

CompuTherm 有限责任公司

1996年, CompuTherm 有限责任公司从威斯康星大学麦迪逊分校独立出来而成立, 是 CALPHAD 建模领域的领跑者之一。目前, 公司产品已在全球 ICME 从业人员和高校师生中得到广泛使用。

CompuTherm 公司的产品包括 Pandat™ 软件和用于各种合金体系的模型参数数据库。Pandat™ 是一款模块化设计的软件包。该软件不仅适用于计算热力学和相平衡, 还可应用于模拟整个材料加工过程, 从凝固到均匀化热处理和时效析出热处理。模型参数数据库包括热力学数据库, 迁移率数据库, 摩尔体积数据库和其他热物性数据库。结合 Pandat™ 软件和这些数据库, 便可以设计开发先进的材料。

CompuTherm 仿真工具可以应用于多种合金体系, 包括但不限于 Al 基, Co 基, Cu 基, Fe 基, Mg 基, Mo 基, Nb 基, Ni 基, Ti 基, TiAl 基合金以及高熵合金。

CompuTherm 还针对特定的应用开发量身定制的软件和数据库, 为材料行业提供咨询服务, 并与其他机构合作开展具有挑战性的项目。

软件 • 数据库 • 咨询服务



CompuTherm LLC

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

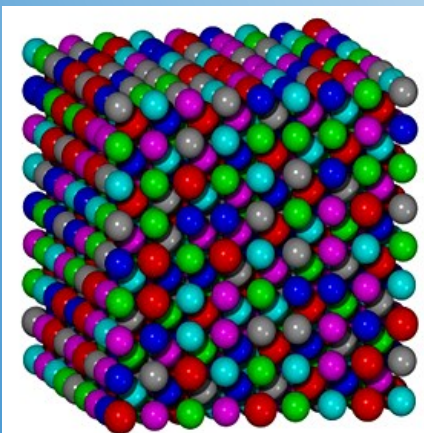
Phone: 1-608-203-8843
Fax: 1-608-203-8045

E-mail: info@computherm.com
Web: www.computherm.com



高熵合金
数据库与应用

PanHEA



2020

高熵合金数据库

高熵合金数据库 (PanHEA) — 包含多元第三过渡族金属高熵合金 (HEA) 的热力学数据库 (TH), 迁移率数据库 (MB) 和摩尔体积数据库 (MV)。

- ◆ 热力学数据库 (PanHEA_TH) 包含 15 个组元, 434 个相, 已对 105 个二元体系中的 102 个和 210 个三元系进行了全浓度范围的严格评估。
- ◆ 迁移率数据库 (PanHEA_MB) 与热力学数据库 (PanHEA_TH) 兼容, 包括优化的 Liquid, Bcc, Fcc 和 Hcp 固溶相的迁移率模型参数。适用于模拟多元高熵合金的扩散控制现象。
- ◆ 摩尔体积数据库 (PanHEA_MV) 与热力学数据库 (PanHEA_TH) 结合使用, 涵盖了热力学数据库中评估的所有 434 个相, 以模拟高熵合金的热物性, 如密度和热膨胀系数。

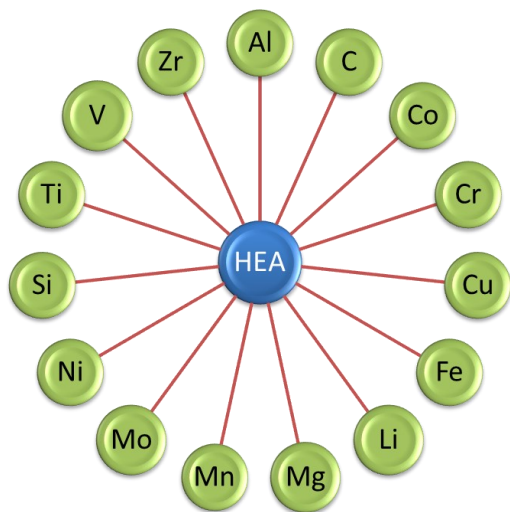


图 1: PanHEA 数据库中的元素

应用示例

下面是一些使用 PanHEA 数据库的计算示例。

图 2 和图 3 所示为利用热力学数据库 (PanHEA_TH) 计算的平衡相图和性质图。图 2 为 $Al_xCoCrFeNi$ 体系的垂直截面, 表明 Al 使 Fcc 相稳定, 但稳定了 Bcc 和 B2 相。根据计算出的糊状区 (液相+固相) 中的相可以预测合金的铸态组织, 见图 2 的顶部。图 3 为 $Al_{0.3}CoCrFeNi$ 合金中相变与温度的关系。

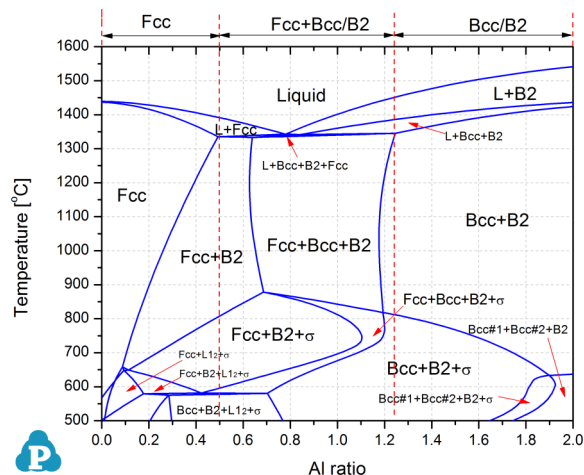


图 2: $Al_xCoCrFeNi$ 在 $x = 0\sim 2$ 范围内的垂直截面

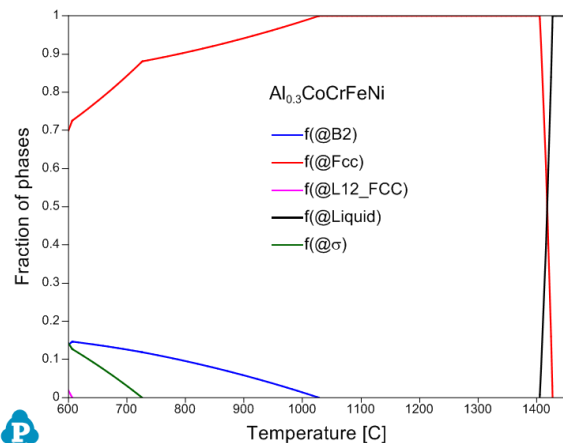


图 3: $Al_{0.3}CoCrFeNi$ 合金的平衡计算

图 4 所示为利用热力学数据库和迁移率数据库 (PanHEA_TH+MB), 计算了两种高熵合金组成的扩散偶在等温退火时的溶质浓度分布并与实验值对比。

图 5 所示为利用热力学数据库和摩尔体积数据库 (PanHEA_TH+MV), 计算了 $CoCrFeNi$ 合金的热膨胀系数与实验值的对比。

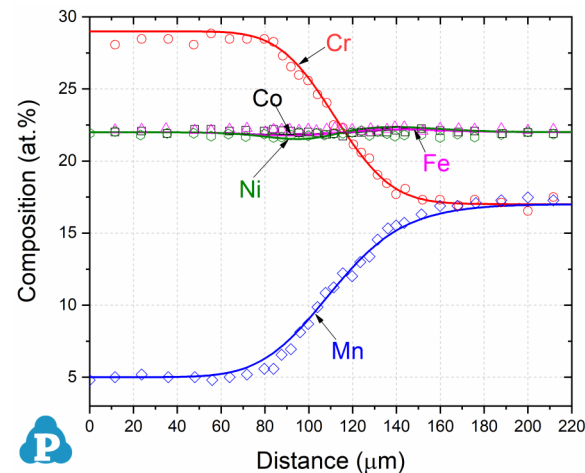


图 4: Co-29Cr-22Fe-5Mn-22Ni 和 Co-17Cr-22Fe-17Mn-22Ni 扩散偶在 1000°C 退火 100 小时的浓度分布

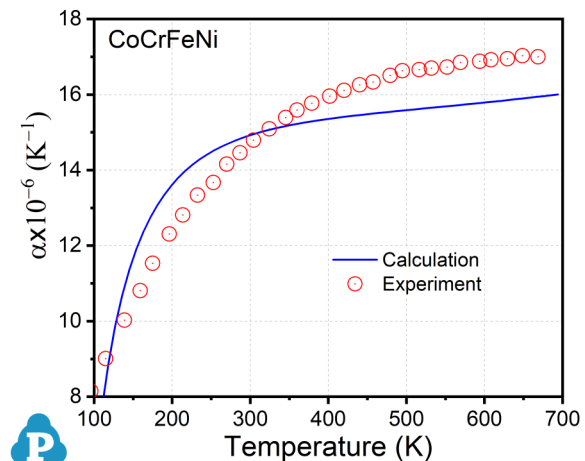


图 5: $CoCrFeNi$ 合金的线性热膨胀系数