

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

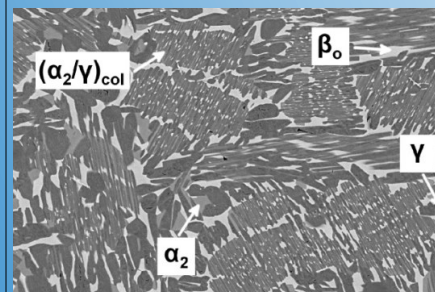
Phone: 1-608-203-8843
Fax: 1-608-203-8045

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



钛铝合金 数据库与应用

PanTiAl



2020

钛铝基合金数据库

钛铝合金数据库 (PanTiAl) — 包含多元 TiAl 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 (PanTiAl_TH) 包含 16 个组元, 184 个相和 98 个全浓度范围评估的二元和三元体系。该数据库已被大量 TiAl 合金验证。
- ◆ 迁移率数据库 (PanTiAl_MB) 与 PanTiAl_TH 兼容, 包括优化的 Liquid, Bcc, Fcc 和 Hcp 固溶相的迁移率模型参数。适用于模拟多组分 TiAl 合金的扩散控制现象。
- ◆ 摩尔体积数据库 (PanTiAl_MV) 与热力学数据库 (PanTiAl_TH) 结合使用, 涵盖了 PanTiAl_TH 中评估的所有 184 个相, 模拟 TiAl 合金的热物性, 如密度, 热膨胀和凝固收缩率。

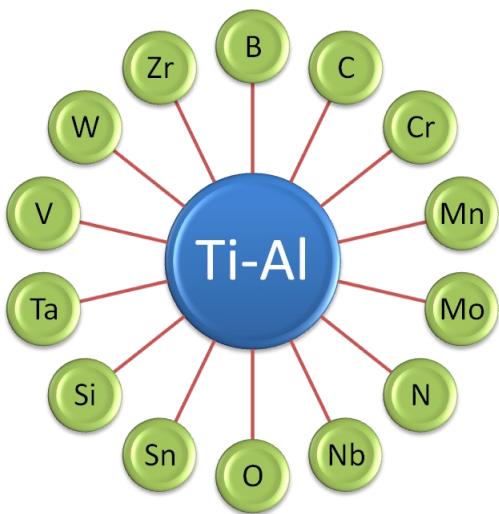


图 1: PanTiAl 数据库中的元素

应用示例

PanTiAl 数据库关注于 Al 含量高于 50at% 的成分范围, Ti-Al 二元以及 Ti-Al-X (X 表示 Cr, Mn, Mo, Si, V, W) 三元的热力学描述。图 2 为 Ti-Al 二元计算相图。图 3 是计算的 Ti-Al-Nb 体系液相面投影图, 其中的符号表示实验确定的初晶相。

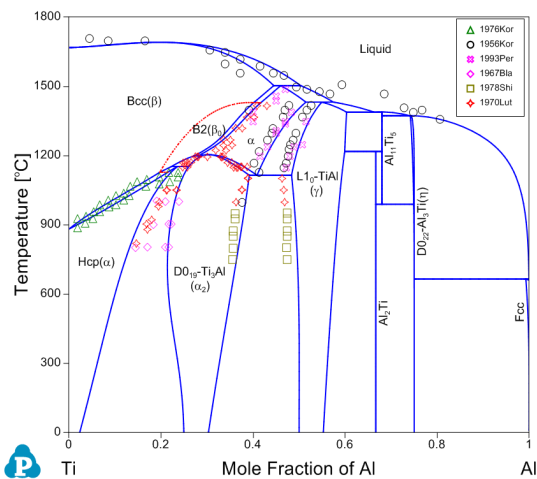


图 2: Ti-Al 二元计算相图

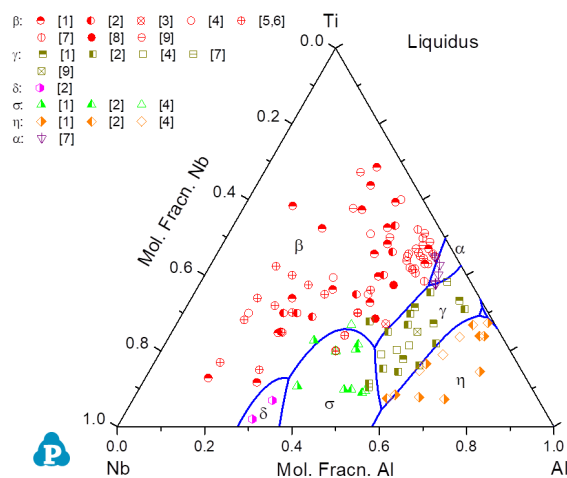


图 3: Ti-Al-Nb 体系的液相投影图与实验数据的对比

图 4 为计算的 TiAl 基 TNM 合金相分数随温度变化及其与实验数据的对比。图 5 比较了 22 种 TiAl 合金 α 转变温度的计算值和测量值的对比。

PanTiAl_TH 与 PanTiAl_MB 和 PanTiAl_MV 集成, 可以模拟多组元 TiAl 合金的扩散控制现象和热物性。

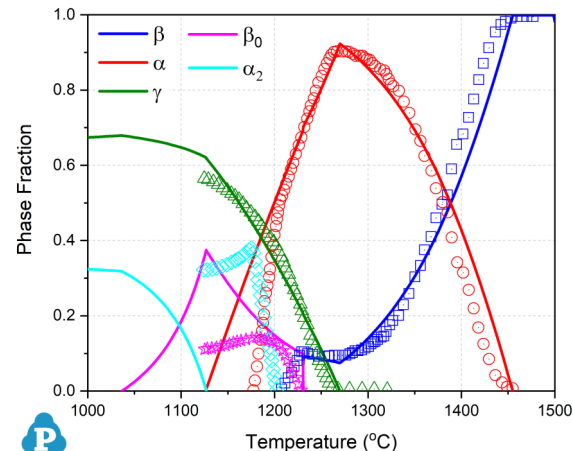


图 4: TNM 合金的相分数随温度的变化

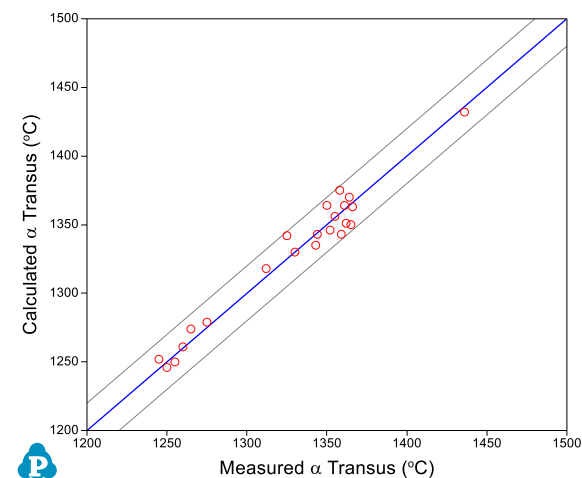


图 5: 22 种 TiAl 合金的 α 转变温度