

CompuTherm 有限责任公司

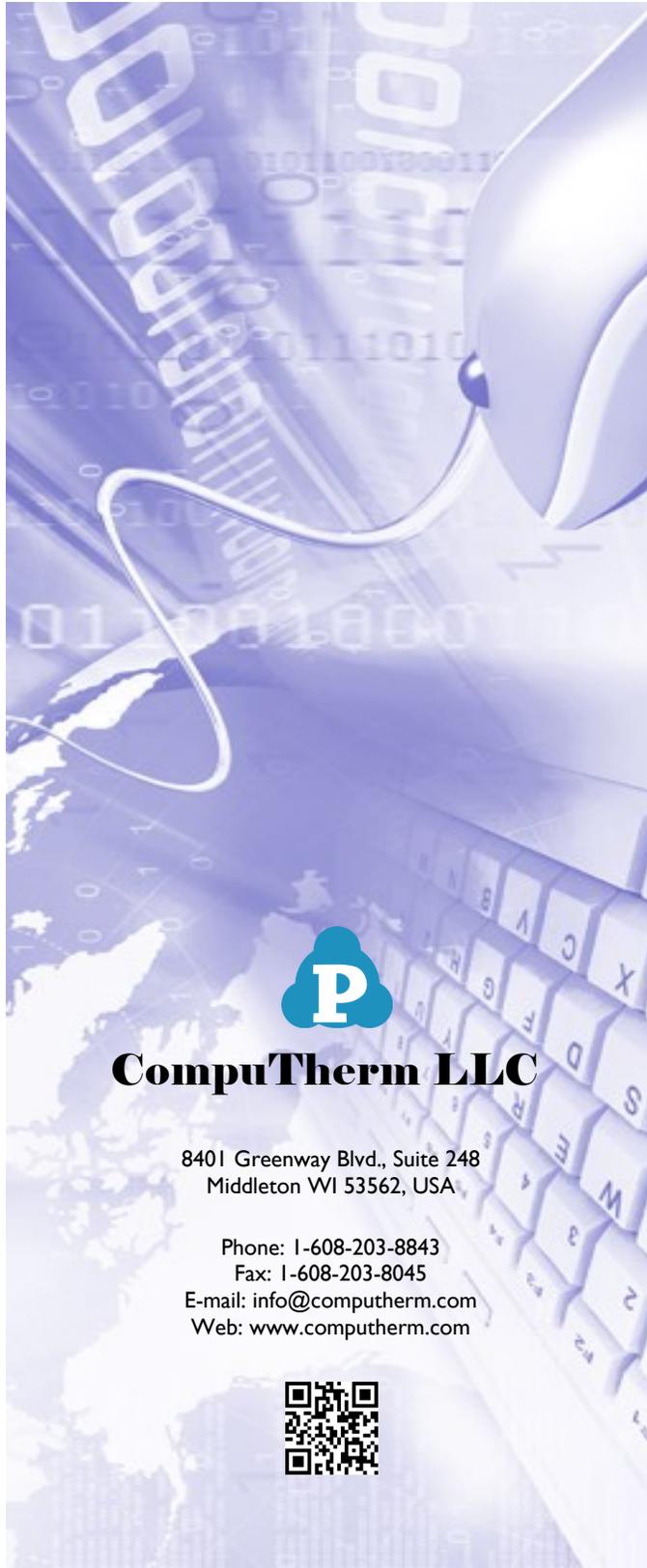
1996年, CompuTherm 有限责任公司从威斯康星大学麦迪逊分校独立出来而成立, 是 CALPHAD 建模领域的领跑者之一。目前, 公司产品已在全球 ICME 从业人员和高校师生中得到广泛使用。

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



铌基合金 数据库与应用

PanNiobium

41

Nb

2
8
18
12
1

Niobium
92.90638

2020

铌基合金数据库

铌基合金数据库 (PanNiobium) — 包含多元铌基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 (PanNb_TH) 包含 13 个组元, 131 个相和 93 个全浓度范围评估的二元和三元体系。该数据库已通过许多耐火合金验证。
- ◆ 迁移率数据库 (PanNb_MB) 包括优化的 Liquid, Bcc, Fcc 和 Hcp 固溶相的迁移率模型参数。与 PanNb_TH 兼容, 适用于模拟多元铌合金的扩散控制现象。
- ◆ 摩尔体积数据库 (PanNb_MV) 涵盖了热力学数据库 (PanNb_TH) 中评估的所有 131 个相, 与 PanNb_TH 结合使用, 以模拟 Nb 基合金的热物性, 如密度, 热膨胀和凝固收缩率。

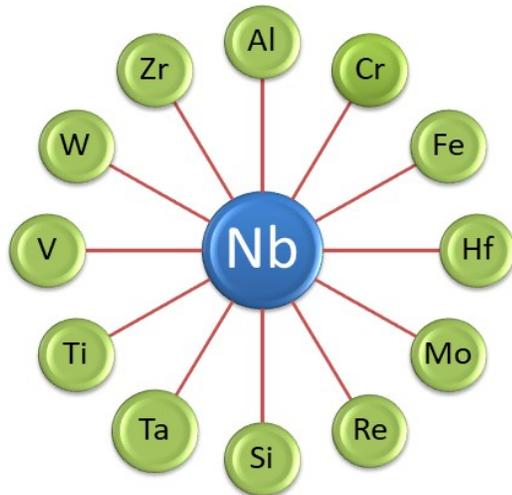


图 1: PanNiobium 数据库中的元素

应用示例

下面是一些使用 PanNiobium 数据库的计算示例。

图 2 和图 3 所示为利用热力学数据库 (PanCo_TH) 的计算结果与实验值对比。图 2 (a) 为 Nb-22Ti-2Hf-4Cr-3Al-16Si 六元合金的模拟凝固路径, 初生相为 Nb₅Si₃, 与实验观察到的显微组织 (图 2 (b)) 一致。

图 3 为 Nb-Ti-Si 体系的液相面投影图, 计算的凝固初生相与图中数据点实验观察的显微组织结果一致。

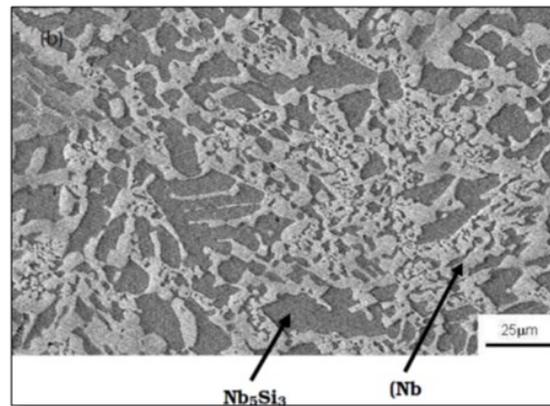
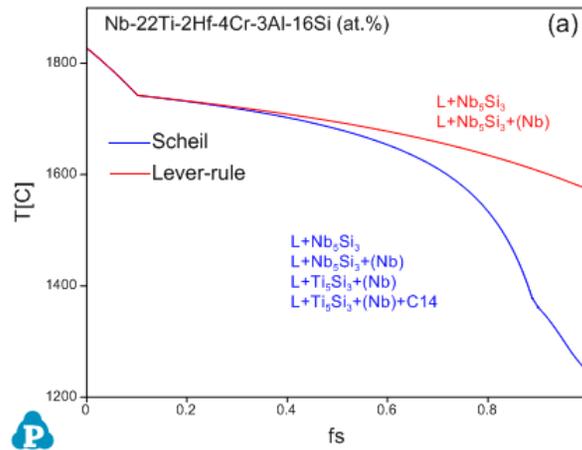


图 2: (a) 使用 Scheil 和 lever-rule 模型计算的 Nb-22Ti-2Hf-4Cr-3Al-16Si 合金的凝固路径; (b) 实验观察的显微组织

将热力学数据库与迁移率数据库组合 (PanNb_TH+MB), 可以计算合金元素的迁移率和扩散率, 并模拟扩散控制现象。

将热力学数据库与摩尔体积数据库组合 (PanNb_TH+MV), 可以计算铌合金的摩尔体积, 密度, 热膨胀和其他特性。图 4 比较了 Nb-Ti Bcc 合金摩尔体积的计算值和测量值。

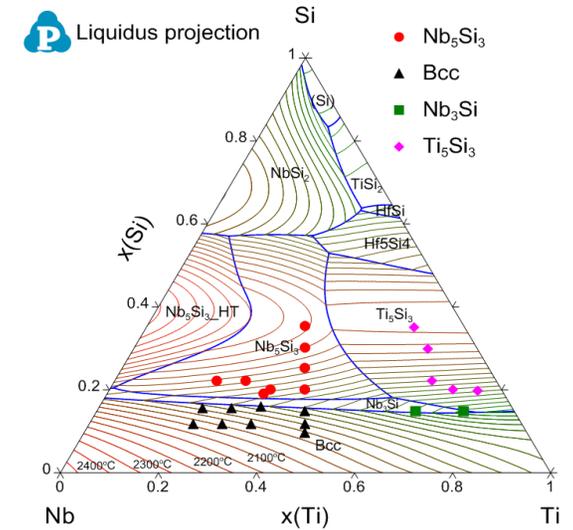


图 3: Nb-Ti-Si 的液相面投影图与实验数据

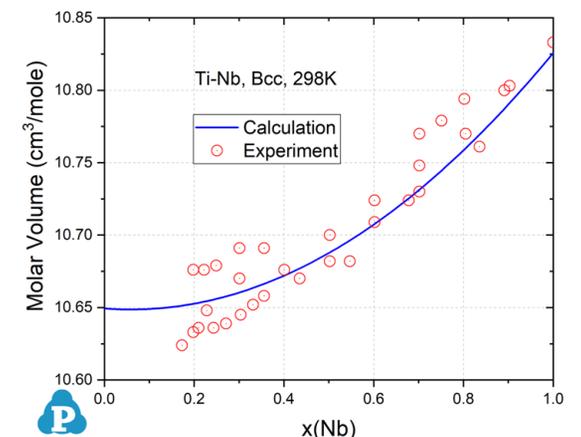


图 4: Nb-Ti Bcc 二元合金在 298K 的摩尔体积