CompuTherm LLC
8401 Greenway Blvd.Suite 248
Middleton, WI 53562, USA

Phone +1 (608) 203-8843
Fax +1 (608) 203-8045
Email info@computherm.com
Web www.computherm.com

上海思响信息科技有限公司
地址：上海市浦东新区东方路428号235室
网址：www.computherm.cn
邮箱：yiwen.zhu@computherm.com
电话：13901652239

Pandat 软件 — 材料设计与开发的综合平台

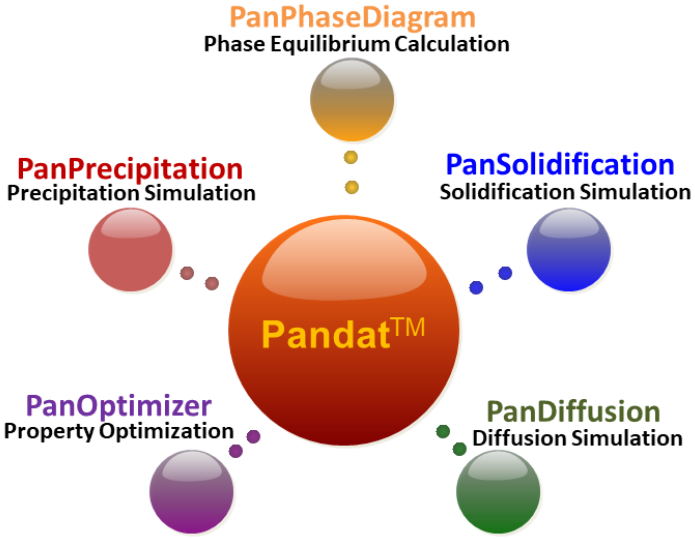


图1: Pandat™ 软件与模块示意图

Pandat™ 软件

一款基于 CALPHAD 方法开发的集成计算软件，用于多元体系热力学/相图计算、凝固模拟、析出模拟和扩散模拟。它具有强大的热力学计算引擎、友好的图形用户界面和灵活的计算后处理功能。可通过编辑表格绘制各种关系图。Pandat™ 软件的设计理念是建立一个集成平台，目前，该软件包括五个模块。软件功能通过集成多个模块而进一步提升和扩展。

Pandat™软件的基本功能

- 相平衡和相图：稳态和亚稳相平衡、等温截面、垂直截面、多元体系的相投影、稳定相图、三维相图、伪二元相图、压力相图。
- 性质等值线图：热力学性质等值线图、物理性质等值线图等。
- 相的性质：相的量与成分、相转变温度。
- 热化学性质：形成焓、活度、分压、偏摩尔性质、超额性质、驱动力。
- 热物理性质：摩尔体积、密度、表面张力、粘度、电阻率和热导率。
- 特殊性质：磁性转变、二级相变、零相分数线、反应方程、调幅分解线。
- 合金设计：通过高通量计算及数据挖掘寻找满足用户定义性质的合金组成。
- 迁移率与扩散率：自扩散、示踪扩散、化学扩散与互扩散系数。
- 优化模块：热力学模型参数优化、热物性参数优化和动力学性质参数优化。
- 析出模块：热处理过程中的析出动力学模拟，如粒子数密度、平均粒径的演变、粒径分布、屈服强度和硬度。
- 扩散模块：一维扩散模拟扩散偶的成分分布、相体积分数和相组成随时间的变化。
- 凝固模拟： 使用平衡杠杆定律(Lever-rule)、Scheil模型和改进的Scheil模型（考虑了固相中反向扩散）模拟凝固路径和热量演变。
- PanEngine API：热力学计算引擎动态链接库。可与用户自己的代码集成以开发用户定制的应用，如凝固、热处理、铸造、焊接、腐蚀和相场模拟。

相图模块(PanPhaseDiagram)—用于相平衡计算的模块。图2所示为700～1500℃温度范围内AlCoCrFeNi高熵合金的平衡计算，即各个相的相分数与温度的关系。计算得该合金的熔点约为1400℃。在840~1340℃温度范围内Fcc、Bcc和B2相共存。B2相的相分数随着温度的降低而增加，而Fcc相的则相反。σ相在880℃开始形成，其含量随着温度降低而增加，同时无序Bcc相和Fcc相减少。在840℃左右，Bcc相消失。图3为计算所得Fe-Al二元相图，包含了居里温度线Tc，Bcc和B2以及B2和$D0_3$之间的二级相转变曲线。

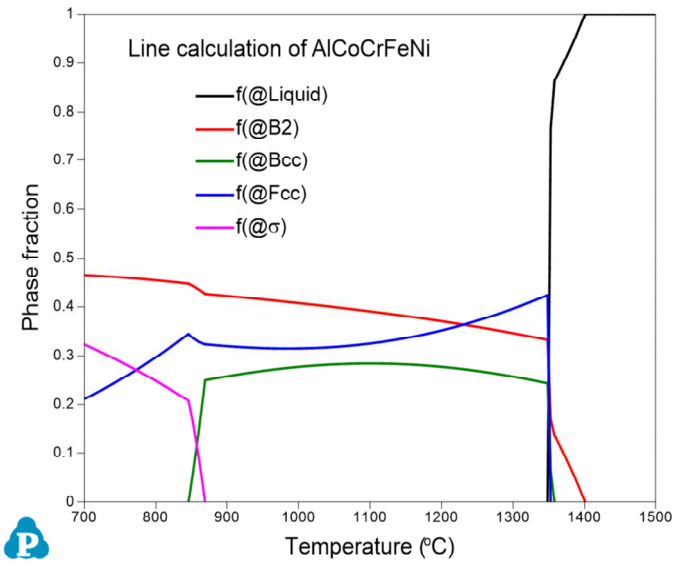


图2：700-1500℃范围内AlCoCrFeNi高熵合金的平衡计算结果

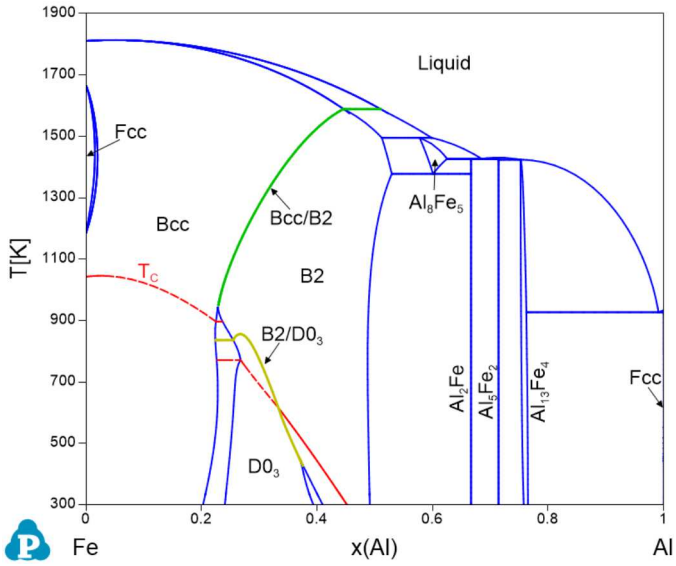


图3：含Tc线和Bcc/B2,B2/$D0_3$二级相转变线的Fe-Al二元相图

图4为计算的Al-Mg二元系在300℃下的平衡吉布斯自由能。该自由能曲线描述的是在各给定成分下的最小吉布斯自由能。同时，图5给出的是Al-Mg体系中每个相在300℃的吉布斯自由能曲线。图5可以用来说明不同成分下各相的相对稳定性。应该指出的是，在计算热力学性质（如焓和吉布斯自由能）时应选定参考态。在图4中，选择的是Fcc_Al和Hcp_Mg作为参考状态。如果没有选定参考态，将选用数据库中的默认参考态（通常是GHS298），如图5所示。

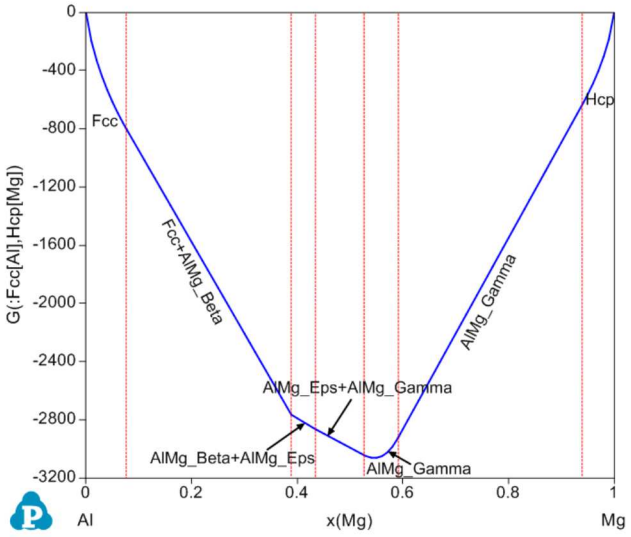


图4：计算的Al-Mg二元系在300℃下平衡吉布斯自由能

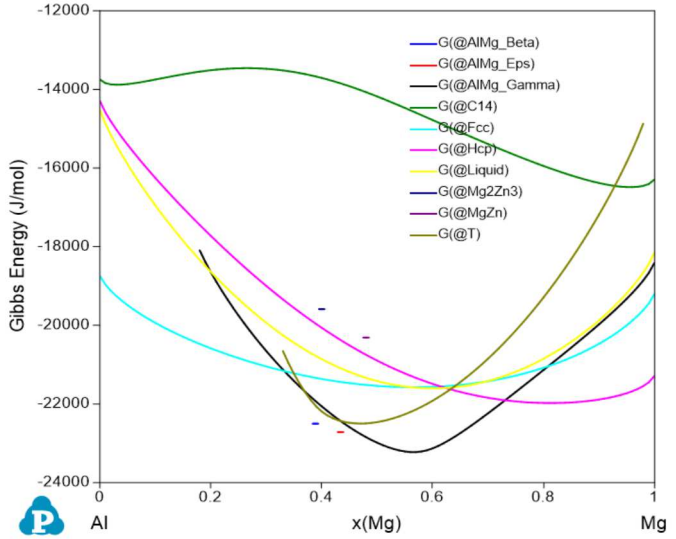


图5：Al-Mg体系中各个相在300℃的吉布斯自由能曲线

等值线图—等值线图是将性质的等值线叠加在二维相图上，可以清晰地显示某一性质在二维图中的变化趋势以及该性质与相稳定性之间的关系。利用Pandat™ 可以绘制各种性质的等值线图，包括热力学性质、物理性质以及它们之间的任意组合。图6为500℃时Mg在Al-Mg-Zn三元体系中的活度等值线图。图7为Al-Mg-Zn三元体系中Hcp相在500℃时变成稳定相的驱动力等值线图。通过驱动力等值线，可以了解一个相在成分空间不同区域的相对稳定性。

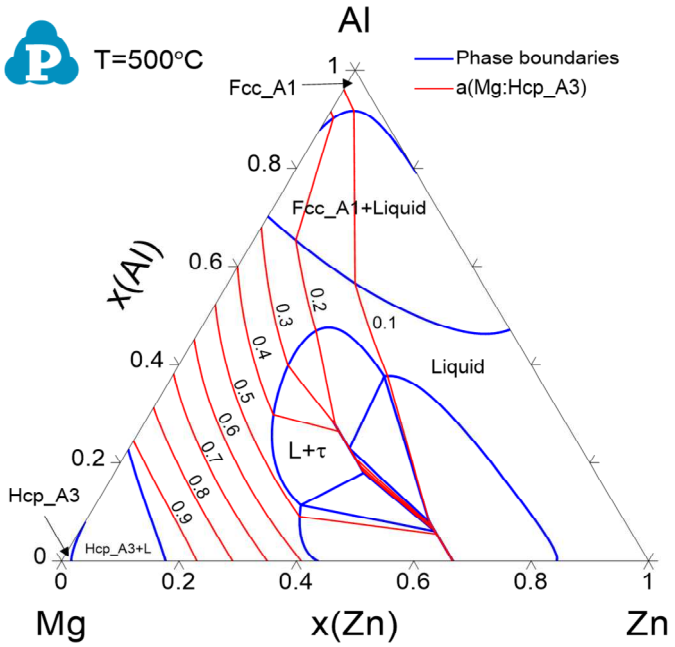


图6：500℃时Mg在Al-Mg-Zn三元系中的活度等值线图

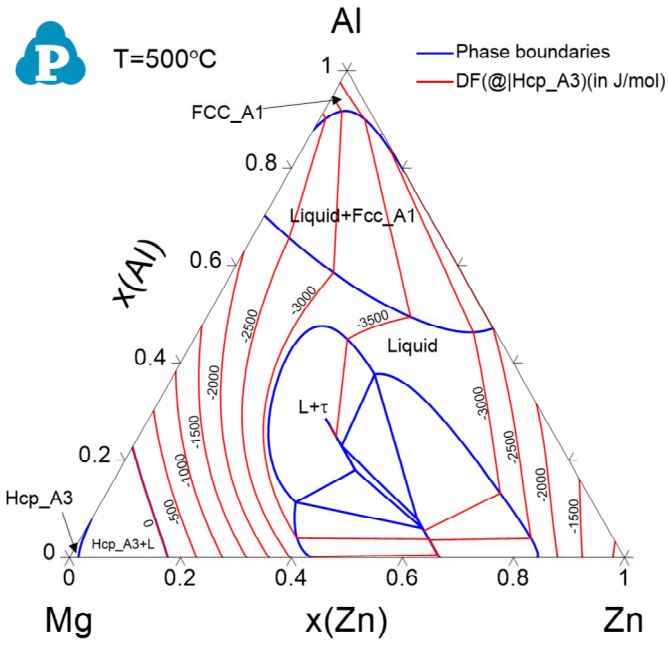


图7：Al-Mg-Zn三元系500℃时Hcp相驱动力的等值线图

添加数据库 – 用户可以在原始数据库（tdb或pdb）上附加定制数据库（tdb）。 该功能允许用户修改/替换模型参数，添加新参数或向原始数据库添加新相。 更重要的是，该功能允许用户通过定制数据库（tdb）定义属性模型和模型参数，进而计算任何感兴趣的属性。 用户定义的属性可以是从原始热力学数据库获得的任何热力学属性的函数。 图8和图9给出了使用此函数计算出的晶格参数和热导率。

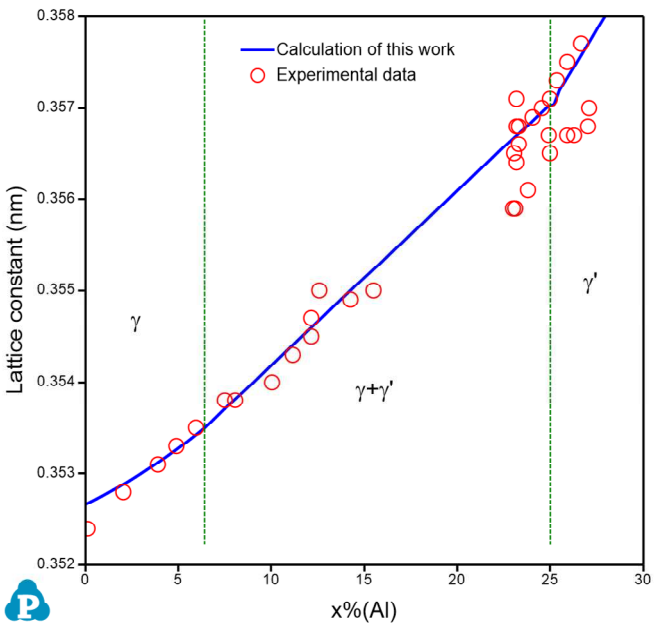


图8：计算的室温下Al-Ni二元合金的晶格常数与实验值的对比

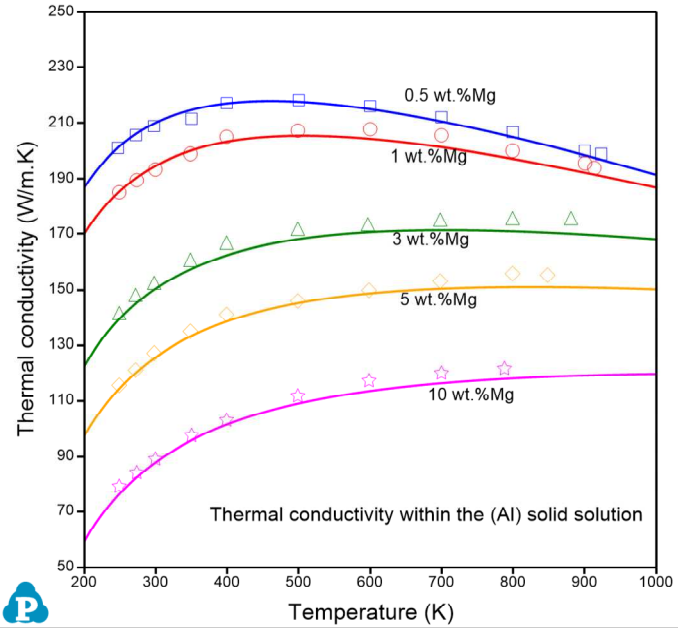


图9：Al-Mg二元体系中Al固溶体的热导率的计算值与实验值的对比

析出模块（PanPrecipitation）—该模块通过与 PanEngine 无缝集成，获取必要的热力学数据和迁移率数据，用于模拟热处理过程中的析出动力学。该模块可用于研究析出相的形核、生长/固溶和粗化；平均粒径和数密度与时间的关系；颗粒粒径分布与时间的关系、体积分数和析出相成分与时间的关系。

该模块已通过模拟高温镍基合金的析出过程得到验证。它可以用来模拟镍基合金中二级及三级 γ' 的析出过程。该模块也可以用来模拟多个析出相的同时析出，如模拟 Ni718 合金中的 γ' 和 γ'' 相的同时析出。图 10 显示的是一个镍基合金的模拟结果，即 γ' 粒子数密度和二级、三级 γ' 的累积体积分数。图 11 和 12 是对 Ni718 合金中 γ' 和 γ'' 同时析出的模拟例子。图 11 为等温时效过程中粒径的变化，图 12 是两步时效后 γ' 和 γ'' 的粒径分布。

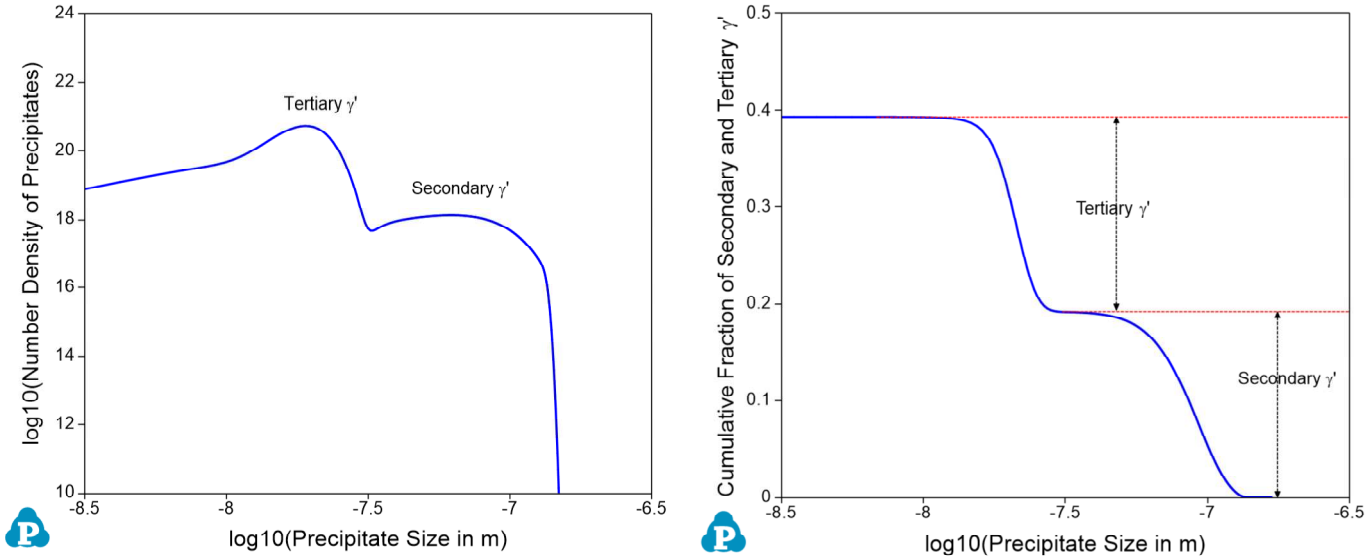


图10：镍基合金冷却过程中的析出动力学（a）粒径分布 （b）析出相累积体积分数

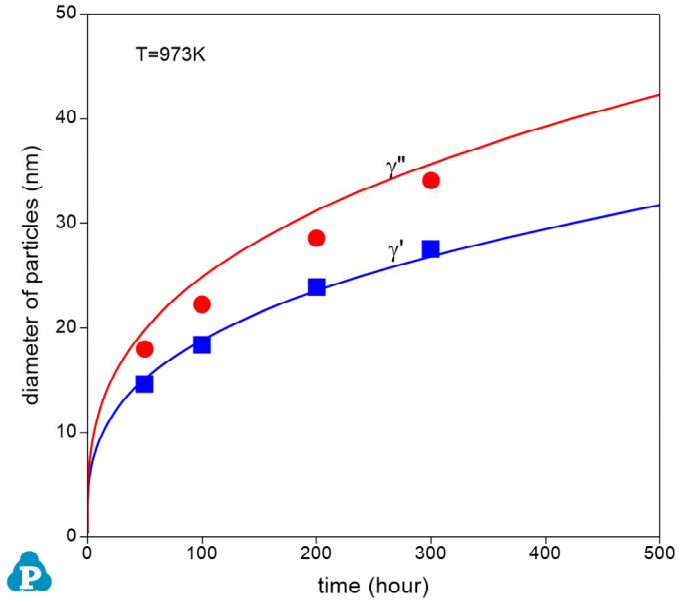


图11：等温时效过程中γ' 和γ''的粒径变化

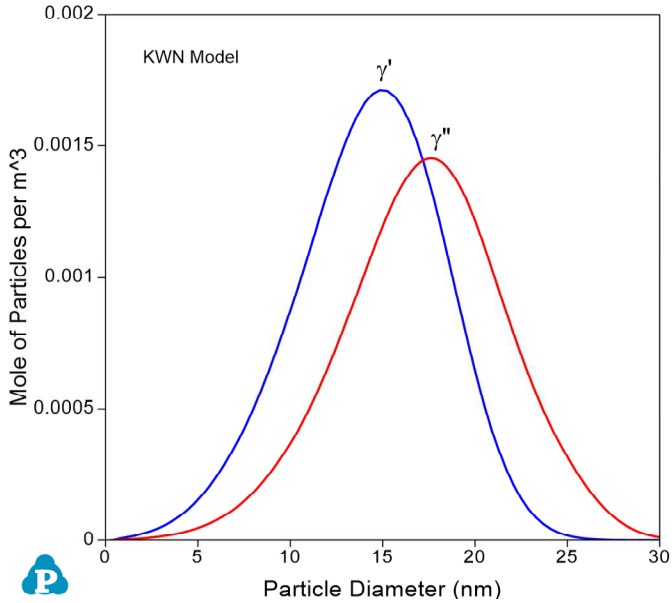


图12：两步时效后γ'和γ''的粒径分布

更多信息，请访问我们的网站： www.computherm.com

PanPrecipitation 模块也用于阐释铝合金的时效硬化行为。对 Al-2.3Mg-6.1Zn (wt%)合金在 160℃时效 1000 小时进行了析出模拟，模拟的粒径和屈服强度随时间的变化与实验数据的对比如图 13 所示。可见，随着时效时间的增加，颗粒逐渐变粗，屈服强度在 1～10 小时之间达到峰值。在 160℃时效 10 小时后，屈服强度迅速下降。

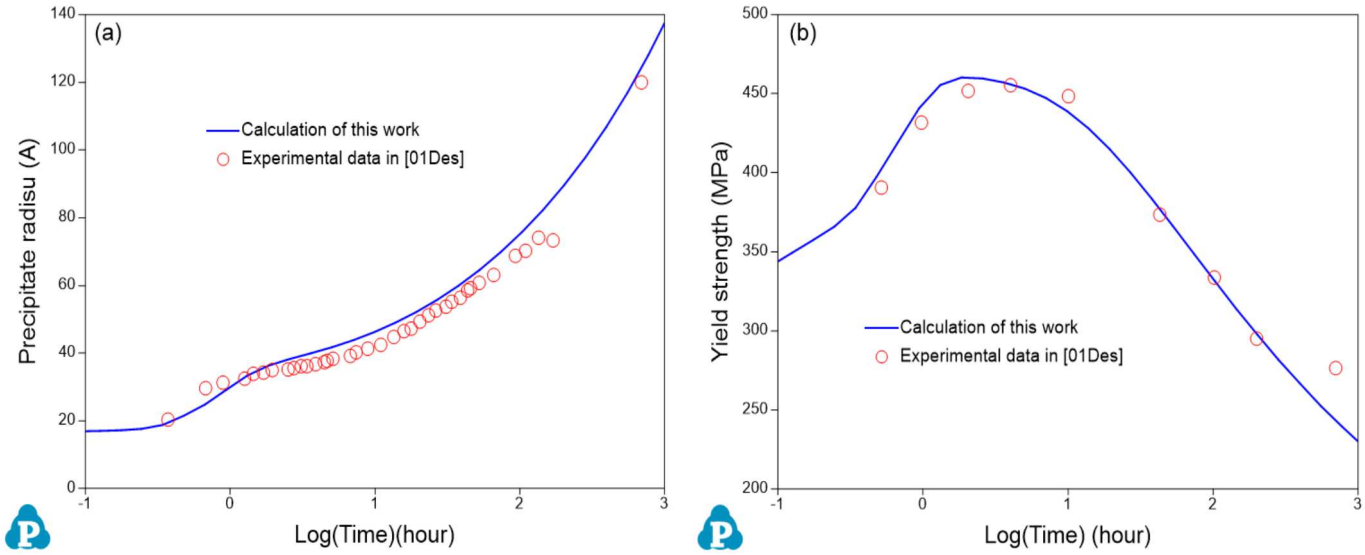


图13：Al-2.3Mg-6.1Zn (wt.%)合金在 160ºC的时效析出模拟

- **异质形核模型：**理论模型中考虑了晶界/边缘/角或位错处的异质形核。图 14 所示为考虑异质形核作用，不同位置合金中碳化物沉淀析出的一个计算示例。
- **长径比的演变：**用于模拟由于取向相关的界面能和各向异性位错应变能而引起的析出相长径比的演变。析出相长大模型考虑了形状因子的影响。
- **强度模型：**针对镍基合金开发了强度模型，考虑了具有弱/强对耦合或弯曲机制的多个粒度群的颗粒。图 15 为计算的 Nimonic 105 合金的临界分剪切应力。

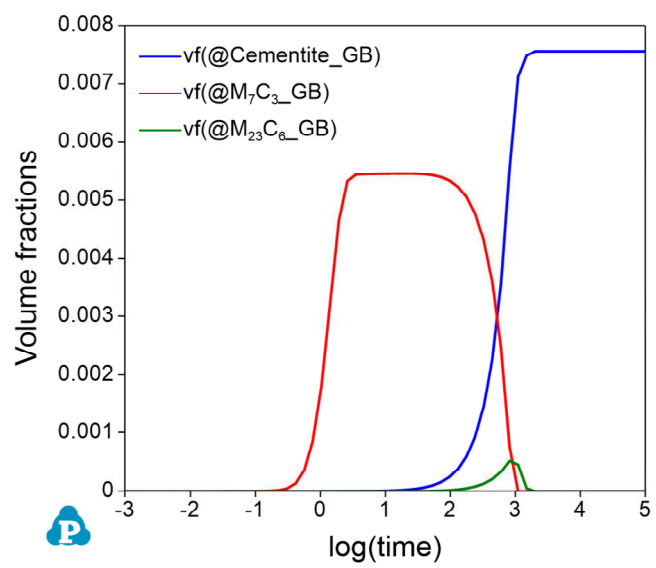


图14：合金中碳化物的析出模拟

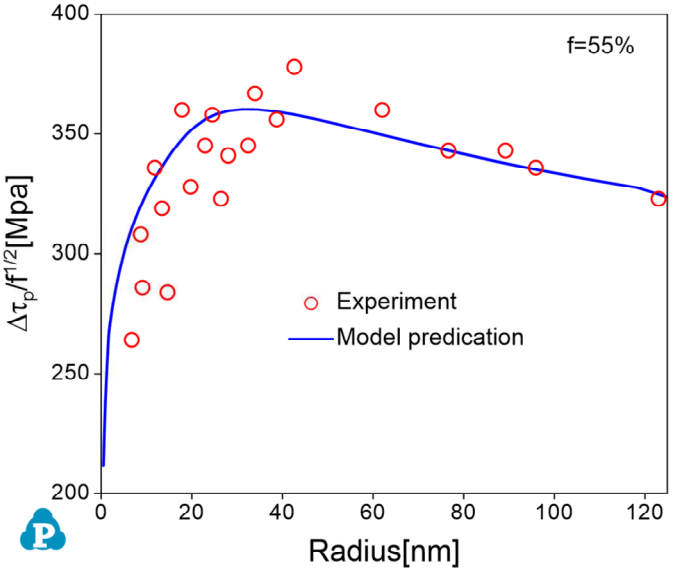


图15：Nimonic 105合金的临界分剪切应力

扩散模块（PanDiffusion）—该模块与用户友好的Pandat™图形用户界面(GUI)以及热力学计算引擎PanEngine无缝集成，用于模拟各种条件下的元素扩散。可以定义不同的热处理过程、边界条件和几何形状，模拟扩散偶的成分分布、相体积分数和相组成随时间变化。

图16所示为均匀化热处理的模拟示例，Al-Si合金中(Si)颗粒在三个均匀化热处理温度下的固溶。图17显示了Cr-Fe-Ni体系的一个三层扩散偶在1100℃下的模拟示例。图18为Ni3Al/Ni扩散偶在1200℃退火43.2小时的扩散模拟与实验数据的对比。最初的γ′/γ 界面在退火后移动。图19显示了多元镍基高温合金扩散偶之间的扩散模拟示例：IN100和IN718扩散偶在1150℃下热处理1000小时后的扩散情况。

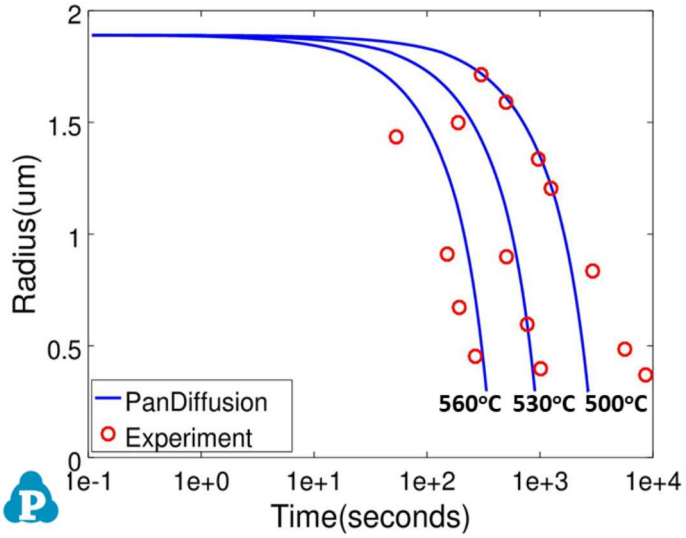


图16：Al-Si合金中(Si)颗粒在三个均匀化热处理温度下的固溶。

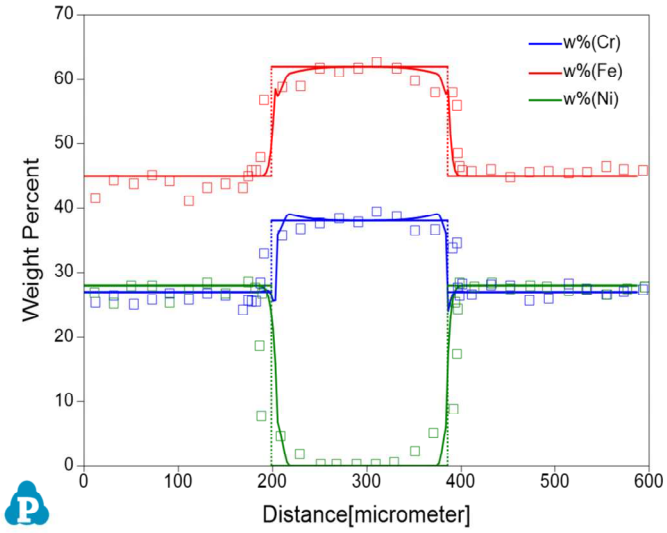


图17：Cr-Fe-Ni体系中三层扩散偶在1100℃恒温1小时的扩散模拟与实验数据的对比

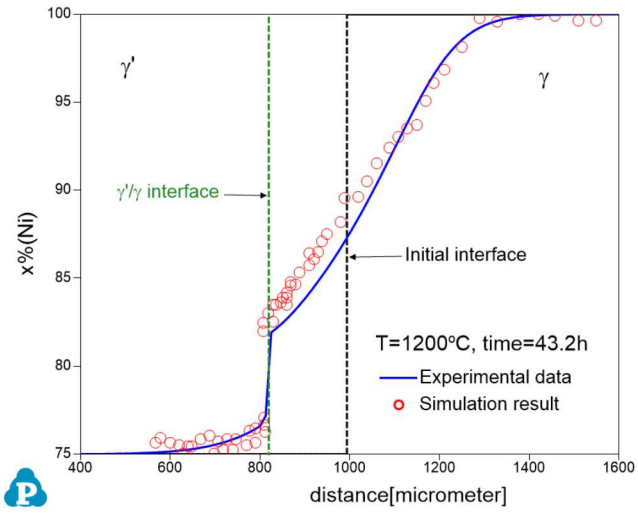


图18：Ni3Al / Ni扩散偶在1200℃退火43.2小时的扩散模拟与实验数据的对比

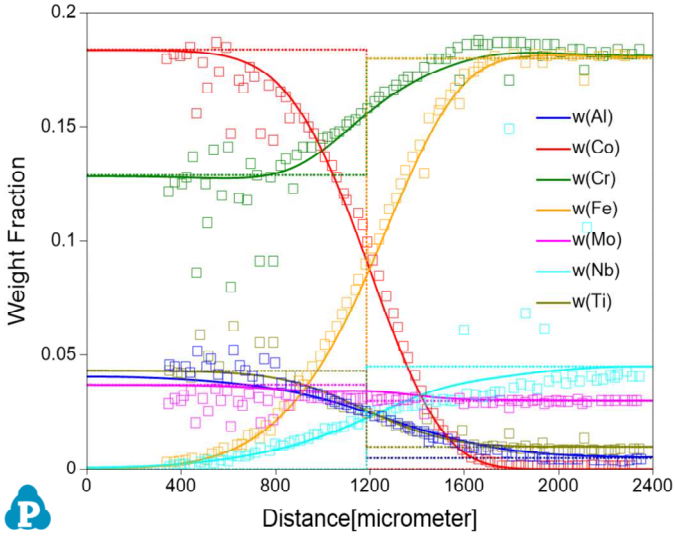


图19：IN100和IN718在1150℃下退火1000小时的扩散模拟与实验数据的对比

凝固模块（PanSolidification）— 该模块与用户友好的 Pandat™ 图形用户界面（GUI）以及热力学计算引擎 PanEngine 无缝集成，用于模拟不同条件下的合金凝固过程。内嵌三种模型用于凝固模拟，分别是 Level rule 模型（平衡杠杆定律），Scheil 模型（固体中没有扩散）和考虑固相中的反向扩散和枝晶臂粗化的改进 Scheil 模型。图 20 所示为使用 Level rule 和 Scheil 模型模拟的铝合金的凝固过程。该图给出了凝固过程中固相分数与温度的关系。图 20 说明在此情况下，Scheil 模型可以更好地描述实验中的凝固行为。其他特性，例如凝固过程中液相和固相的成分变化以及热量变化也可以绘制出来。图 21 是使用 Scheil 模型模拟的 A356 合金凝固过程中相分数随温度变化。图 22 为 Mg-Al-Sr 三元体系在富镁角的液相线投影。图 22 中绘制的凝固路径可用于预测所选合金成分的铸造镁合金的微观结构。改进的 Scheil 模型可用于模拟给定冷却速率下凝固过程中的固相中元素分布，二次枝晶臂间距和其他性能。图 23 所示为计算的 Mg-Al 合金中固体中元素分布及其与实验数据的对比。

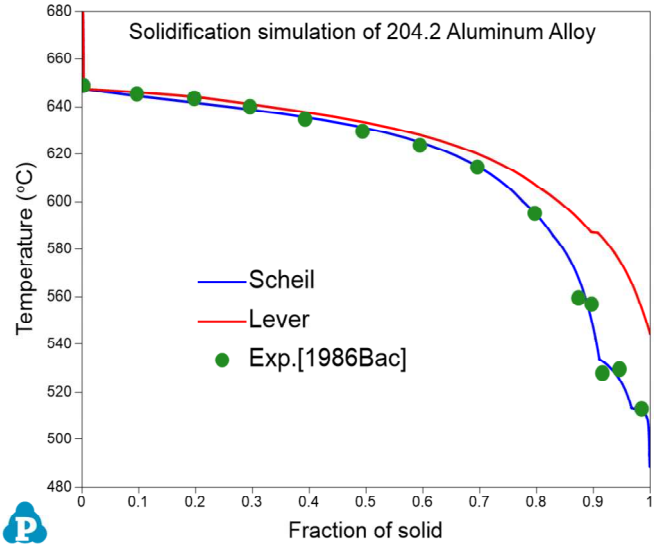


图20：使用三种模型模拟的204.2铝合金的凝固行为及其与实验数据的对比

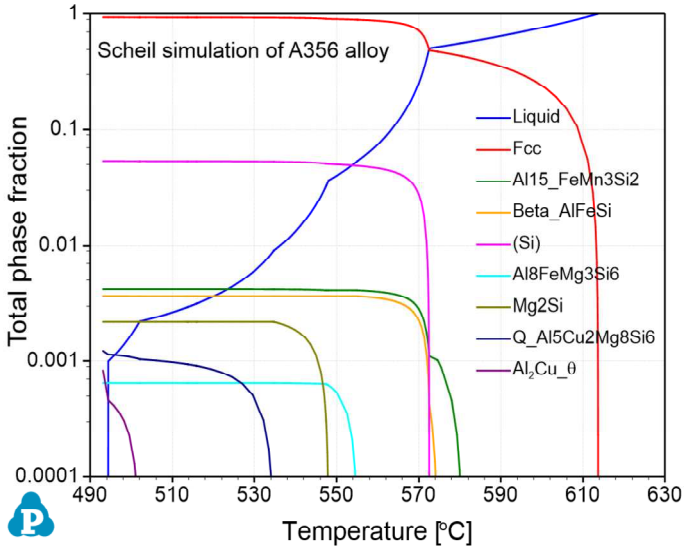


图21：使用Scheil模型模拟的凝固过程中A356合金的各相分数随温度的演变

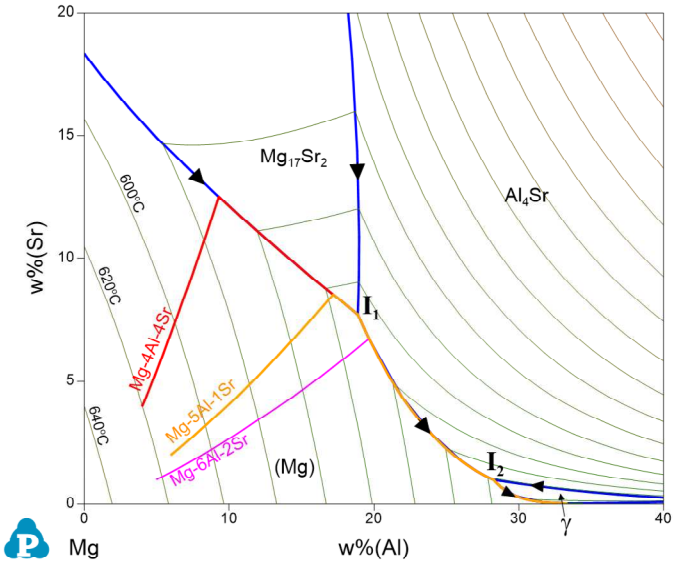


图22：计算的Mg-Al-Sr液相线投影和三种镁合金的凝固路径（Scheil模型）

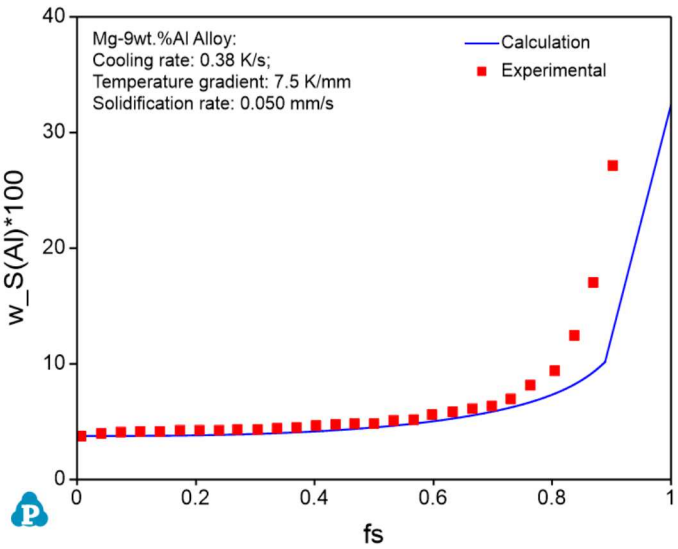


图23：计算的(Mg)枝晶中的Al成分和fs的关系与实验值的对比

高通量计算 (HTC)—Pandat™软件的高通量计算是通过一个简单的设置在用户定义的成分区间按步长进行批量计算，用户也可以把一系列互不相关的成分点调入进行批计算，通过对模拟结果进行数据挖掘来找到满足用户定义标准的合金成分。这个功能的目的是通过设计来开发具有某些特性的合金，实现合金设计的理念。搜索结果可以通过表格或彩图来呈现。图24显示的是Al-Mg-Zn体系中不同合金成分的凝固温度区间。左图为平衡杠杆定律的计算结果，右图是用Scheil模型的计算结果。图25给出了20K/s的冷却速率下Al-Cu-Mg三元体系的热裂纹敏感性图。左图是使用凝固模块下的改进的Scheil模型的高通量计算的凝固模拟预测，右图是来自实验结果。

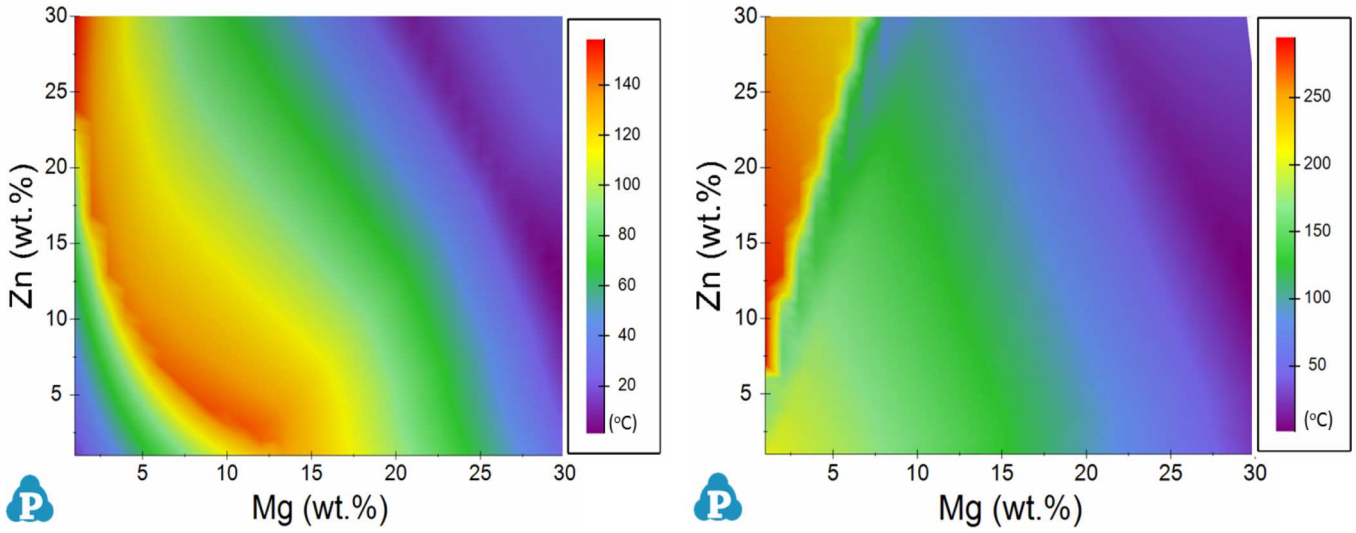


图24：Al-Mg-Zn体系中不同合金组成的凝固温度区间
左图为平衡杠杆定律的计算结果，右图用Scheil模型的计算结果

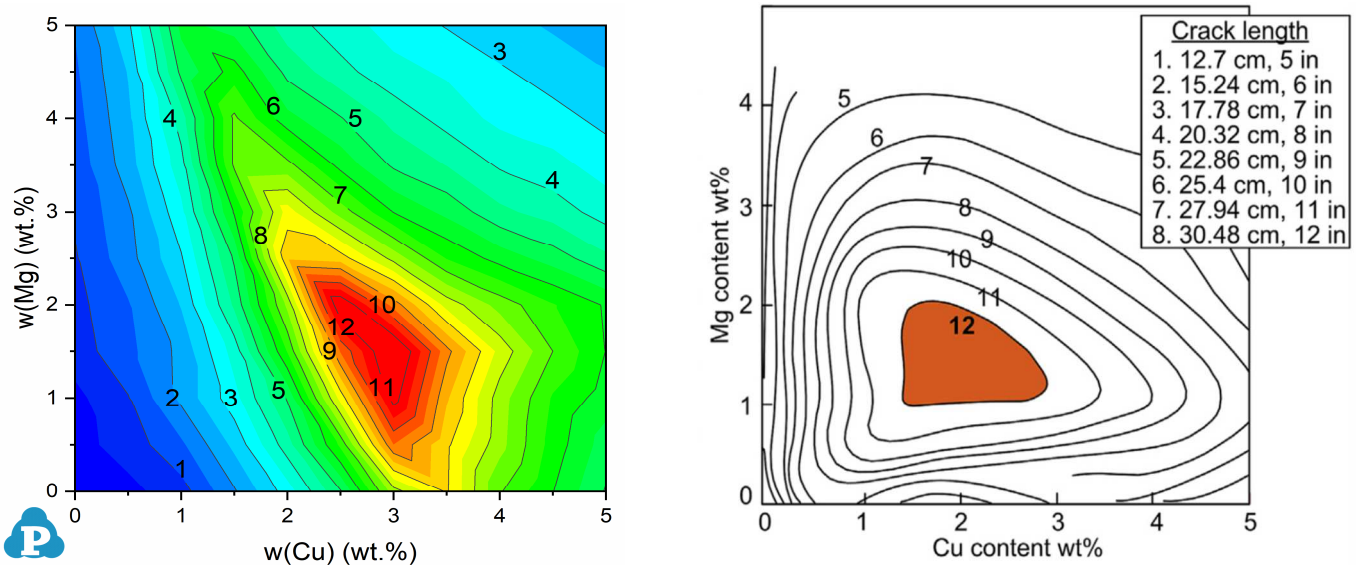


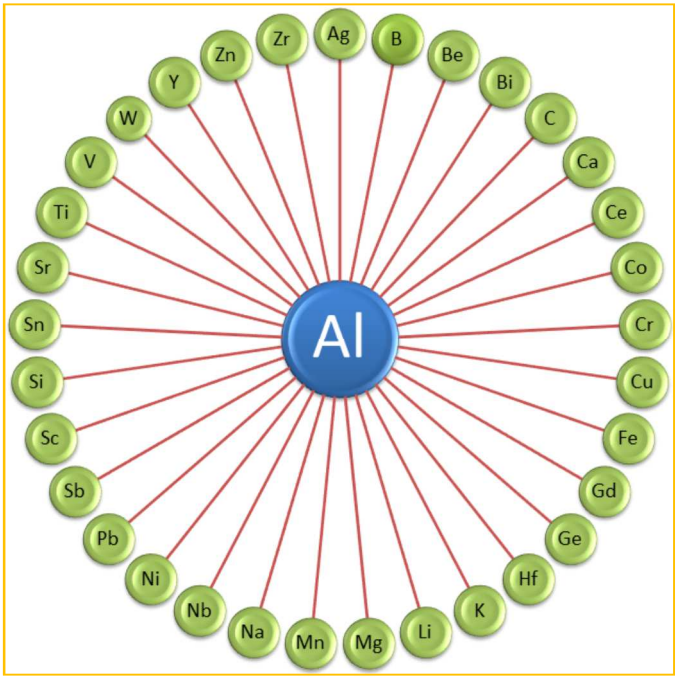
图25：20K/s的冷却速率下Al-Cu-Mg三元体系的热裂纹敏感性图。
左图是使用改进的Scheil模型高通量计算的凝固模拟预测，右图是来自实验结果。

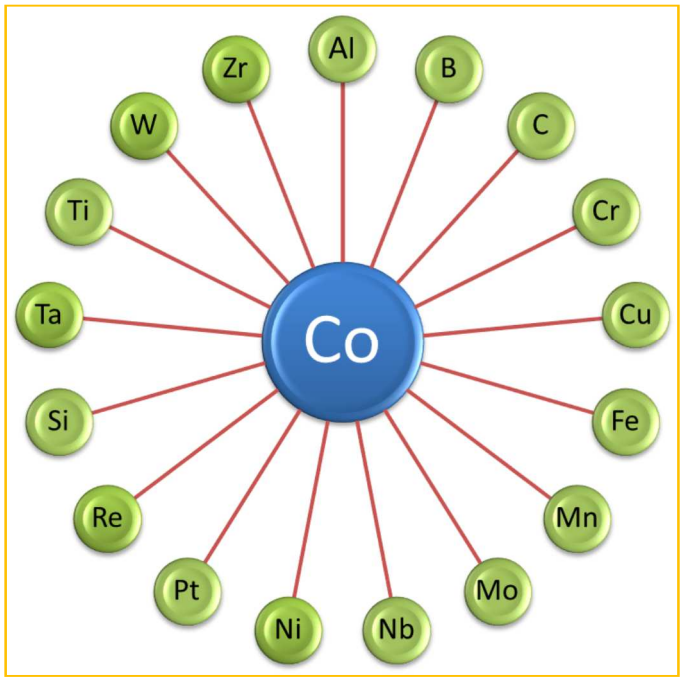
控制台模式 (Console Mode)—除了图形用户界面模式外，Pandat™ 还可以在控制台模式下运行。控制台模式允许用户在不打开 Pandat 图形界面的情况下使用批处理文件运行 Pandat。它是为那些要将 Pandat 计算与第三方软件（需要多次调用 Pandat）集成的用户而设计的。

热力学数据库

PanAluminum: 多元**铸造**和**变形铝**合金热力学数据库。目前，该数据库包括 34 种元素，851 个相以及 342 个全浓度范围优化的二元体系，该数据库已经过大量铝合金实验数据验证。

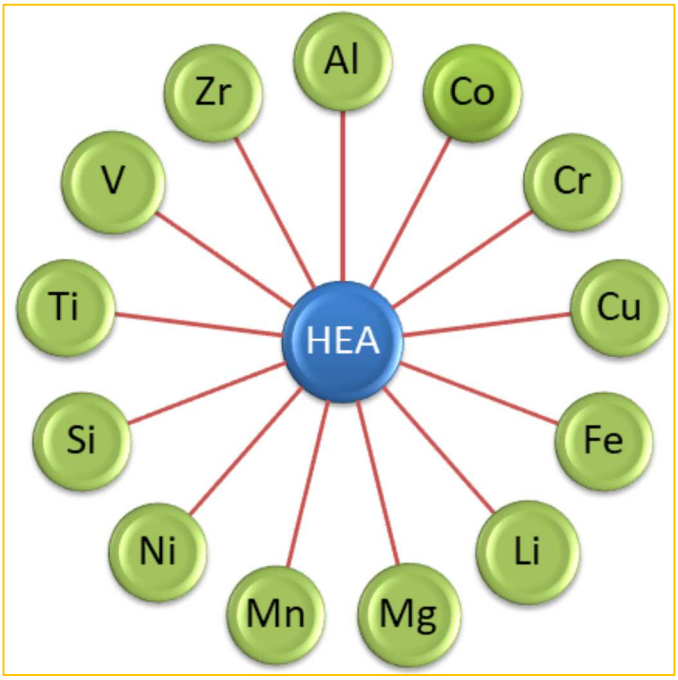
PanCobalt: 多元**钴基**高温合金热力学数据库。该数据库包括 18 种元素，306 个相，以及 243 个全浓度范围优化的二元和三元体系，该数据库已经过公开发表的相平衡数据验证。

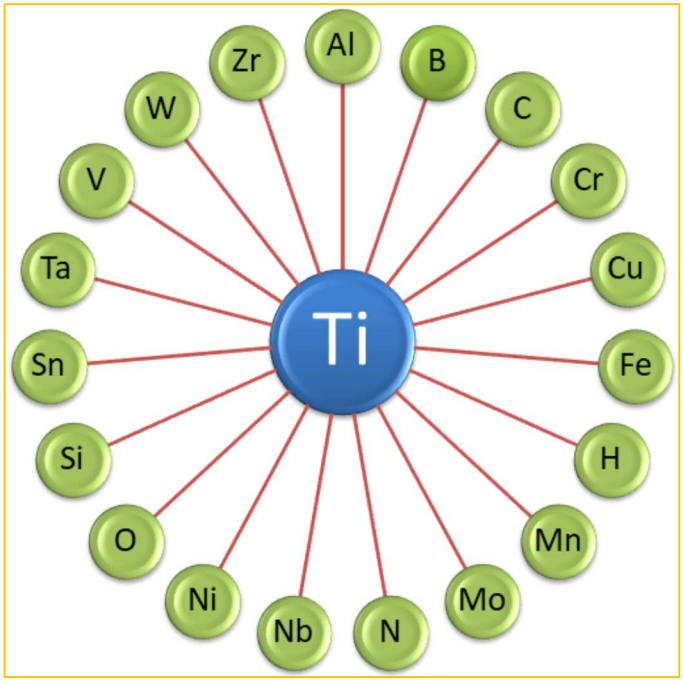




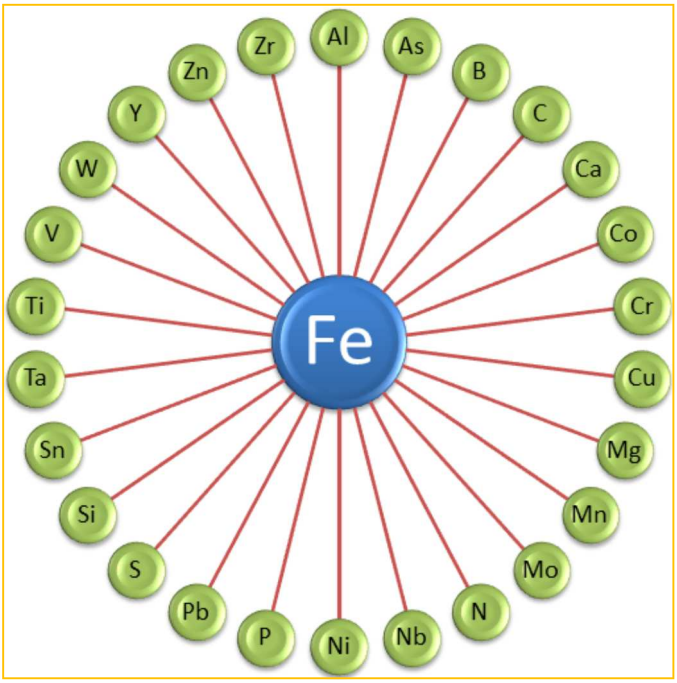
PanHEA: **高熵合金**热力学数据库，包括 15 种元素，热力学优化评估了全部 102/105 个二元体系和 210 个三元体系。

PanTi: 多元**钛基**合金热力学数据库，包含了 20 种元素，320 个相，对 147 个子体系进行了建模，可用于描述富钛合金体系。

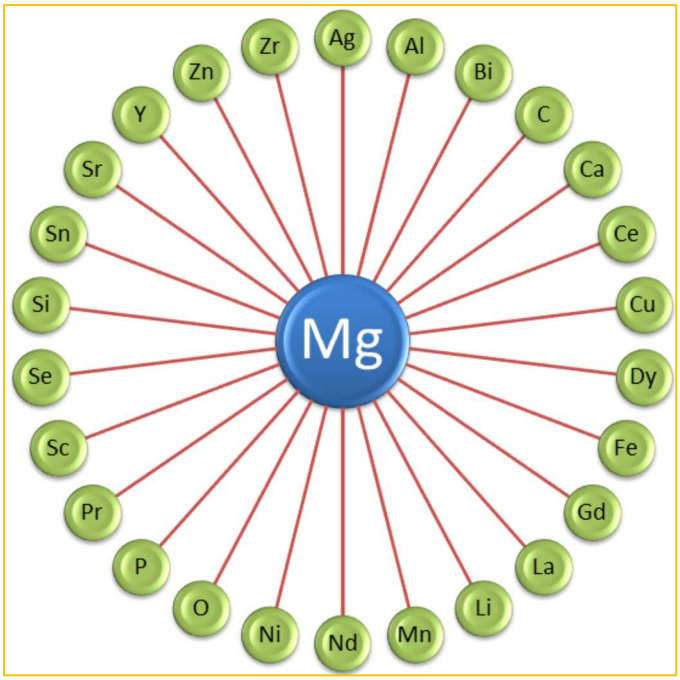




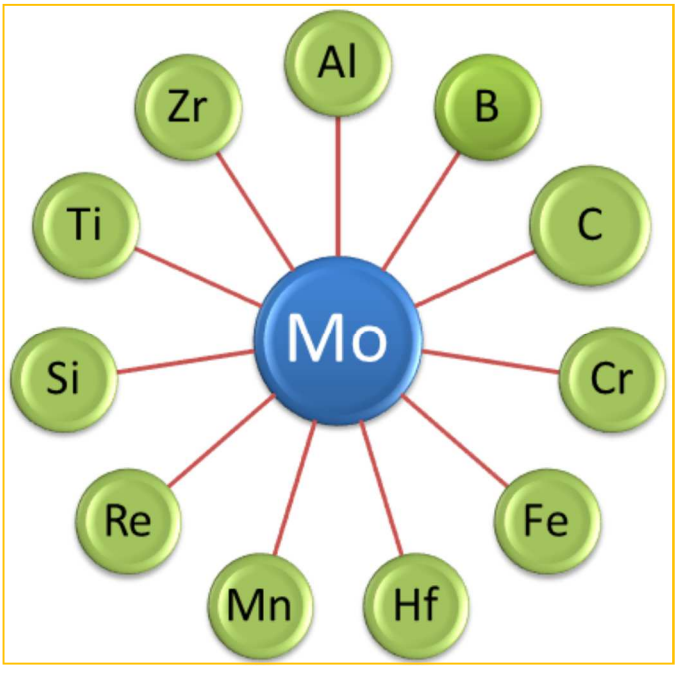
PanIron： 多元**富铁**合金热力学数据库，有 27 种元素，534 个相以及 278 个全浓度范围优化的二元体系，该数据库已经过大量铁合金实验数据验证。



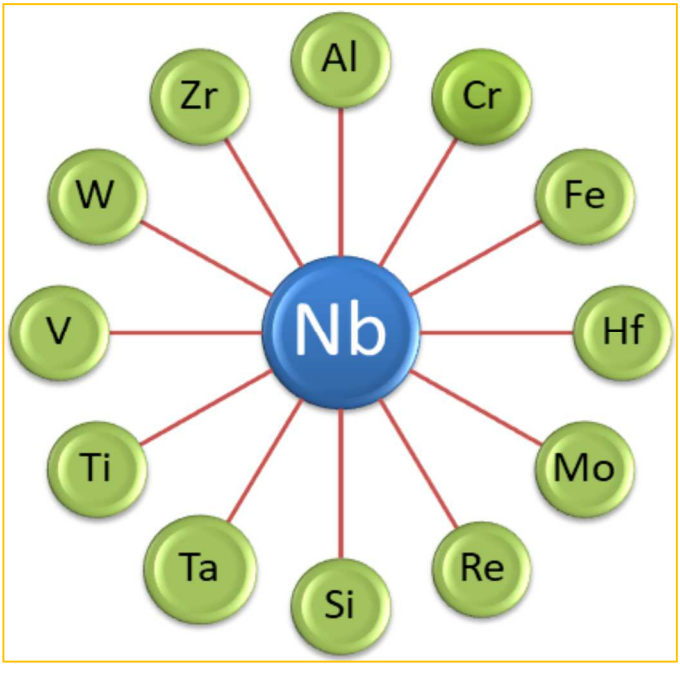
PanMagnesium： 多元**镁**合金热力学数据库，目前该数据库包含 27 种元素组成，574 个相，以及 211 个全成分范围优化的二元、三元和四元体系。该数据库已经过大量镁合金实验数据验证。



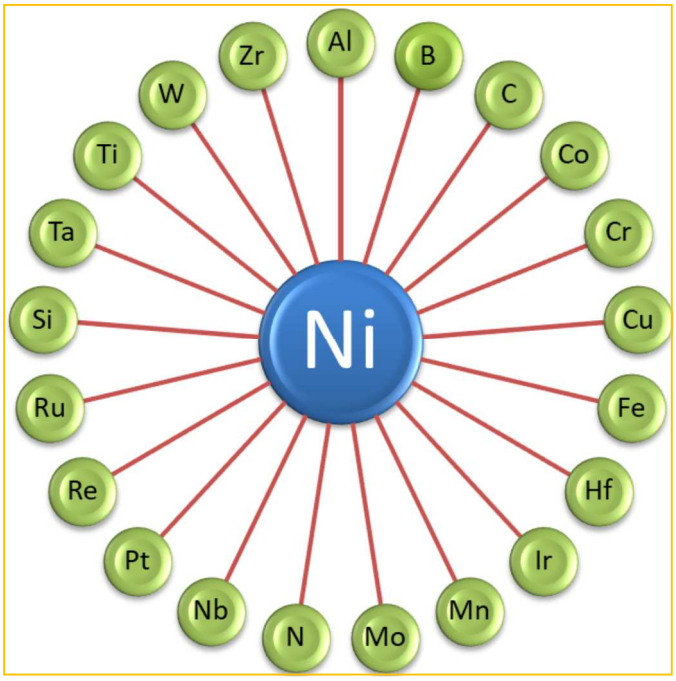
PanMolybdenum： 多元**富钼**合金热力学数据库，包括 12 种元素，168 个相以及 61 个全浓度范围优化的二元和三元体系，该数据库已经被大多数 Mo-Si-B 基合金实验数据所验证。



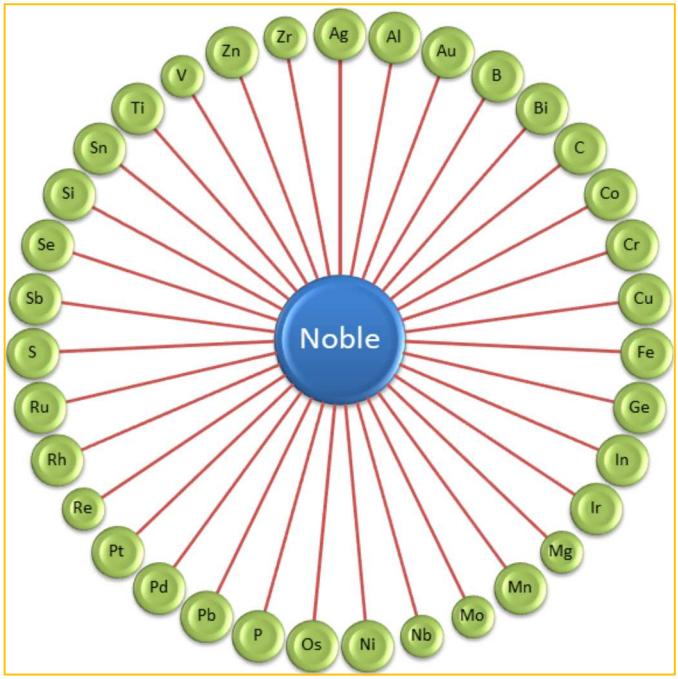
PanNiobium： 多元**富铌**合金的热力学数据库，该数据库含 13 种元素，131 个相以及 93 个全浓度范围优化的二元和三元体系，该数据库已经被很多耐热合金实验数据所验证。



PanNickel：镍基高温合金热力学数据库，包含 22 种元素，149 个相以及 90 个全浓度范围优化的二元和三元体系，该数据库已经过大量镍超高温合金实验数据验证。

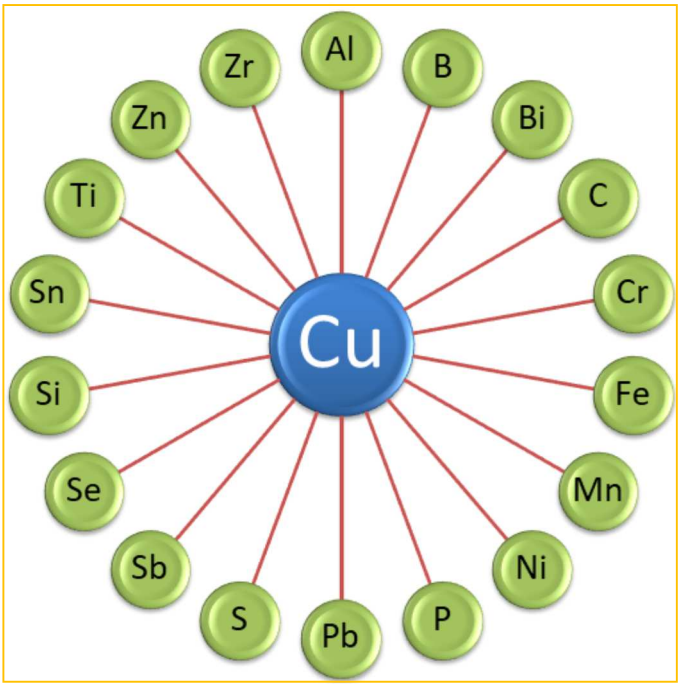


PanNoble：贵金属合金热力学数据库，含 35 种元素，863 个相以及 581 个优化的子体系，可用于研究银基、铜基、富铂贵金属基合金及富铅/锡焊料。



PanSolution： 二元体系数据库。该数据库包括 79 种元素，779 个二元体系，涉及多元固溶体和很多重要的金属间化合物，共 2042 个相，可用于快速计算获得二元相图。

MDT Copper： 多元**富铜**合金热力学数据库，有 19 种元素，330 个相以及 135 个全浓度范围优化的二元和三元体系，该数据库用于铜基合金的材料设计。



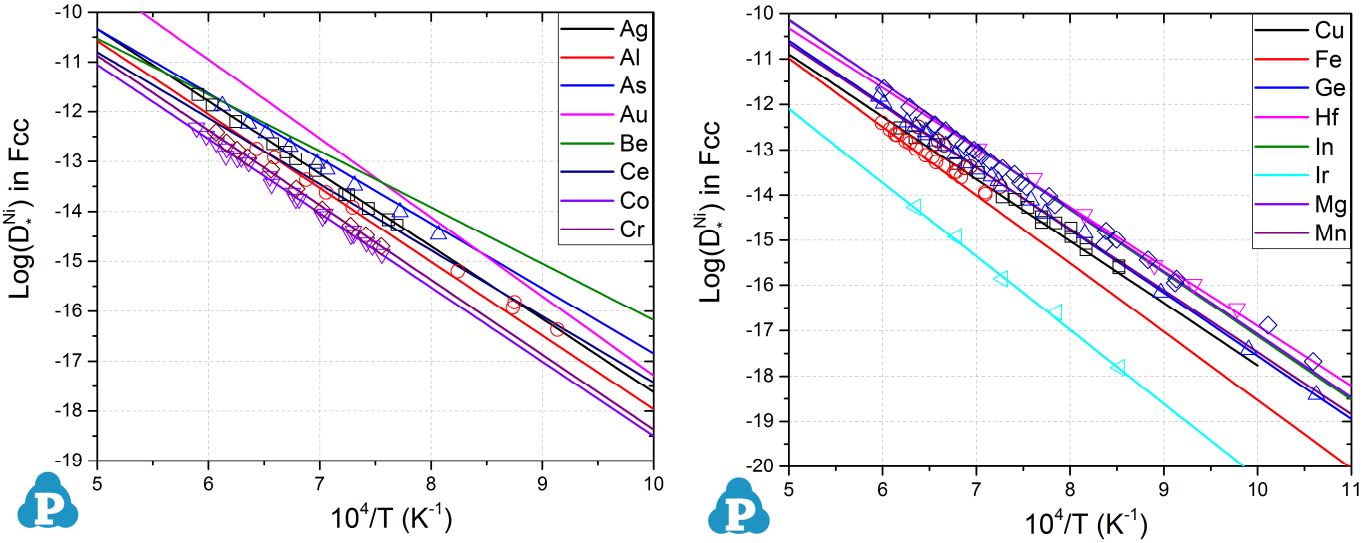


图22：Fcc-(Ni)的杂质扩散系数的计算结果与实验数据的对比

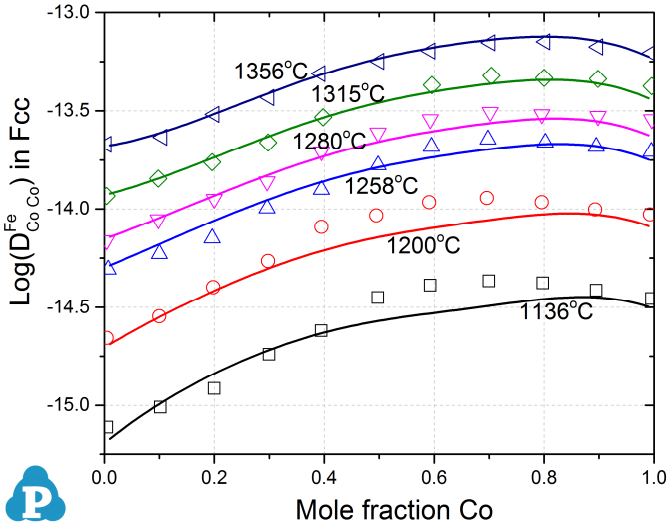


图 23： 不同温度下 Fe 在 Fcc Co-Fe 合金中的互扩散系数的计算值与实验数据的对比

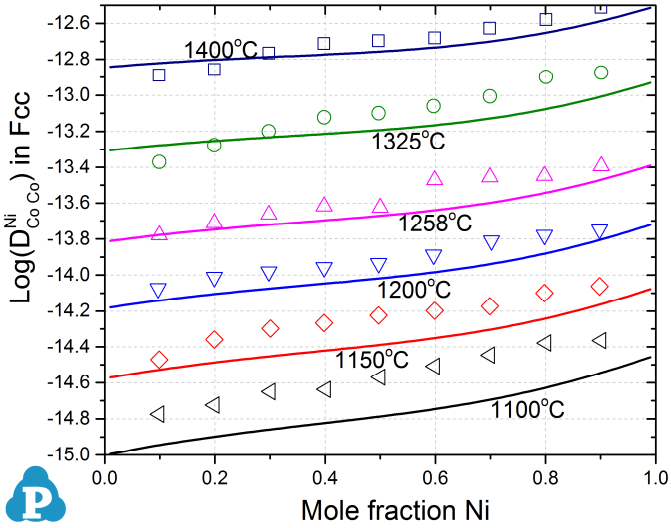


图 24： 不同温度下 Ni 在 Fcc Ni-Co 合金中的互扩散系数的计算值与实验数据的对比

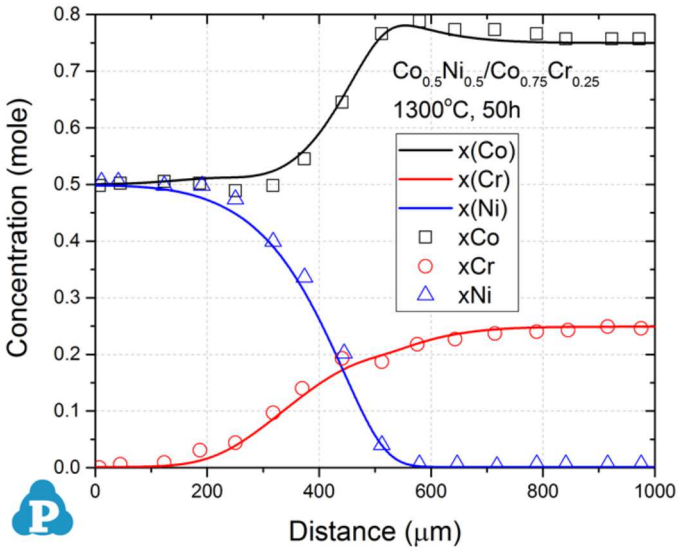


图 29： $Co_{50}Ni_{50}/Co_{75}Cr_{25}$ (at%)扩散偶在 1300℃退火 50 小时的扩散模拟与实验数据的对比

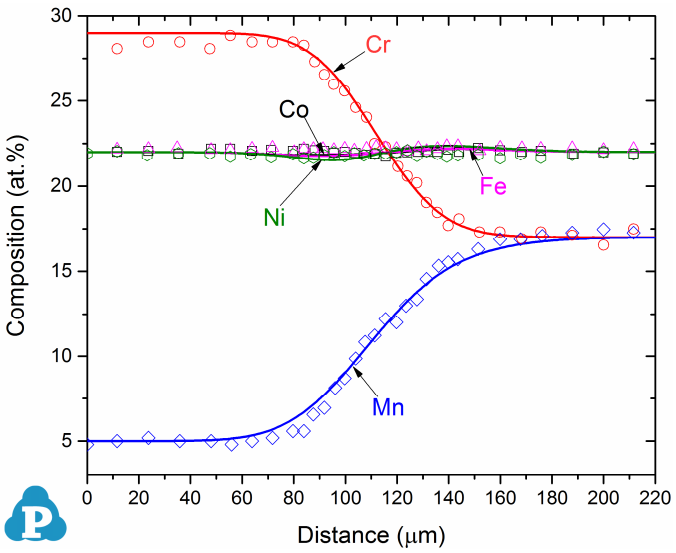


图 30： $Co_{22}Fe_{22}Ni_{22}\mathbf{Cr_{29}Mn_5}/Co_{22}Fe_{22}Ni_{22}\mathbf{Cr_{17}Mn_{17}}$ (at.%) 扩散偶在 1000℃下退火 100 小时的扩散模拟结果与实验值的对比

摩尔体积数据库

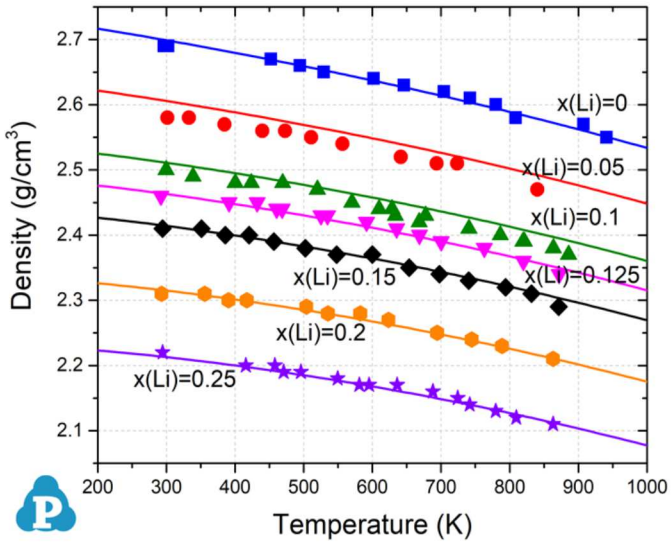


图31：计算的fcc Al-Li 二元合金的密度与实验数据的对比

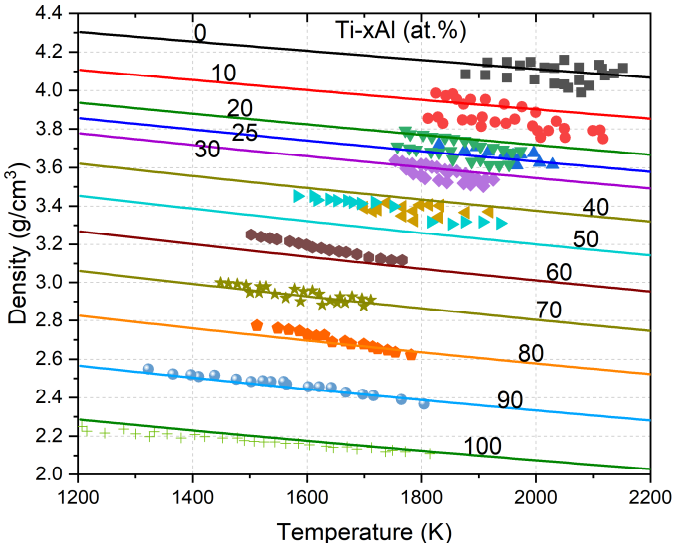


图32：计算的液态Ti-Al二元合金的密度与实验数据的对比

教学工具

Pandat™ 演示版可用于二元系和三元系的各种类型计算，可以用作教学软件。相关资料含两个PowerPoint文件和一套相关的TDB文件可在官网下载：www.computherm.com。

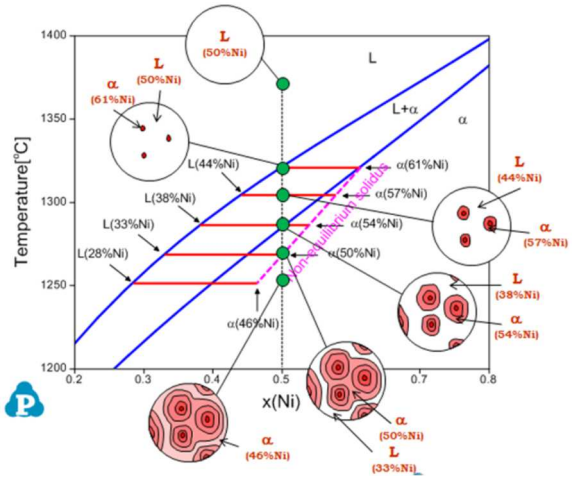


图33：非平衡凝固后相图与微观组织的关系

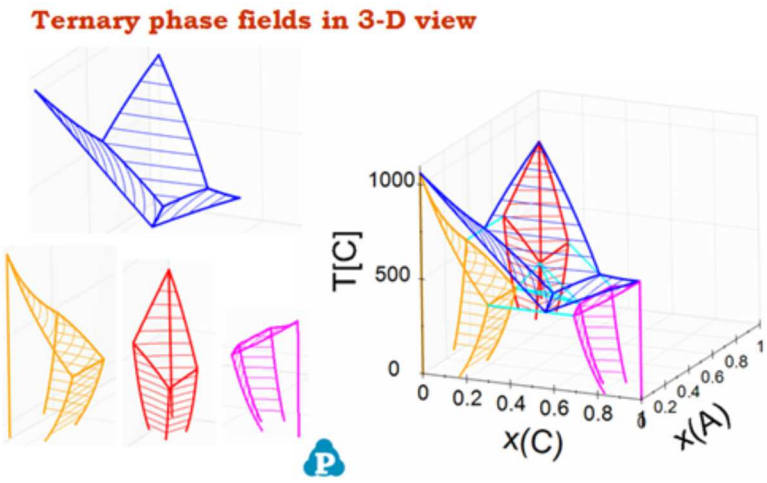


图34：含三个子二元体系的平衡反应的三维三元相图

咨询服务

- 提供多元相平衡、扩散、析出、焊接、铸造等计算，帮助提供实际问题的解决方案
- 开发定制的热力学数据库、迁移率数据库和热物理性质数据库等
- 帮助用户实现自主开发软件与PanEngine API的集成以获得即时的热力学输入