

PANDAT™ 2024

培训教程

扩散模块(PanDiffusion Module)



Copyright © 2000-2024 CompuTherm LLC


目 录

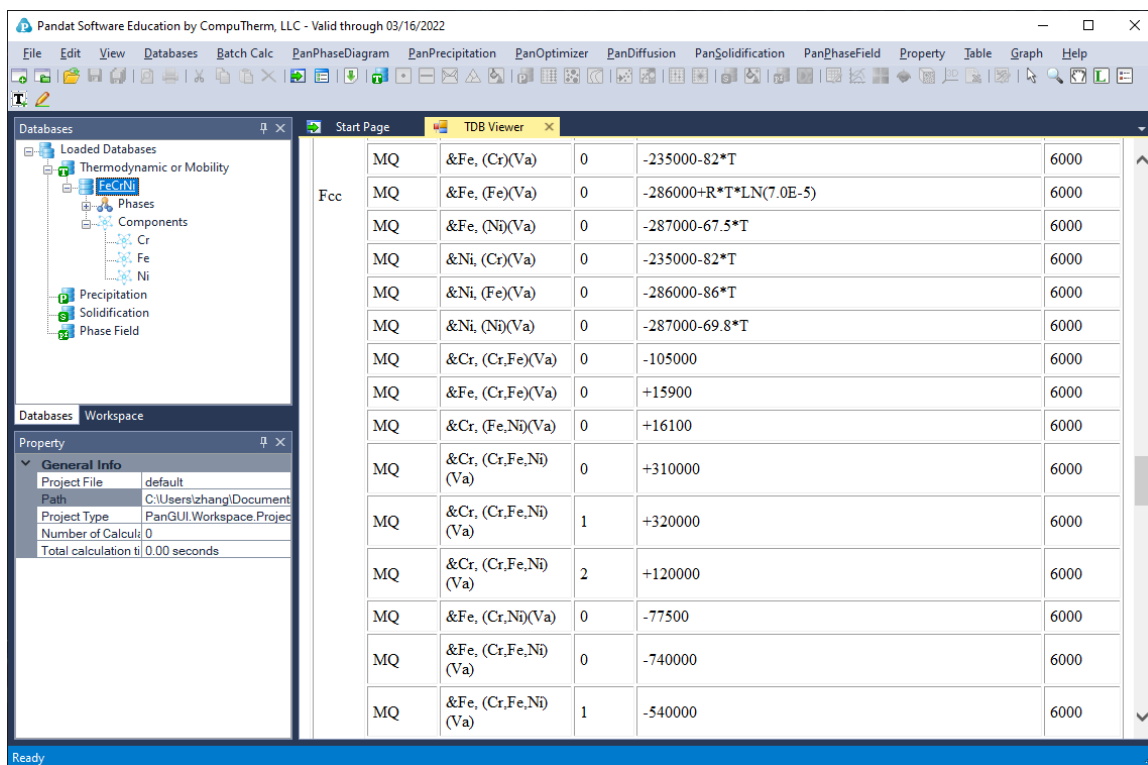
扩散模块	2
4.1 加载数据库并选择组元	2
4.2 扩散模拟教程.....	3
4.2.1 两端成分均匀的扩散偶模拟	3
4.2.2 单相合金的均匀化处理过程模拟	6
4.2.3 固定碳活度的管状渗碳模拟	8
4.2.4 单个颗粒的固溶模拟	10

扩散模块

4.1 加载数据库并选择组元

在进行扩散模拟前要先加载数据库，数据库中必须包括热力学参数和迁移率参数（PDB 或 TDB）。

- 单击开始界面中的 New Workspace 创建新的工作空间，或单击菜单（File → Add a New Project），在当前工作空间中添加新项目，选择 *PanDiffusion* 模块
- 单击工具栏图标 ，或使用菜单数据库 Database→Load TDB or PDB (Encrypted TDB) 加载包含有热力学参数和迁移率参数的组合数据库。商业数据库 PDB 文件文件名为：xxx_TH+MB.PDB 或 xxx_All.PDB；TDB 文件中应包含有表示迁移率参数的 MQ 值，如下图 *FeCrNi.tdb* 所示。



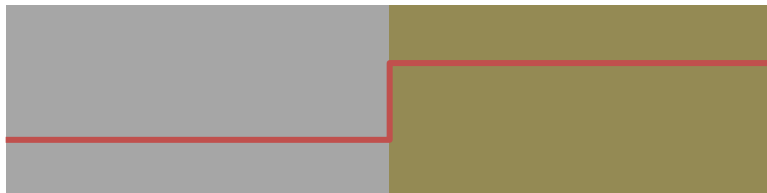
MQ	&Fe, (Cr)(Va)	0	-235000-82*T	6000
MQ	&Fe, (Fe)(Va)	0	-286000+R*T*LN(7.0E-5)	6000
MQ	&Fe, (Ni)(Va)	0	-287000-67.5*T	6000
MQ	&Ni, (Cr)(Va)	0	-235000-82*T	6000
MQ	&Ni, (Fe)(Va)	0	-286000-86*T	6000
MQ	&Ni, (Ni)(Va)	0	-287000-69.8*T	6000
MQ	&Cr, (Cr,Fe)(Va)	0	-105000	6000
MQ	&Fe, (Cr,Fe)(Va)	0	+15900	6000
MQ	&Cr, (Fe,Ni)(Va)	0	+16100	6000
MQ	&Cr, (Cr,Fe,Ni)(Va)	0	+310000	6000
MQ	&Cr, (Cr,Fe,Ni)(Va)	1	+320000	6000
MQ	&Cr, (Cr,Fe,Ni)(Va)	2	+120000	6000
MQ	&Fe, (Cr,Ni)(Va)	0	-77500	6000
MQ	&Fe, (Cr,Fe,Ni)(Va)	0	-740000	6000
MQ	&Fe, (Cr,Fe,Ni)(Va)	1	-540000	6000

4.2 扩散模拟教程

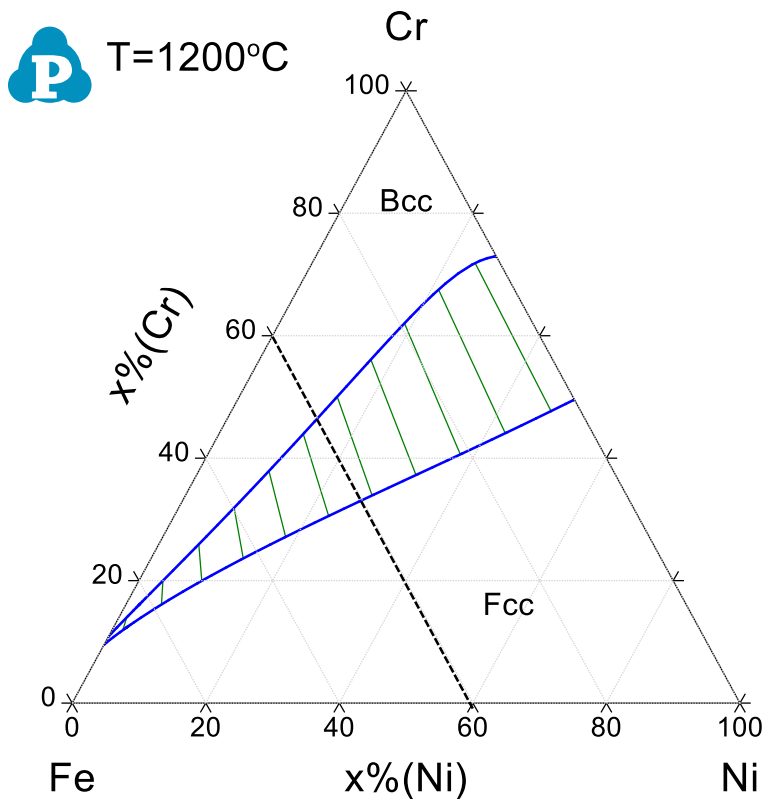
Pandat 软件的教育版和试用版只能进行三元体系以内的计算模拟，因此利用 Al-Cu 二元体系，Fe-Cr-Ni 和 Fe-Si-C 三元体系为例来作为扩散模块中扩散模拟的培训教程。



Pandat 软件的商业版本可以进行多组元体系的计算模拟。

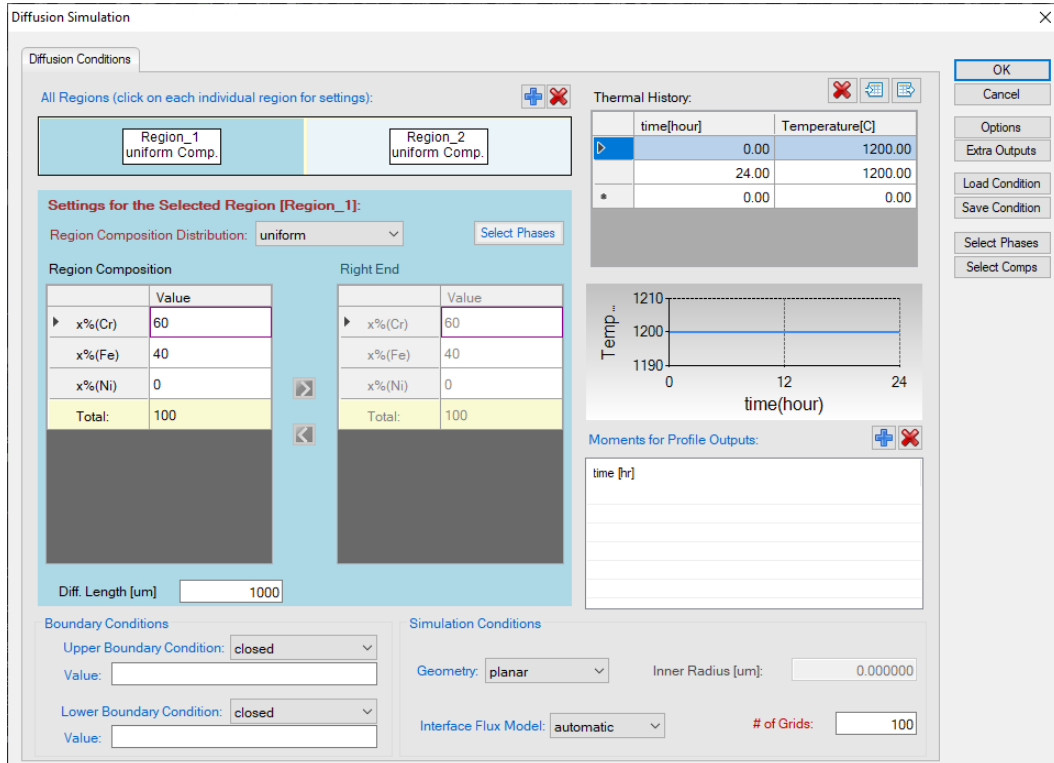
4.2.1 两端成分均匀的扩散偶模拟



在 1200°C 下热处理 24 小时后，Fe-60at.%Cr/Fe-60at.%Ni 扩散偶中的成分分布如何演变？



- 单击工具栏  按钮加载热力学和迁移率数据库(*FeCrNi.tdb*), 并选择全部三个组元 Cr, Fe, Ni;
- 从菜单中选择 *PanDiffusion*→*Diffusion Simulation* 或单击工具栏按钮 , 在弹出窗口(如下图所示)中设置扩散条件;



The screenshot shows the 'Diffusion Simulation' dialog box. The 'Diffusion Conditions' tab is active. At the top, there are two buttons for 'Region_1 uniform Comp.' and 'Region_2 uniform Comp.'. Below this, the 'Settings for the Selected Region [Region_1]' section shows 'Region Composition Distribution' set to 'uniform'. The 'Region Composition' table for Region_1 is as follows:

	Value
x%(Cr)	60
x%(Fe)	40
x%(Ni)	0
Total:	100

The 'Right End' table for Region_1 is also shown:

	Value
x%(Cr)	60
x%(Fe)	40
x%(Ni)	0
Total:	100

The 'Diff. Length [um]' is set to 1000. The 'Boundary Conditions' section shows 'Upper Boundary Condition' and 'Lower Boundary Condition' both set to 'closed'. The 'Simulation Conditions' section shows 'Geometry' set to 'planar', 'Inner Radius [um]' set to 0.000000, 'Interface Flux Model' set to 'automatic', and '# of Grids' set to 100. The 'Thermal History' section shows a table with time and temperature values:

time[hour]	Temperature[C]
0.00	1200.00
24.00	1200.00
0.00	0.00

A graph of Temperature vs. time is also shown, with temperature constant at 1200°C for 24 hours. The 'Moments for Profile Outputs' section is empty.

设置模拟条件为:

Region Composition Distribution: “Uniform”

Region Composition (Region_1): Fe-60Cr, 即 $x\%(\text{Fe}) = 40$; $x\%(\text{Cr}) = 60$

Region Composition (Region_2): Fe-60Ni, 即 $x\%(\text{Fe}) = 40$; $x\%(\text{Ni}) = 60$

Diff.Length(um) : 1000, 即扩散长度为 1000 μm (注意使用的长度单位)

Thermal History: 1200 °C, 24 hour (注意使用的温度和时间单位)

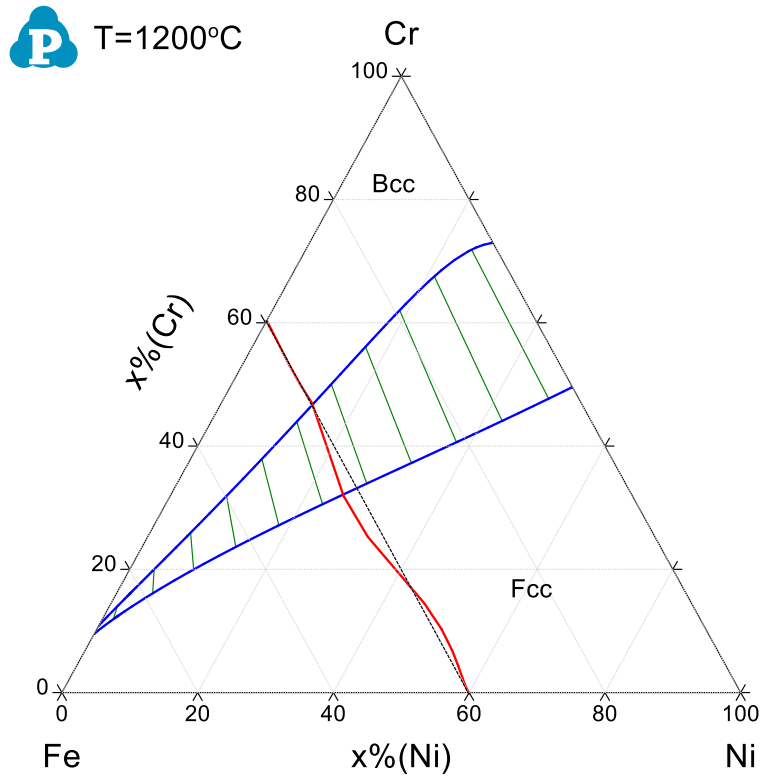
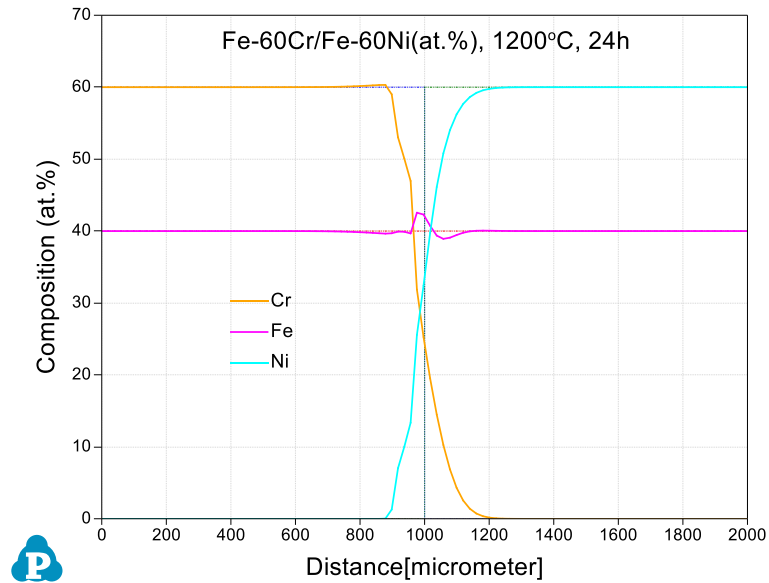
Upper Boundary Condition: closed

Lower Boundary Condition: closed

Geometry: planar;

Interface Flux Model: automatic; # of Grids: 100

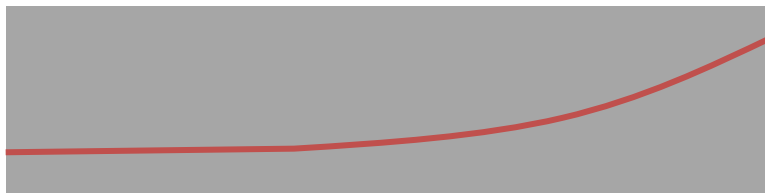
c. 设置好条件后，点击 OK，开始扩散模拟



[4.2.1 小结](#)

- 学习在恒定温度下对两端成分分布均匀的扩散偶进行扩散模拟

4.2.2 单相合金的均匀化处理过程模拟



Q. A. Fe-Cr-Ni 单相合金铸态显微组织在 1200°C 下均匀化处理需要多长时间?

- 单击工具栏 按钮加载热力学和迁移率数据库 (*FeCrNi.tdb*), 并选择全部三个组元 Cr, Fe, Ni;
- 从菜单中选择 *PanDiffusion*→*Diffusion Simulation* 或单击工具栏按钮 , 在弹出窗口中(如下图所示)设置扩散条件;

设置模拟条件为:

All Regions: Region_1; 点击 “All Regions” 旁边的 按钮删除 “Region_2” 或其它多余的区域, 只保留 “Region_1” ;

Region Composition Distribution: input_file; 单击 “Browse” 导入成分分布文件 (example_profile.dat);


Thermal History: 1200 °C, 200 hour

Upper Boundary Condition: closed

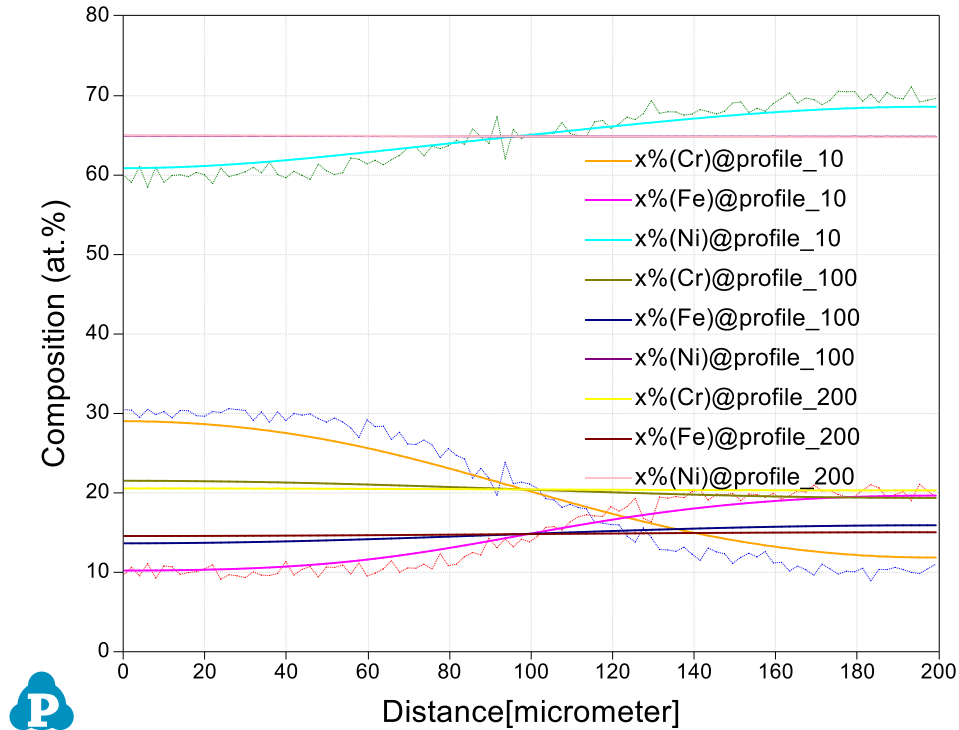
Lower Boundary Condition: closed

Geometry: planar;

Interface Flux Model: automatic; # of Grids: 100

Moment of Profile Outputs: 10hr, 100hr; 点击  按钮添加中间时刻的成分分布结果。

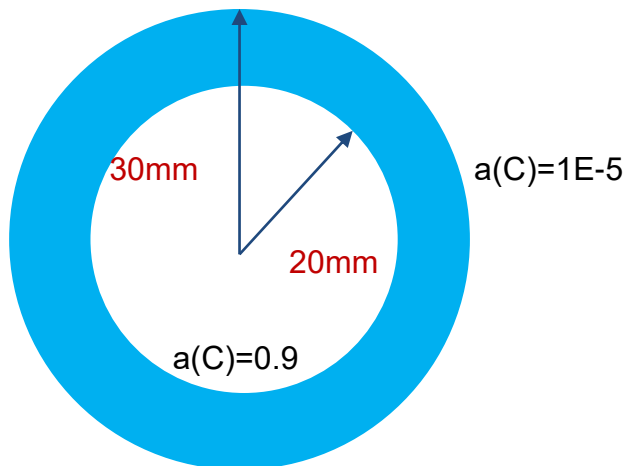
c. 设置好条件后, 点击 OK, 开始扩散模拟



4.2.2 小结

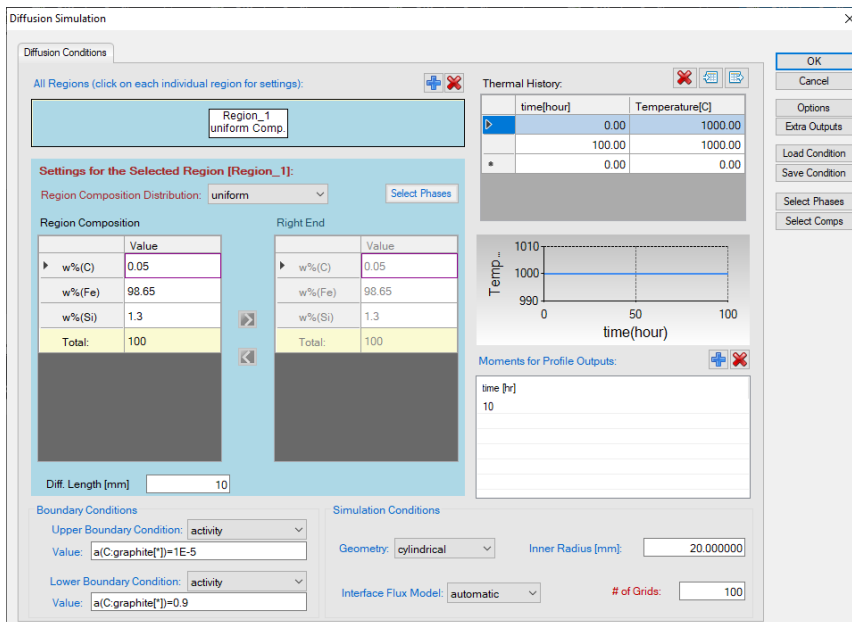
- 学习在恒定温度下对具有导入成分分布的单相结构扩散模拟。
- 学习添加/删除区域, 以及添加输出配置文件

4.2.3 固定碳活度的管状渗碳模拟




Q. A. 内部 C 活度固定的钢管（Fe-1.3Si-0.05C，wt.%）在 1000°C 处理后渗碳深度有多少？

- 单击工具栏 按钮加载热力学和迁移率数据库(*FeSiC.tdb*)，并选择全部三个组元 Fe, Si, C;
- 从菜单中选择 PanDiffusion→Diffusion Simulation 或单击工具栏按钮 ，在弹出窗口(如下图所示)中设置扩散条件



设置扩散模拟条件为：

All Regions: Region_1; 点击 “All Regions” 旁边的  按钮删除 “Region_2” 或其它多余的区域，只保留 “Region_1” ；

Region Composition Distribution: uniform;

Region Composition: $w\%(C)=0.05$; $w\%(Fe) = 98.65$; $w\%(Si) = 1.3$;

Diff. Length(mm) : 10 (注意使用的长度单位)

Thermal History: 1000 °C, 100 hour

Upper Boundary Condition: activity


Value: $a(C:Graphite[*])=1e-5$

Lower Boundary Condition: activity

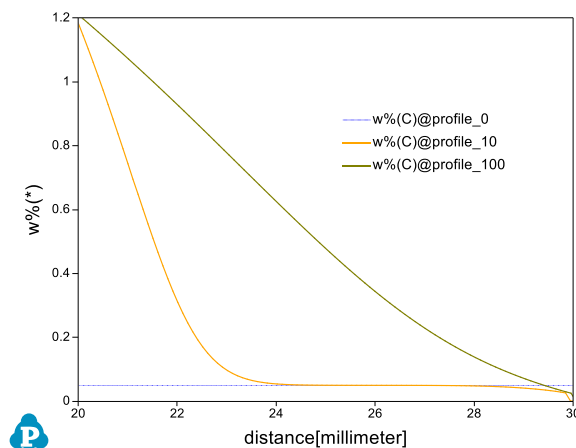
Value: $a(C:Graphite[*])=0.9$

Geometry: cylindrical; Inner Radius (mm): 20

Interface Flux Model: automatic; # of Grids: 100

Moment of Profile Outputs: 10hr; 点击  按钮添加中间时刻的成分分布结果。

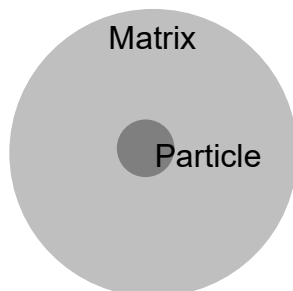
c. 点击 OK，开始扩散模拟，然后修改纵坐标范围获得结果如下图所示：



4.2.3 小结

- 学习在固定元素活度条件下对钢管进行恒温渗碳过程模拟
- 学习设置以活度为边界条件.
- 学习设置以柱状形貌的模拟

4.2.4 单个颗粒的固溶模拟



在 550°C 下进行固溶处理时，Al-1.55Cu (at.%) 合金铸态显微组织中的 AlCu_Theta 相固溶需要多长时间？

- 单击工具栏 按钮加载热力学和迁移率数据库(*FeCrNi.tdb*)，并选择全部三个组元 Cr, Fe, Ni;
- 从菜单中选择 *PanDiffusion*→*Dissolution Simulation* 或单击工具栏按钮 ，在弹出窗口(如下图所示)中设置颗粒固溶的模拟条件；

Dissolution Simulation

Alloy Composition

	Value
x%(Al)	98.45
x%(Cu)	1.55
Total:	100

Phase Information

Matrix Phase: Fcc

Particles:

Phase Name	Particle Size[um]	Vol. Fraction
AlCu_Theta	3	0.008

Simulation Conditions

Geometry: spherical # of Grids: 100

Interface Flux Model: automatic

Thermal History:

time[minute]	Temperature[C]
0.00	550.00
35.00	550.00
0.00	0.00

Moments for Profile Outputs:

time [min]

OK Cancel Options Extra Outputs Load Condition Save Condition Select Phases Select Comps

设置扩散模拟条件为:

Alloy Composition: $x\%(\text{Al}) = 98.45$; $x\%(\text{Cu}) = 1.55$

Matrix Phase: Fcc

Particles:

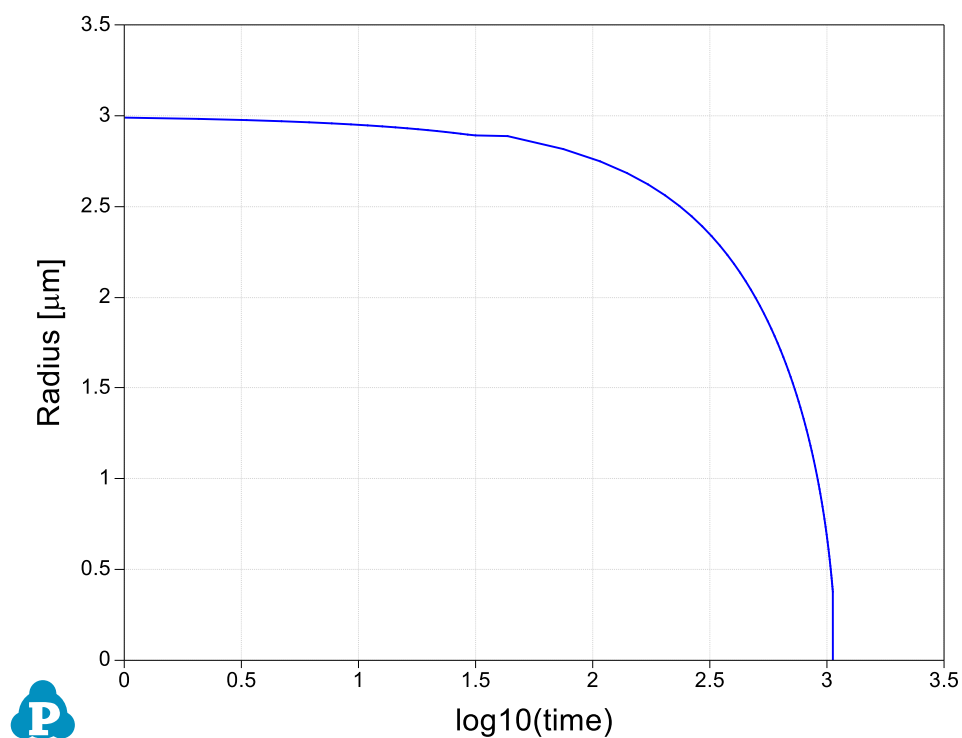
Phase Name: AlCu_Theta; Particle Size(μm): 3; Vol. Fraction: 0.008

Geometry: spherical; # of Grids: 100

Interface Flux Model: automatic;

thermal history: 550°C; 35 minutes

c. 设置好条件后, 点击 OK, 开始颗粒固溶模拟



4.2.4 小结

- 学习在恒温下对基体中的单个粒子进行固溶处理模拟