

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

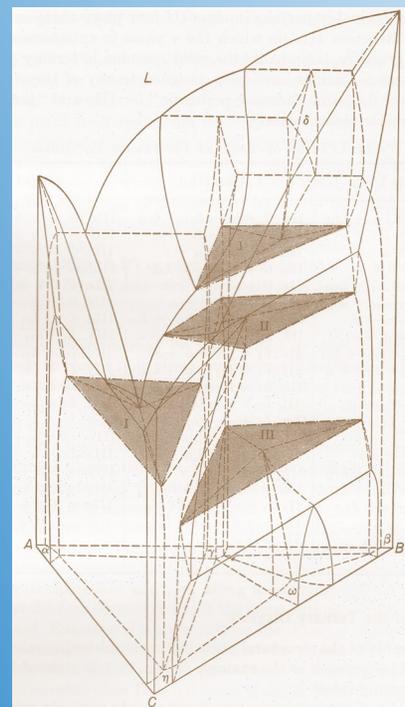
Phone: 1-608-203-8843
Fax: 1-608-203-8045

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



相图模块

PanPhaseDiagram



2020

PanPhaseDiagram

相图模块(PanPhaseDiagram)的特点

- ◆ 相图: 等温截面(见图 1), 垂直截面, 相投影, 稳定相图, 三维相图, 伪二元相截面, 压力相图
- ◆ 性质等值线图: 热力学性质(见图 2), 物理性质和用户自定义性质的等值线图
- ◆ 相平衡: 稳定和亚稳相平衡
- ◆ 相性质: 相的数量和组成, 相变温度
- ◆ 凝固: 用 Scheil 模型和平衡杠杆定律模拟合金凝固路径和热量演变
- ◆ 热化学性质: 吉布斯自由能(如图 3), 形成焓, 活度, 分压, 驱动力, 热力学因子, 吉布斯自由能的 Hessian 矩阵的特征值和特征向量
- ◆ 热物理性质: 摩尔体积, 密度, 表面张力和粘度
- ◆ 特殊性质: 磁转变, T_c 曲线, 零相分数线, 反应方程式, 调幅分解线和二级相变(如图 4)
- ◆ 高通量计算(HTC): 对模拟结果进行大量计算和大数据挖掘, 以确定满足用户要求的合金成分(如图 5)
- ◆ 迁移率和扩散度: 自扩散, 示踪扩散, 化学扩散和相扩散率
- ◆ 附加数据库: 将定制数据库(tdb)附加到原始数据库(tdb 或 pdb)。用户可修改/替换模型参数, 添加新参数或添加新相, 甚至定义其他属性(如图 6)

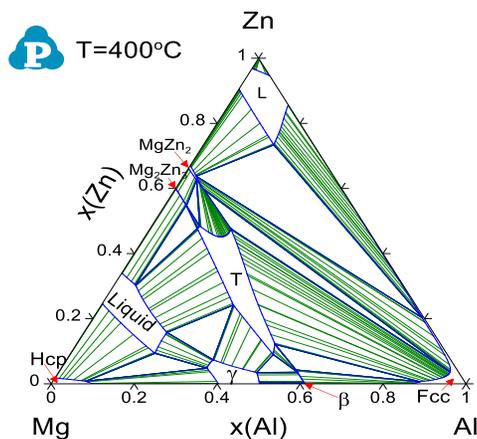


图 1: Mg-Al-Zn 三元系在 400°C 下的等温截面

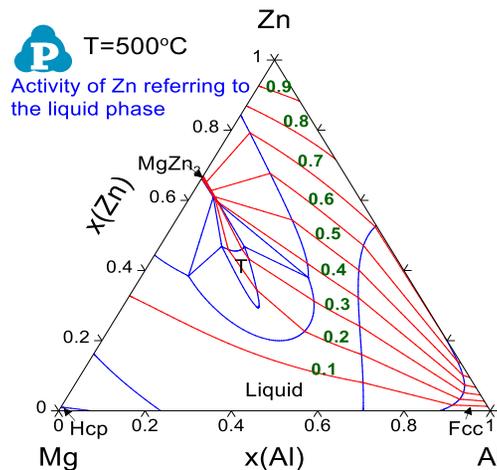


图 2: Mg-Al-Zn 体系在 500 °C 时以液相为参考态计算的 Zn 的活度等值线图

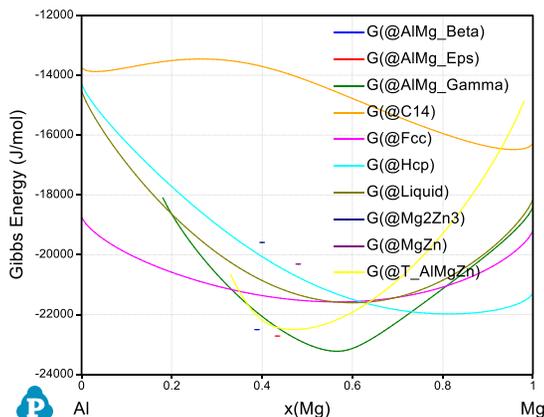


图 3: Al-Mg 二元体系在 300 °C 时每个相的吉布斯自由能

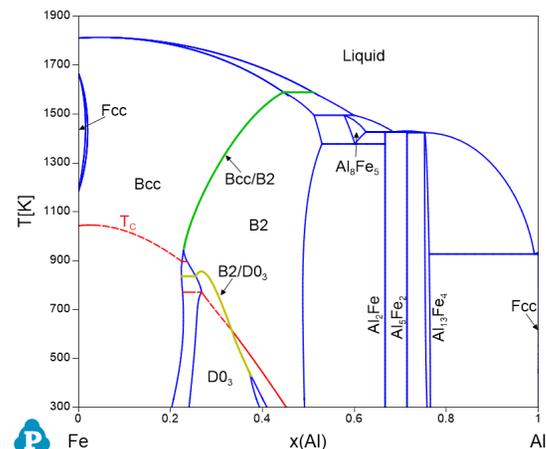


图 4: 具有 T_c 线和 Bcc/B2 和 B2/D0₃ 的二级相变线的 Fe-Al 二元相图

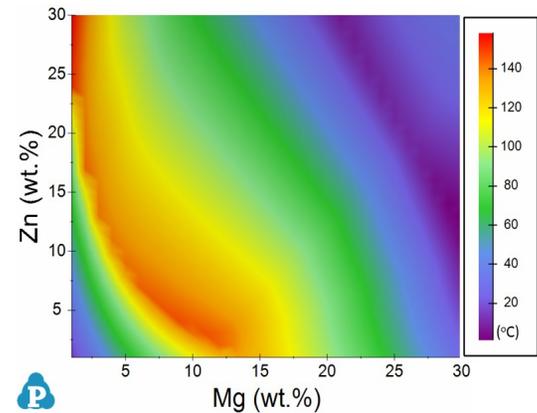


图 5: 计算的 Al-Mg-Zn 体系中凝固范围的彩图

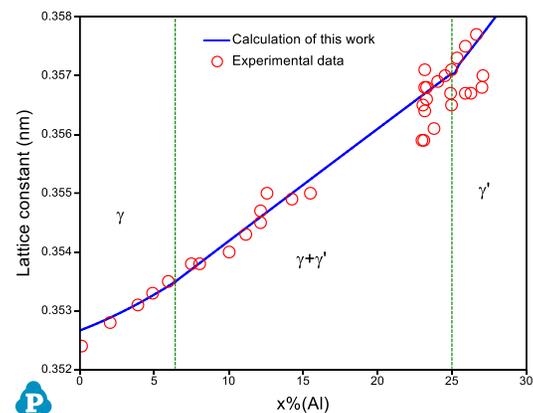


图 6: 计算的 Ni-Al 二元合金在室温下的晶格常数及其与实验数据的对比