li L, Van Der Biest O, Wang P L, et al. *J. Euro. Ceram. Soc.*, 2001, **21**: 2903-2910.

Progress on Calculation of Phase Diagram of ZrO₂-containing Oxides Systems

XU Tao¹, LI Lin², WANG Pei-Ling¹, Omer Van Der Biest³, Jef Vleugels³

(1. State Key Lab of High Performance Ceramics and Superfine Microstructure, Shanghai Institute of Ceramics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 200050, China; 2. Department of Materials Science and Engineering, Shanghai University, Shanghai 200072, China; 3. Department of Metallurgy and Materials Engineering, Katholieke Universiteit Leuven, Leuven B-3001, Belgium)

Abstract: Zirconia is a kind of important ceramics materials. Because of its superior mechanical and electrical properties, zirconia has been widely applied as both structural ceramics and functional ceramics. Based on a brief introduction on the progress and principle of calculation of phase diagram, the corresponding work on zirconia-containing systems in recent years was reviewed, and the results in some important systems were also summarized in detail. It was expected that the information of zirconia-containing phase diagrams based on the CALPHAD method would significantly promote the compositional design of zirconia ceramics.

Key words phase diagram; calculation of phase diagram; zirconia