

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



铜基合金
数据库

MDT
Copper

29

2
8
18
1

Cu

Copper
63.546

2020

MDT 铜合金数据库

铜合金数据库 (MDTCu) — 包含多元铜基合金的热力学数据库(TH), 迁移率数据库(MB)和摩尔体积(MV)数据库。

- ◆ 热力学数据库 (MDTCu_TH) 包含 19 个元素, 330 个相, 135 个全浓度范围评估的二元体系, 以及 50 个评估的三元体系。该数据库已由大量 Cu 合金验证。
- ◆ 迁移率数据库 (MDTCu_MB) 与 MDTCu_TH 兼容, 优化了 Liquid, Bcc, Fcc 和 Hcp 固溶相的迁移率模型参数, 适用于模拟多元 Cu 基合金的扩散控制现象。
- ◆ 摩尔体积数据库(MDTCu_MV)与 MDTCu_TH 结合使用, 涵盖了 MDTCu_TH 中评估的 330 个相, 用于模拟 Cu 基合金的热物性, 如密度, 热膨胀系数和凝固收缩率。

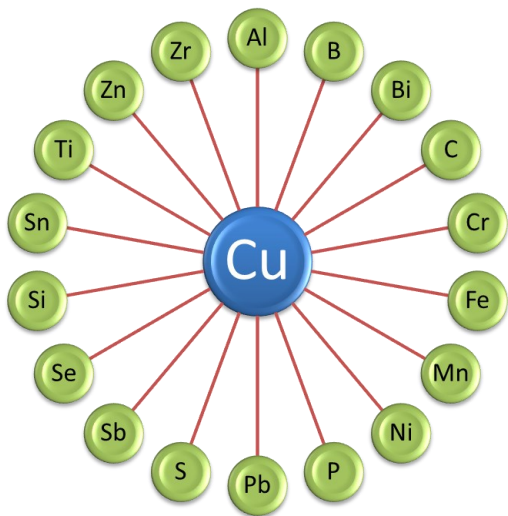


图1: Cu基合金数据库中的元素

应用示例

下面是一些 Cu 基合金数据库的计算示例。

图2所示为利用 MDTCu_TH 数据库计算的 Cu-Cr-Fe 体系的等温截面相图与实验结果吻合很好。

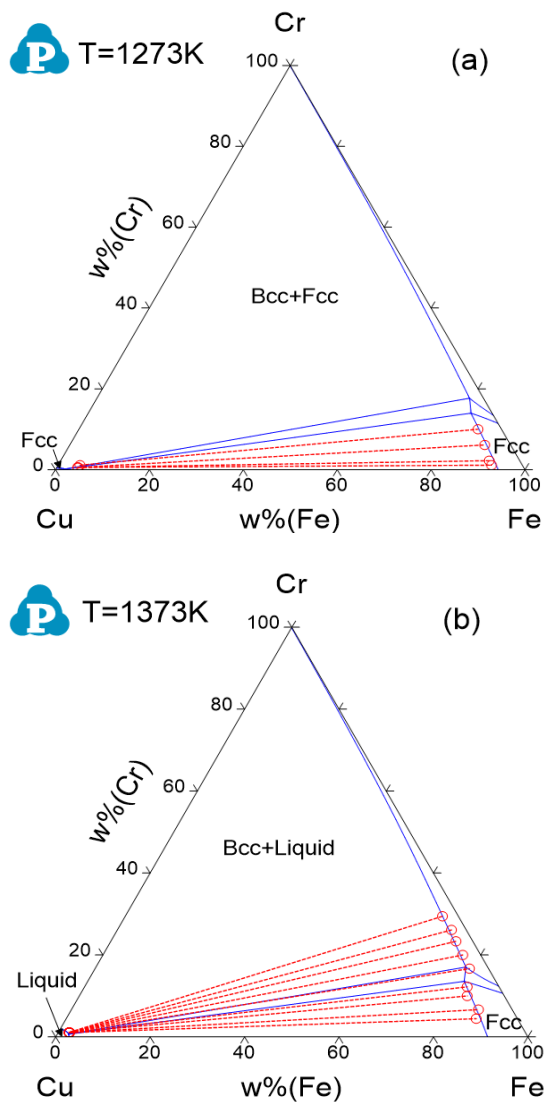


图2: 计算的 Cu-Cr-Fe 三元体系的等温截面与实验数据的对比: (a) 1273K; (b) 1373K

图3所示为使用热力学和迁移率的组合数据库 (MDTCu_TH+MB), 两种 Cu 合金扩散偶中的元素浓度分布与实验结果吻合良好。

图4所示为使用热力学和摩尔体积的组合数据库 (MDTCu_TH+MV) 计算的 Cu-xTi(at.%)液态合金在不同温度下的密度与实验数据的对比。

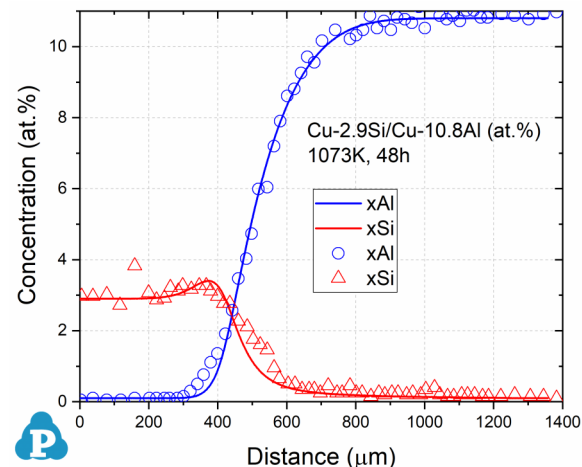


图3: 计算的 Cu-2.9Si/Cu-10.8Al (at.%) 扩散偶在 1073K 热处理 48 小时的浓度分布

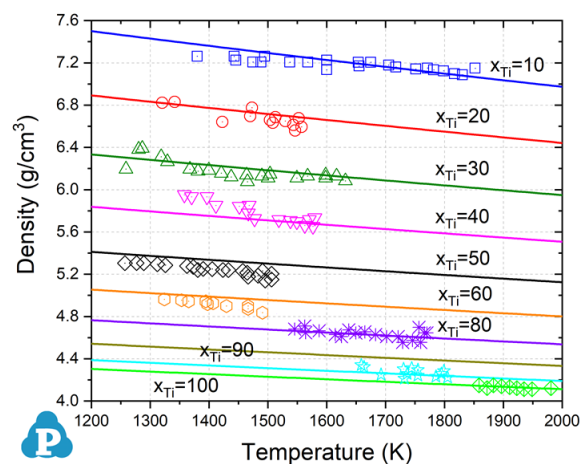


图4: Cu-Ti 液态合金密度与温度的函数