

Pandat 2025

数据库使用手册

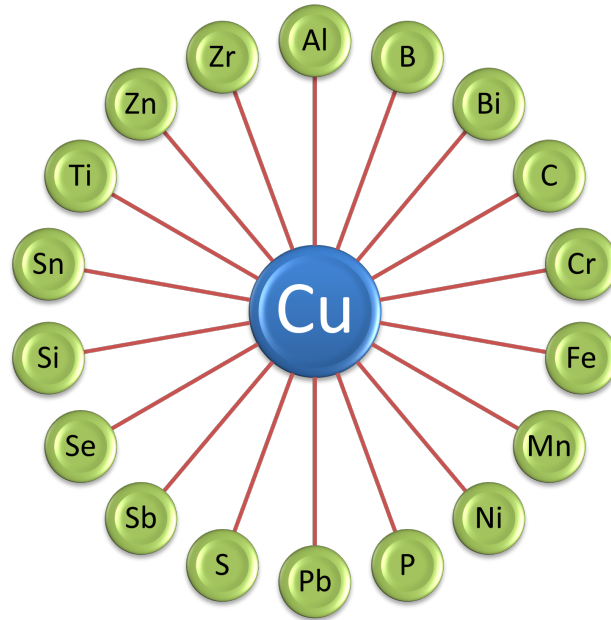


美国 CompuTherm 责任有限公司

版权© 2000 -2025

MDT 铜合金数据库

MDT Copper 2025



Materials Design Technology Co.,Ltd.

2-5 Odenmachi, Nihonbashi, Chuo-ku

Tokyo 103-0011 JAPAN

Copyright © Materials Design Technology Co.,Ltd.

目录

MDT 铜合金数据库	1
1 热力学数据库	1
1.1 组元	1
1.2 推荐使用的成分范围	1
1.3 相	2
1.4 优化的子体系	3
1.5 数据库的验证	4
2 迁移率数据库	7
2.1 组元 (19)	7
2.2 相	7
2.3 纯组元的自扩散系数	7
2.4 优化的体系	8
2.5 数据库的验证	8
3 热物理性质数据库	11
3.1 组元 (19)	11
3.2 相	11
3.3 数据库的验证	11
4 参考文献	13

1 热力学数据库

1.1 组元

本数据库中共包含以下19个组元：

主要合金元素：**Cu, Cr, Fe, Mn, Ni, Pb, Si, Sn, Zn**

微量合金元素：**Al, B, Bi, C, P, S, Sb, Se, Ti, Zr**

1.2 推荐使用的成分范围

表 1.1列出了各个元素推荐使用的成分范围。注意该表给出的范围非常保守，该成分范围都经过大量多元商业合金的实验验证。事实上，很多元素可以应用于更宽的范围，部分二元体系和三元体系在全浓度范围内进行了优化评估，能够适用于0-100%整个浓度范围，详见第 1.4 节。

表 1.1: 推荐使用的成分范围

组元	成分范围 (wt.%)
Cu	50 ~ 100
Zn	0 ~ 45
Ni	0 ~ 35
Sn	0 ~ 14
Cr, Fe, Mn	0 ~ 10
Pb, Si	0 ~ 5
Al, Sb	0 ~ 3
Bi, P, Se, Zr	0 ~ 2
B, C, S, Ti	0 ~ 0.5

1.3 相

该数据库共包含**330**个相。**1**列出了主要相的名称和热力学模型。其他相的信息可通过Pandata软件中的TDB viewer查看。

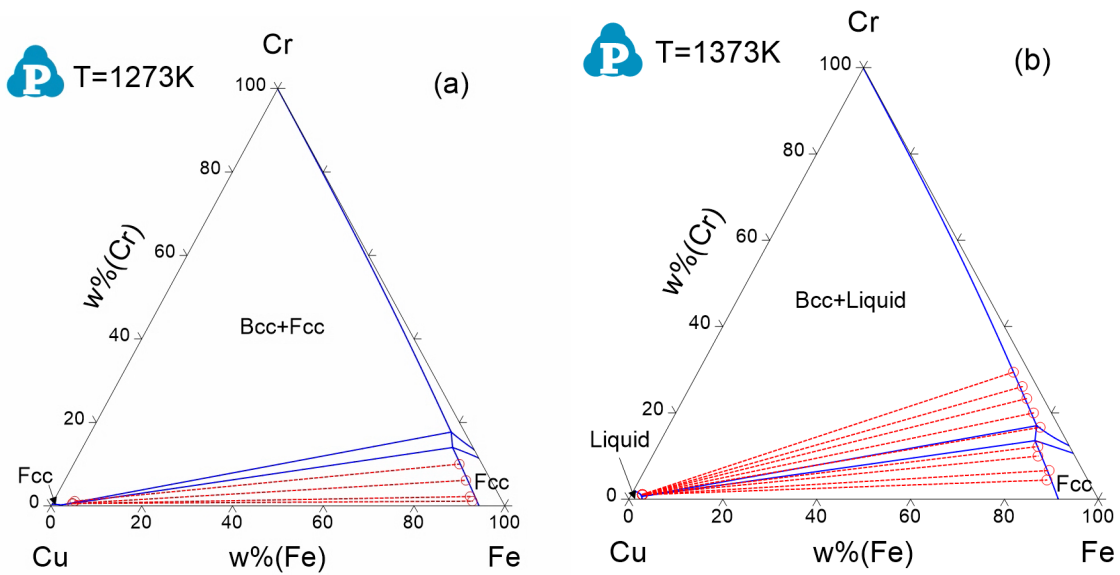
表 1.2: 相名称及其相关信息

名称	晶格尺寸	组成
Ag5Zn8	(0.667)(0.333)	(Al)(Al,Cu)
AlCu_Delta	(0.4)(0.6)	(Al)(Cu)
AlCu_Eps1	(0.4)(0.6)	(Al,Cu)(Al,Cu)
AlCu_Eps2	(0.5)(0.5)	(Al,Cu)(Cu)
AlCu_Eta	(0.5)(0.5)	(Al,Cu)(Cu)
AlCu_Zeta	(0.45)(0.55)	(Al)(Cu)
Bcc	(1)(3)	(Al,B,Bi,Cr,Cu,Fe,Mn,Ni,P,Pb,Si,Sn,Ti,Zn) (C,Va)
Cu4Ti	(0.8)(0.2)	(Cu,Ti)(Cu,Ti)
Cu4Ti3	(0.571)(0.429)	(Cu)(Ti)
Cu56Si11	(0.835821) (0.164179)	(Cu,Zn)(Si)
CuInSn_Eta	(0.545)(0.122) (0.333)	(Cu)(Cu,Sn)(Sn)
Fcc	(1)(1)	(Al,B,Bi,Cr,Cu,Fe,Mn,Ni,P,Pb,Si,Sn,Ti,Zn) (C,Va)
Gammabrass	(1)	(Al,Cu,Fe,Ni,Si,Zn)
Hcp	(1)(0.5)	(Al,B,Bi,Cr,Cu,Fe,Mn,Ni,Pb,Si,Sn,Ti,Zn) (C,Va)
Laves_C15	(2)(1)	(Cr,Cu,Fe,Ni,Ti)(Cr,Cu,Fe,Ni,Ti)
Laves_C36	(2)(1)	(Cu,Ni,Ti)(Cu,Ni,Ti)
Liquid	(1)	(Al,B,Bi,Bi2Se3,C,Cr,CrSe,Cu,Cu2Se,

表 1.4: 关键三元体系的建模状态

Al-Cu-Fe	Al-Cu-Ni	Al-Cu-Sb	Al-Cu-Si	Al-Si-Zn	B-Ni-Si	Bi-Cu-Ni	Bi-Cu-Pb
Bi-Cu-Sn	Bi-Cu-Zn	Bi-Cu-Se	Bi-Se-Zn	Bi-Sn-Zn	C-Cr-Fe	C-Cu-Fe	Cr-Cu-Ni
Cr-Cu-Si	Cr-Cu-	Cr-Cu-Ti	Cr-Fe-Ni	Cr-Fe-S	Cr-Mn-S	Cr-Ni-Si	Cu-Fe-S
Cu-Fe-Ni	Cu-Fe-	Cu-Fe-Si	Cu-Fe-	Cu-Mn-	Cu-Mn-	Cu-Se-	Cu-Ni-P
Cu-Ni-Si	Cu-Ni-	Cu-Ni-Ti	Cu-Ni-Zn	Cu-P-Sn	Cu-Pb-	Cu-Sb-	Cu-Pb-S
Cu-Sb-	Cu-Sb-	Cu-Si-Zn	Cu-Sn-Ti	Cu-Sn-	Cu-Ti-Zn	Fe-Mn-	Fe-Mn-S
Fe-Ni-S	Ni-Si-Ti						

1.5 数据库的验证



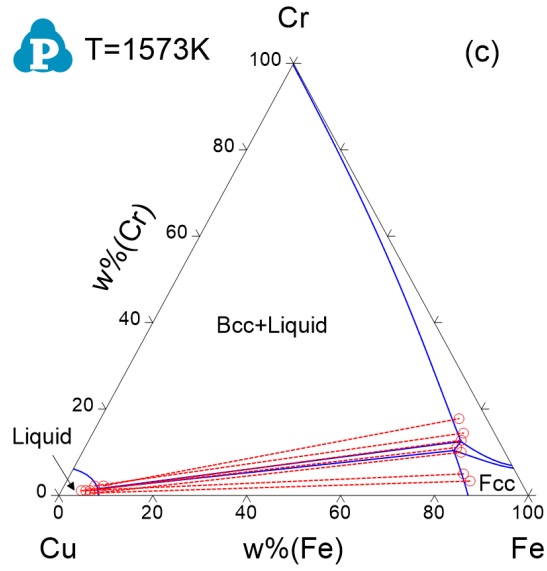
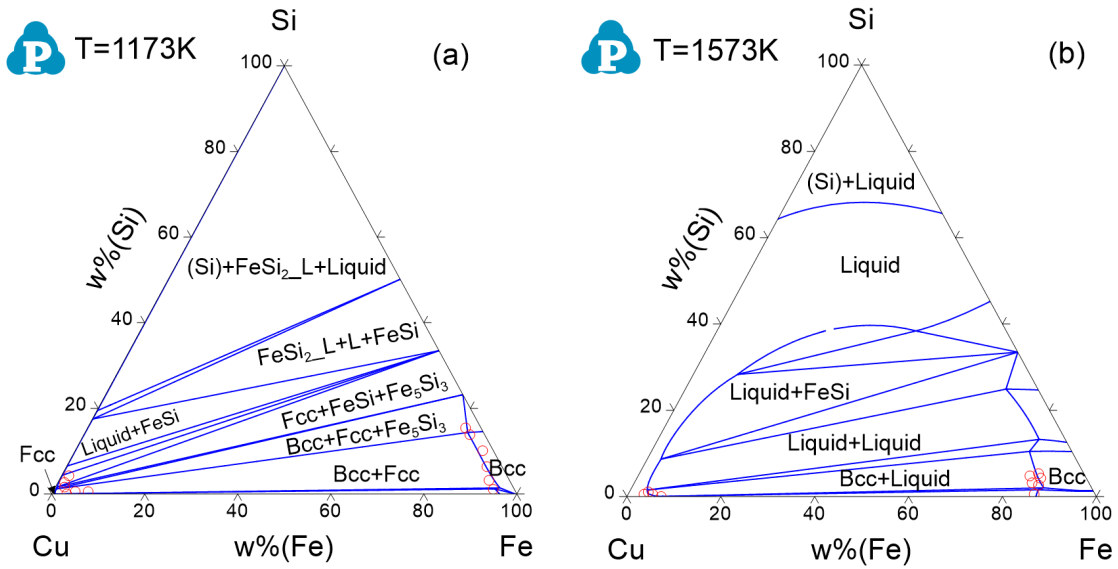


图 1.1: Fe-Cu-Cr体系等温截面的计算相图与实验结果[1997Oht, 2002Wan]对比:
(a)1273K; (b)1373K; (c)1573K



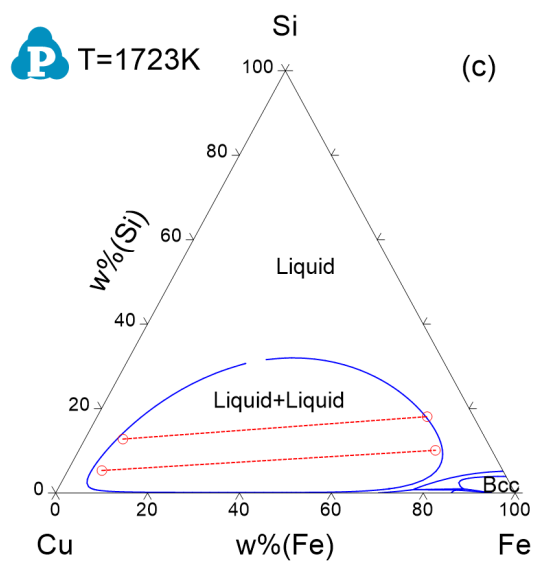


图 1.2: Fe-Cu-Si体系等温截面的计算相图与实验结果[1997Oht, 1999Him, 2002Wan]对比:(a) 1173K; (b) 1573K; (c) 1723K

2.4 优化的体系

本数据库不仅优化了上面表格中所列的自扩散系数,还包含了所有元素的杂质扩散数据。已有的二元和三元系统中的化学扩散系数数据也用于优化相互作用参数。针对Bcc和Fcc相优化后的二元体系和三元体系,如下表所列:

Fcc 相

Al-Cu	Al-Ni	Al-Si	Al-Zn	Cr-Fe	Cr-Ni	Cu-Fe	Cu-Si	Cu-Sn	Cu-Ti
Cu-Zn	Fe-Mn	Fe-Ni	Fe-Si	Mn-Ni	Ni-Ti	Ni-Zn			

Al-Cr-Ni	Al-Cu-Si	Al-Cu-Zn	Al-Mn-Ni	Cr-Cu-Ni	Cr-Fe-Ni
Cu-Fe-Mn	Cu-Fe-Ni	Cu-Mn-Ni	Cu-Ni-Zn	Fe-Mn-Si	

Bcc 相

Al-Fe	Al-Ti	Cr-Fe	Cr-Ti	Cu-Ti	Fe-Ti	Ti-Zr			
-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	--	--	--

Cr-Fe-Ni	Al-Cr-Ti	Al-Fe-Ti			
----------	----------	----------	--	--	--

2.5 数据库的验证

模拟了铜基合金的成分曲线以验证当前的铜基合金的迁移率数据库,下面是一些示例。

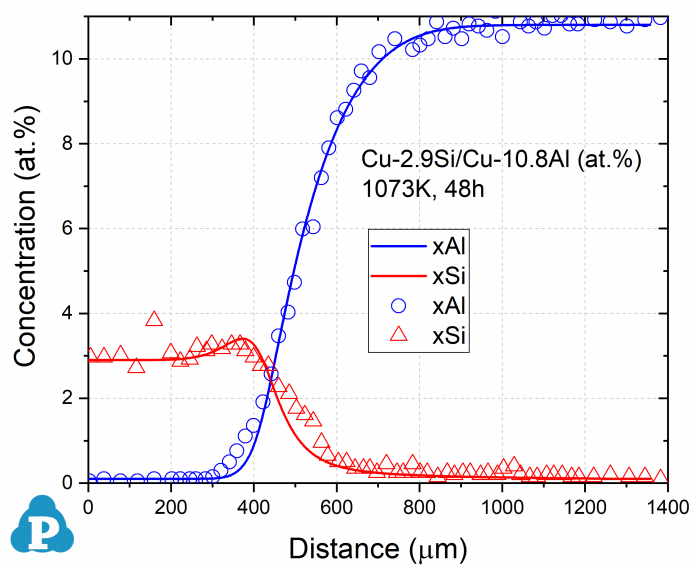


图 2.1: Cu_{2.9}Si-Cu_{10.8}Al (at.%)在 1073K保温 48h 的成分曲线[2013Liu]

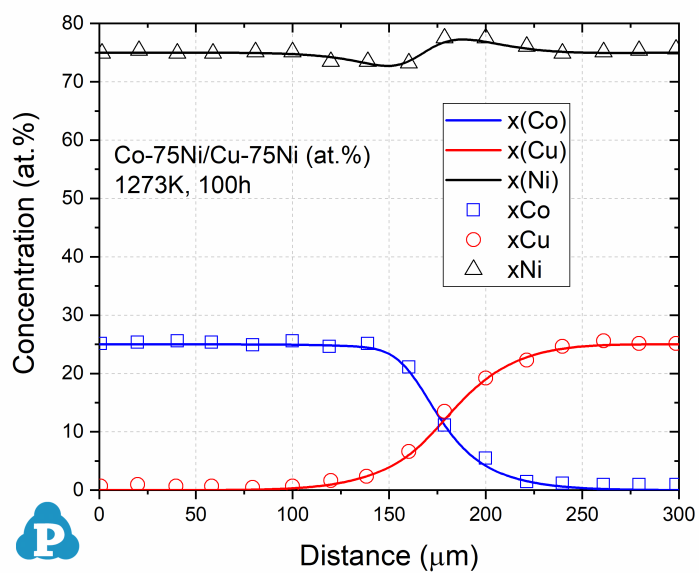


图 2.2: Co₇₅Ni-Cu₇₅Ni (at.%)在 1273K保温 100h 的成分曲线[2014Che]

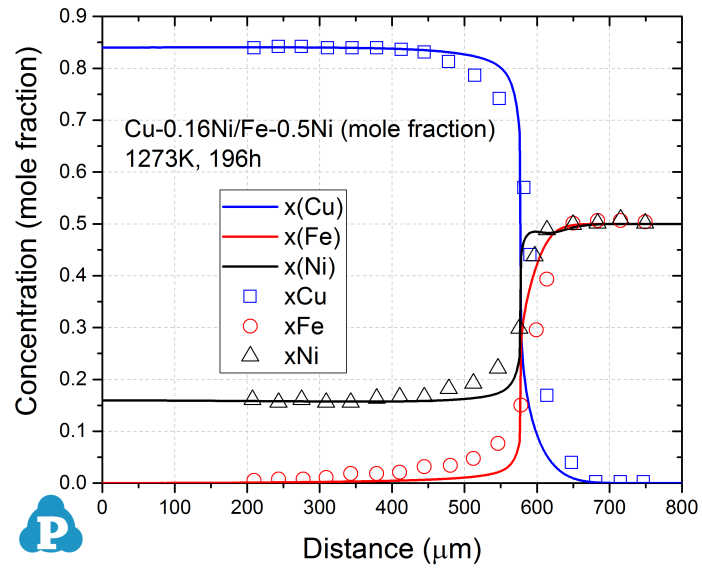


图 2.3: Cu-0.16Ni/Fe-0.5Ni (摩尔分数)在 1273K保温 196h的成分曲线[2011Liu]

3 热物理性质数据库

PanCu2025_MV是铜基合金的摩尔体积数据库,与MDTCu2025_TH热力学数据库兼容,适用于模拟铝基合金的热物理性质,例如密度,热膨胀系数,凝固收缩率等。

3.1 组元 (19)

Al	B	Bi	C	Cr	Cu	Fe	Mn	Ni	P
Pb	S	Sb	Se	Si	Sn	Ti	Zn	Zr	

3.2 相

该版本的摩尔体积数据库涵盖了MDTCu2025_TH数据库中所有评估的 **330**个相。

3.3 数据库的验证

下面给出了一系列计算的铜基合金的摩尔体积、密度与温度的变化关系,以验证当前的PanCu2025_MV数据库。

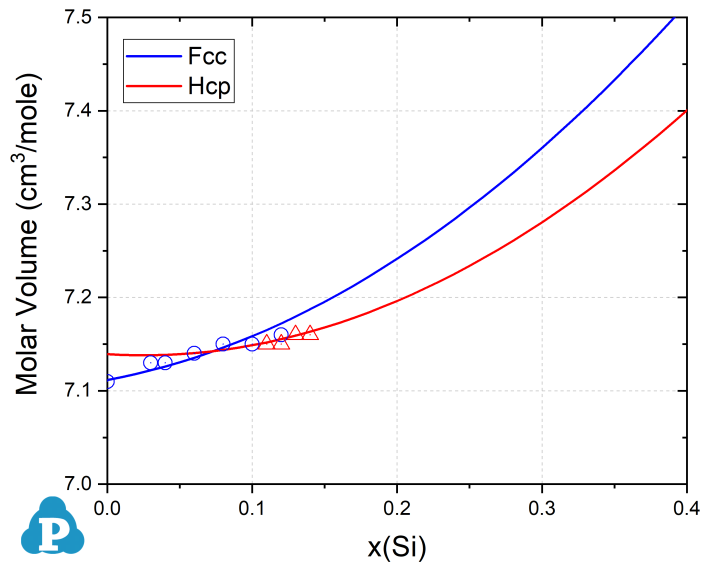


图 3.1: Cu-Si二元合金中Fcc和Hcp相在298K时的摩尔体积[2006Hal]

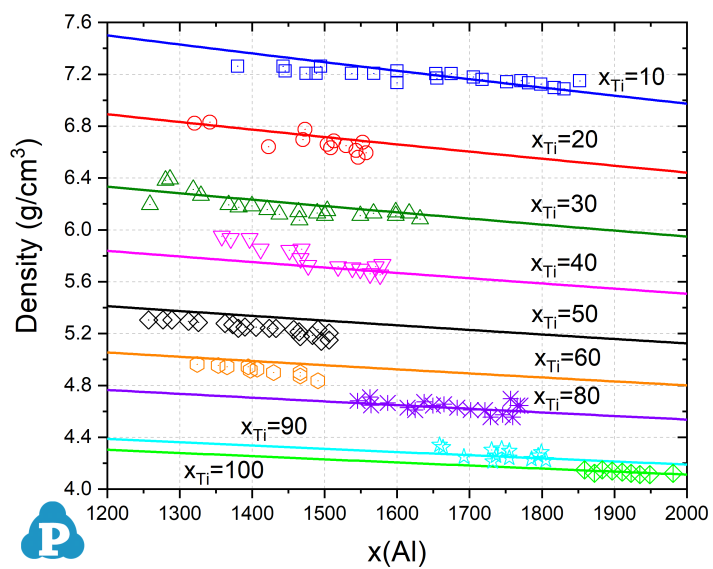


图 3.2: Cu-Ti二元体系的液相密度[2013Amo]

4 参考文献

- [1997Oht] H. Ohtani, H. Suda, K. Ishida, *ISIJ International*, 37 (1997): 207-216.
- [1998Kai] R. Kainuma, N. Satoh, X.J. Liu, I. Ohnuma, K. Ishida, *J. Alloys Compounds*, 266 (1998): 191-200.
- [1998Wan] C.P. Wang, X.J. Liu, I. Ohnuma, R. Kainuma, S.M. Hao, and K. Ishida, *Z. Metallkunde*, 98 (1998): 828-835.
- [1999Him] M. Hino, T. Nagasaka, and T. Washizu, *J. Phase Equilibria*, 20 (1999): 179-186.
- [2000Wan] C.P. Wang, X.J. Liu, I. Ohnuma, R. Kainuma, K. Ishida, *CALPHAD* 24 (2000): 149-167.
- [2002Wan] C.P. Wang, X.J. Liu, I. Ohnuma, R. Kainuma, K. Ishida, *J. Phase Equilibria*, 23 (2002): 236-245.
- [2004Wan] C.P. Wang, X.J. Liu, I. Ohnuma, R. Kainuma, K. Ishida, *J. Phase Equilibria*, 25 (2004): 320-328.
- [2005Jia] M. Jiang, C.P. Wang, X.J. Liu, I. Ohnuma, R. Kainuma, G.P. Vassilev, K. Ishida, *J. Physics Chem. of Solids*, 66 (2005): 246-250.
- [2006Hal] B. Hallstedt, Molar volumes of Al, Li, Mg and Si. *Calphad*, 31(2) (2006): 292-302.
- [2011Liu] Y. Liu, et al., Atomic mobilities, zero-flux planes and flux reversals in fcc Cu-Fe-Ni alloys. *Calphad*, 35 (2011): 376-383.
- [2013Liu] D. Liu, et al., Ternary diffusion in Cu-rich fcc Cu-Al-Si alloys at 1073 K. *Journal of Alloys and Compounds*, 566 (2013): 156-163.
- [2013Amo] S. Amore, et al., Excess volume and heat of mixing in Cu-Ti liquid mixture. *The Journal of Chemical Physics*, 139 (2013): 064504.
- [2014Che] J. Chen, et al., Mobilities, diffusivities and kinetic characteristics for fcc Cu-Co-Ni alloys. *Calphad*, 47 (2014): 123-128.