

CompuTherm 有限责任公司

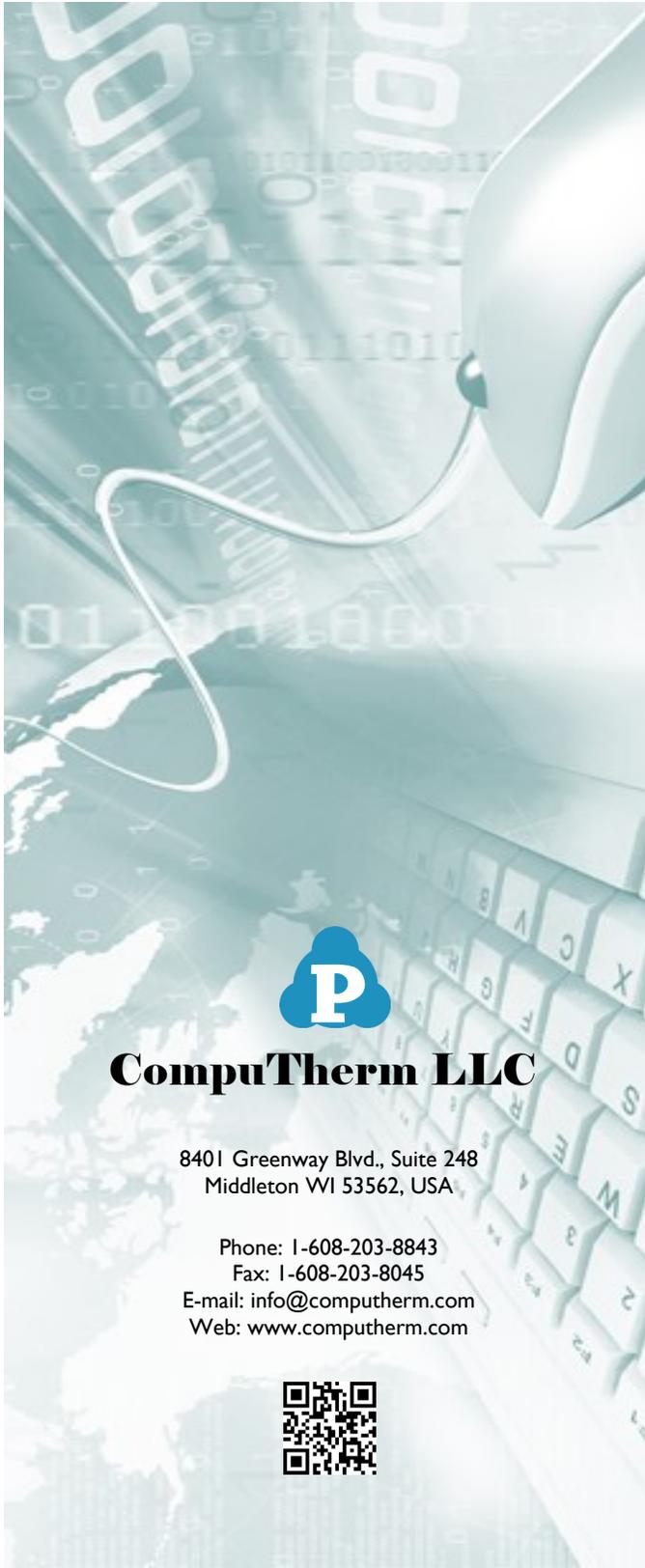
1996年, CompuTherm 有限责任公司从威斯康星大学麦迪逊分校独立出来而成立, 是 CALPHAD 建模领域的领跑者之一。目前, 公司产品已在全球 ICME 从业人员和高校师生中得到广泛使用。

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

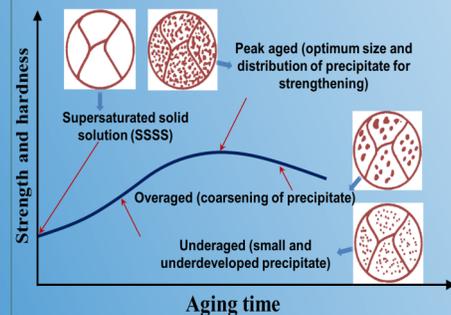
Phone: 1-608-203-8843
Fax: 1-608-203-8045

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



析出模块

PanPrecipitation



2020

PanPrecipitation

析出模块 (PanPrecipitation) — 用于热处理过程中析出相的形核与生长等动力学模拟，以及其对强度的影响。主要特点有：

- ◆ 析出相的形核，生长/溶解和粗化
- ◆ 析出相的平均粒径、粒径分布和数密度随时间的演变
- ◆ 析出相成分和体积分数随时间的演变
- ◆ 基于广义断裂键 (GBB) 方法的界面能估算
- ◆ 考虑晶界或位错形核的异质形核模型
- ◆ 与取向相关的界面能和各向异性失配应变能而引起的长径比的变化
- ◆ 考虑各种强化机理的铝合金和镍基合金的强度模型
- ◆ 两相或多相的同时析出

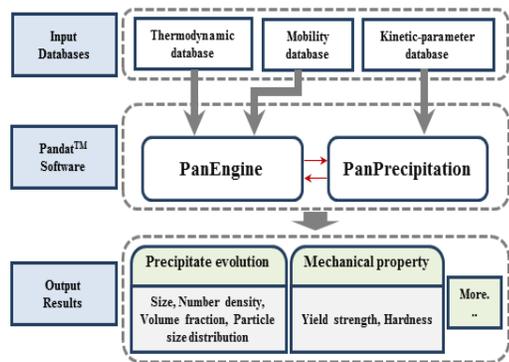


图 1：PanPrecipitation 模块的架构图

应用示例

图 2 所示为多相析出时异质形核的相分数模拟结果。图 3 所示为时效析出时对力学性能影响的模拟结果。

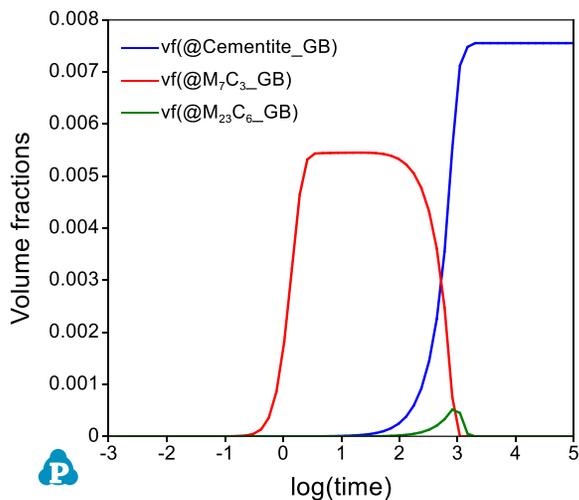


图 2：钢合金中碳化物析出的模拟结果

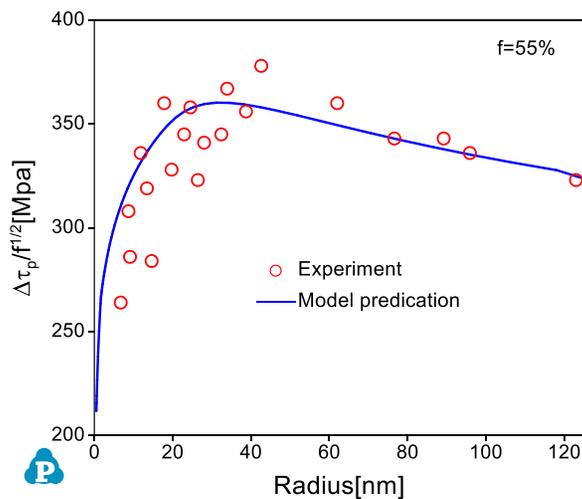


图 3：Nimonic 105 合金的临界分剪切应力

图 4 和 5 所示为 Ni718 合金中 γ' 和 γ'' 两相同时析出时的模拟结果。图 4 为等温时效时析出相粒径随时间的演变规律；图 5 为时效后 γ' 和 γ'' 的粒径分布。

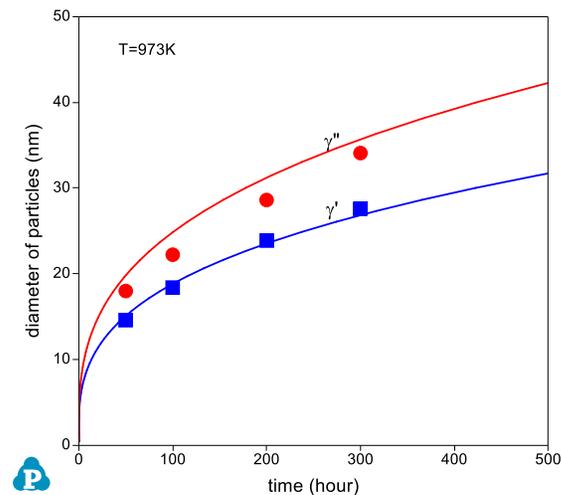


图 4：Ni718 在 973K 等温时效过程中 γ' 和 γ'' 的粒径的演变

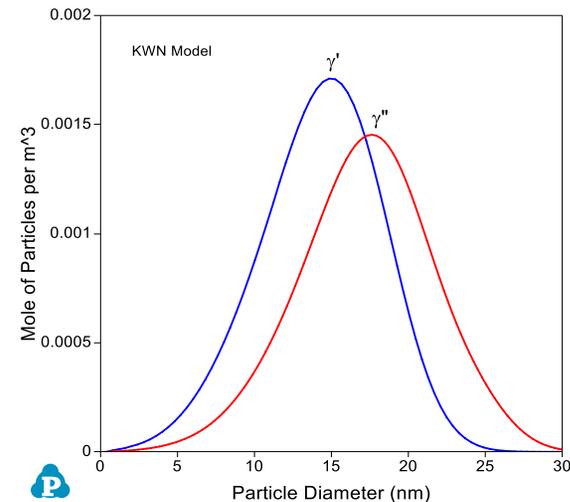


图 5：两步时效后 Ni718 中 γ' 和 γ'' 的粒径分布