

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

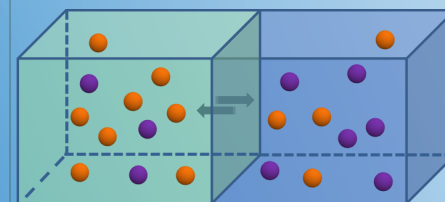
8401 Greenway Blvd., Suite 248
Middleton WI 53562, USA

Phone: 1-608-203-8843
Fax: 1-608-203-8045
Email: info@computherm.com
Web: www.computherm.com



扩散模块

PanDiffusion



2020

PanDiffusion

扩散模块 (PanDiffusion) 的特点

- ◆ 模拟各种以元素扩散为主的动力学过程，如扩散偶，颗粒溶解，渗碳，均质化热处理和扩散相变
- ◆ 通过 PanDataNet 与 PanEngine 集成，快速检索热力学和相平衡数据以及迁移率数据和化学势
- ◆ 成分分布，相体积分数和扩散偶的相组成随时间的演化
- ◆ 多阶段热历史，灵活的边界条件和几何条件
- ◆ 多粒子溶解的多胞模拟

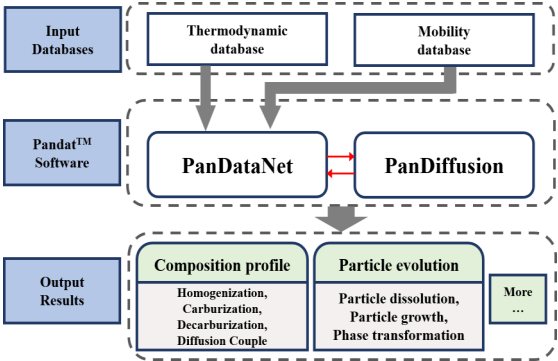


图1: PanDiffusion模块的架构图

应用示例

图 2 所示为颗粒固溶模拟，析出相颗粒在三个不同温度下的固溶情况。图 3 所示为典型的二元合金扩散偶模拟，Ni3Al/Ni 扩散偶在 1200°C 退火 43.2 小时的扩散模拟。

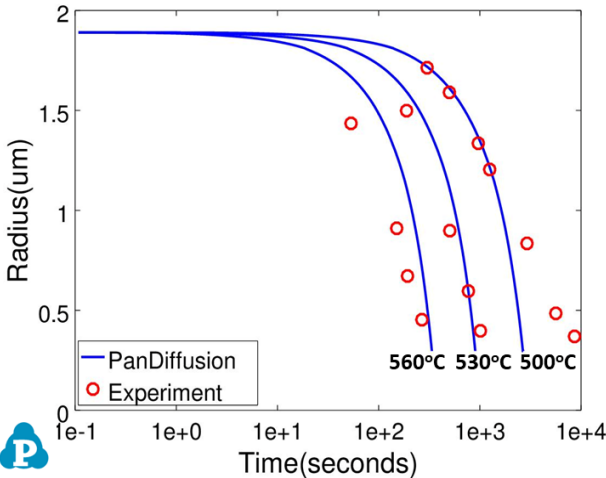


图2: 颗粒溶解模拟

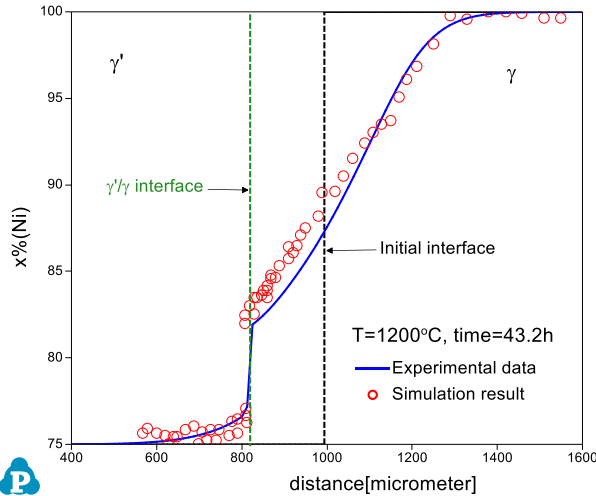


图3: 扩散过程中的界面移动

图 4 为典型多元合金扩散偶模拟，镍基高温合金 IN100 与 718 合金扩散偶模拟结果与实验结果吻合良好。

图 5 为典型三明治扩散偶的模拟结果与实验结果的对比，吻合良好。

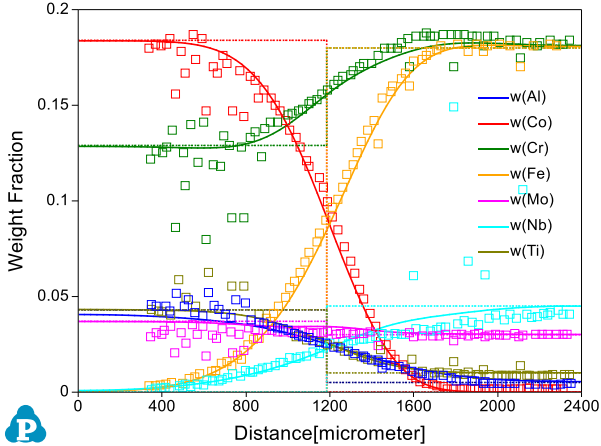


图 4: IN100 与 718 合金组成的扩散偶在 1150°C 保温 1000 小时后的模拟结果与实验数据对比

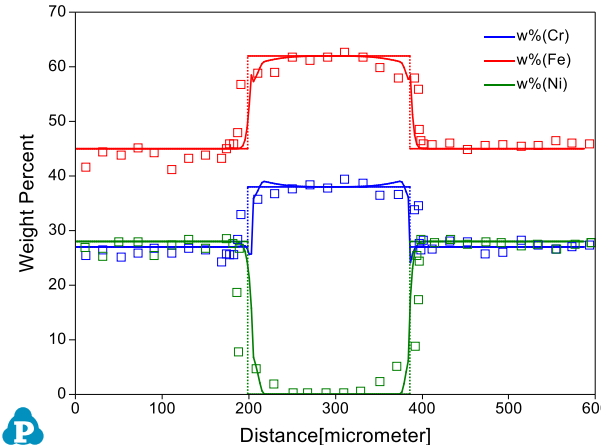


图 5: Cr-Fe-Ni 体系的三明治扩散偶在 1100 °C 保温 1 小时的模拟结果与实验数据对比