

## 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](mailto:info@computherm.com)  
Web: [www.computherm.com](http://www.computherm.com)



## 镁基合金 数据库与应用

## PanMagnesium



Magnesium  
24.3050

2020

# 镁基合金数据库

镁基合金数据库 (PanMagnesium) — 包含多元镁合金的热力学数据库 (TH), 迁移率数据库 (MB) 和摩尔体积数据库 (MV)。

- ◆ 热力学数据库 (PanMg\_TH) 包含 27 个组元, 574 个相和 211 个全浓度范围评估的二元、三元和四元体系。用于描述铸造和变形镁合金的热力学性质和相平衡。
- ◆ 迁移率数据库 (PanMg\_MB) 包括优化的 Liquid, Bcc, Fcc 和 Hcp 固溶相的迁移率模型参数。与 PanMg\_TH 兼容, 用于模拟多元镁合金的扩散控制现象。
- ◆ 摩尔体积数据库 (PanMg\_MV) 涵盖了 PanMg\_TH 中评估的所有 574 个相, 与 PanMg\_TH 结合使用, 模拟镁合金的热物性, 如密度和热膨胀系数。

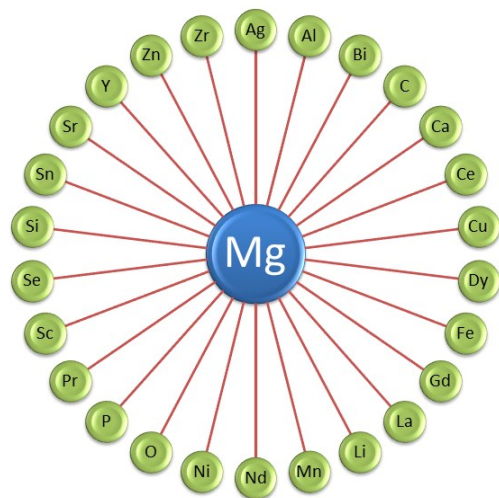


图 1: PanMagnesium 数据库中的元素

## 应用示例

下面是一些使用 PanMagnesium 数据库的计算示例。

图 2 和图 3 所示为利用热力学数据库 (PanMg\_TH) 计算的镁合金三元相图。图 2 是 Mg-Al-Sr 三元系的液相投影图, 图中所示的三种 Mg-Al-Sr 合金的 Scheil 模型凝固路径可以用来预测这些合金的铸造组织。

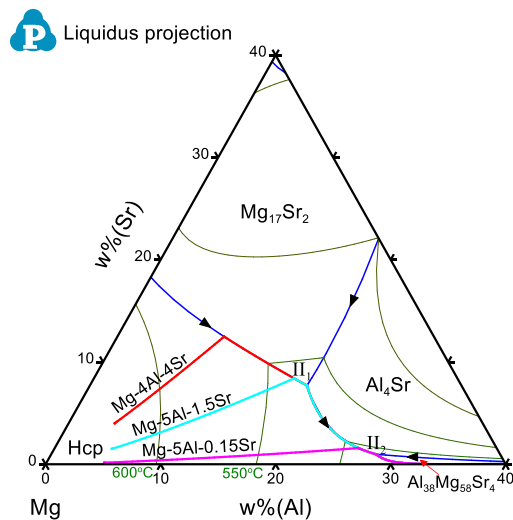


图 2: Mg-Al-Sr 三元体系的液相投影图与 Scheil 模型模拟的三个 Mg-Al-Sr 合金的凝固路径

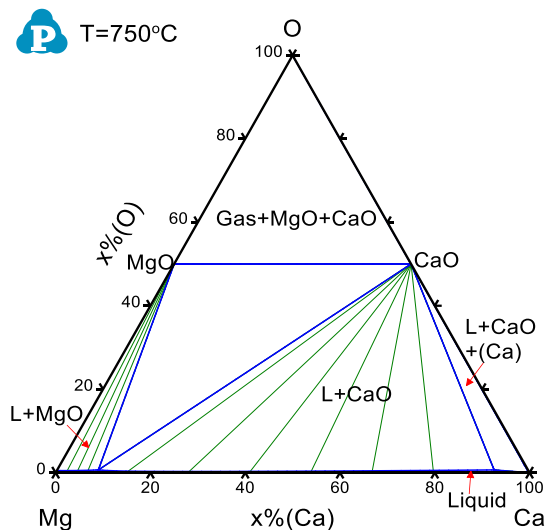


图 3: Mg-Ca-O 体系的等温截面

图 3 所示为 Mg-Ca-O 体系的等温截面, 该截面已被原位同步加速器辐射衍射结果所验证。

图 4 所示为利用热力学数据库和迁移率数据库 (PanMg\_TH+MB), 计算镁合金扩散偶在等温退火后合金中溶质浓度的分布并于实验值对比。

图 5 所示为利用热力学数据库和摩尔体积数据库 (PanMg\_TH+MV), 比较了 Mg-Li 合金中 Fcc, Bcc 和 Hcp 相的摩尔体积的计算值和测量值。

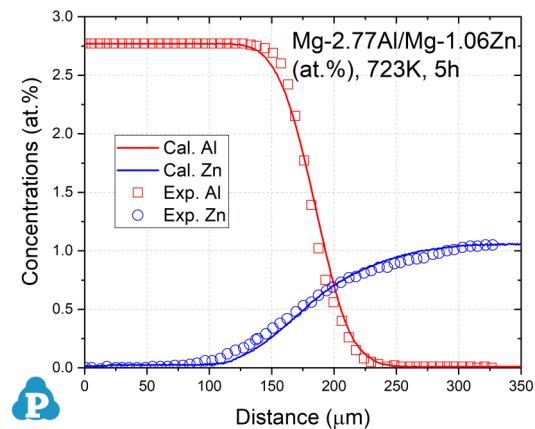


图 4: Mg-2.77Al/Mg-1.06Zn (at%) 扩散偶在 723K 下退火 5 小时的浓度分布。

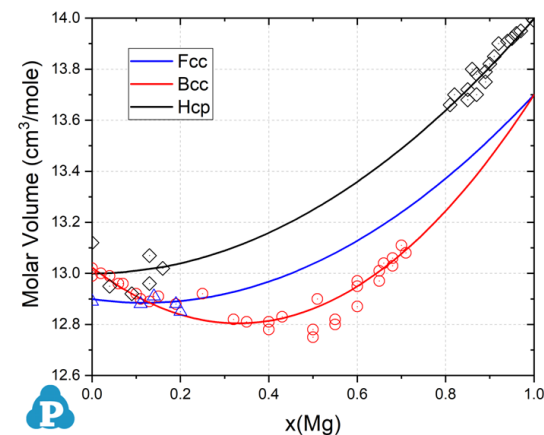


图 5: Mg-Li 合金中 Fcc, Bcc 和 Hcp 相的摩尔体积的计算值和测量值