

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



钛基合金
数据库与应用

PanTitanium

22	2
	8
	10
	2
Ti	
Titanium	
47.867	

2020

钛基合金数据库

钛基合金数据库 (PanTitanium) — 包含多元钛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 (PanTi_TH) 包括 20 个组元, 320 个相和 147 个全浓度范围评估的二元体系。该数据库已经过许多 Ti 基合金验证。
- ◆ 迁移率数据库 (PanTi_MB) 与 PanTi_TH 兼容, 包括优化的 Liquid, Bcc, Fcc 和 Hcp 固溶相的迁移率模型参数。用于模拟多组分钛合金的扩散控制现象
- ◆ 摩尔体积数据库 (PanTi_MV) 与 PanTi_TH 结合使用, 涵盖了 PanTi_TH 中评估的所有 320 个相, 用于模拟 Ti 基合金的热物性, 如密度, 热膨胀系数和凝固收缩率。

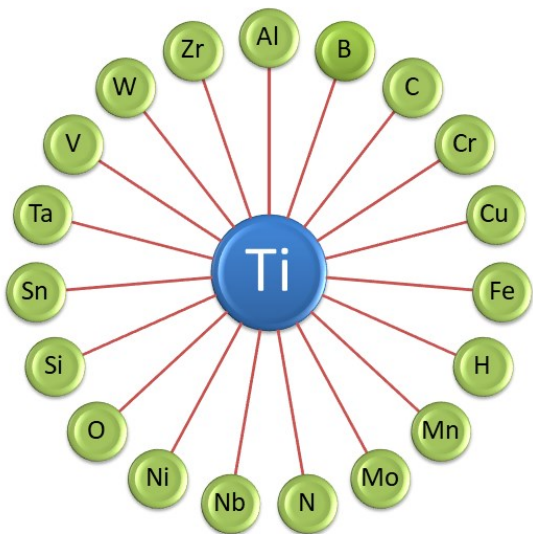


图1: PanTitanium数据库中的元素

应用示例

β 转变是 α 从 β 开始形成的温度, 是选择常规 α - β 型钛合金加工条件 (例如热处理工艺) 时的重要参考数据。已经用 PanTi-TH 数据库为大量的 Ti64 和其他钛合金计算了该温度。图2所示为超过 150 个 Ti64 样品的预测和实测的 β 转变温度之间的比较, 吻合良好。图3所示为计算 Ti64 合金的 β 相趋近曲线与实验数据对比。

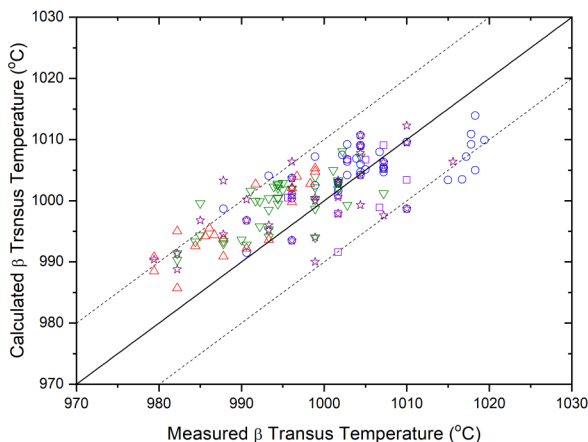


图2: 150 多个 Ti64 样品的预测和实测的 β 转变温度之间的比较

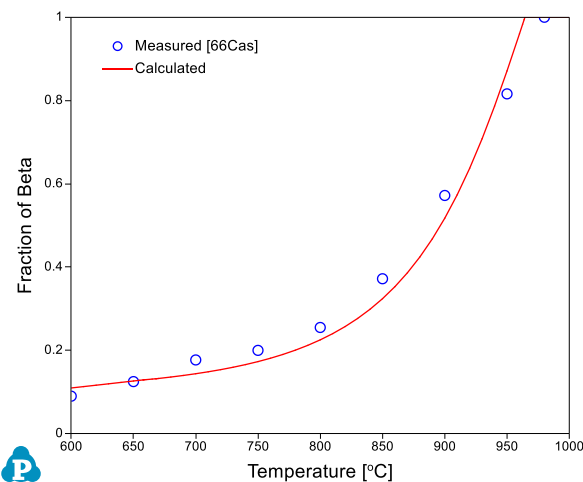


图3: 计算的 Ti64 合金的 β 趋近曲线

将热力学数据库与迁移率数据库组合 (PanTi_TH+MB), 可以模拟钛基合金的扩散控制相变现象。图4为 Ti-5.9Al/Ti-4.8Cr (at%) 扩散偶在 1473K 退火 18 小时模拟。

将热力学数据库与摩尔体积数据库组合 (PanTi_TH+MV), 可以计算摩尔体积, 热膨胀系数等热物性。图5比较了 Ti-V 合金中 Bcc 和 Hcp 的摩尔体积。

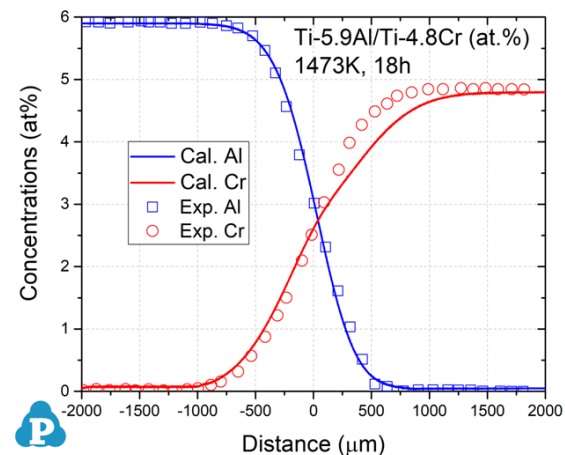


图4: Ti-5.9Al/Ti-4.8Cr (at%) 扩散偶在 1473K 退火 18 小时成分变化图

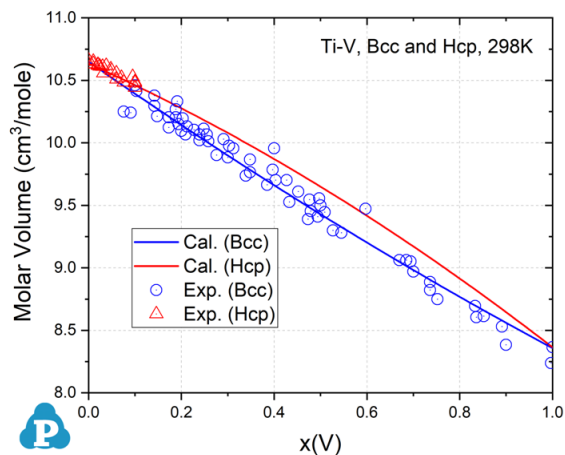


图5: Ti-V 合金中 Bcc 和 Hcp 在 298K 的摩尔体积