

# 综述 Thermo-Calc 在钢铁材料研究中的应用

## Overview of Thermo-Calc Application in Iron and Steel Materials Research

李斯文<sup>1</sup> 王舒淇<sup>2</sup>

Siwen Li<sup>1</sup> Shuqi Wang<sup>2</sup>

1. 华北理工大学 以升创新教育基地, 中国·河北 唐山 063210

2. 华北理工大学 建筑工程学院, 中国·河北 唐山 063210

1. Yisheng Innovation Education Base, North China University of Science and Technology, Tangshan, Hebei, 063210, China

2. College of Civil and Architectural Engineering, North China University of Science and Technology, Tangshan, Hebei, 063210, China

**【摘要】**Thermo-Calc 软件由于其简单的操作界面、完备的数据库、强大的模拟计算功能已被广泛用于计算不同体系的二元、三元甚至多元相图的计算、新材料设计优化和凝固过程中。大大地减少了实验的次数,提高了科研效率,节约了资源和能源。论文综述了 Thermo-Calc 软件的热力学、动力学计算技术在钢铁研究中的应用,以期进一步促进热力学、动力学模拟计算技术在中国钢铁界的广泛应用,推动中国钢铁行业的健康持续发展。

**【Abstract】**Thermo-Calc software has been widely used to calculate binary, ternary and even multiphase phase diagrams for different systems, and to optimize new material design and solidification process due to its simple interface, complete database, and powerful simulation and calculation functions. The number of experiments was greatly reduced, the efficiency of scientific research was improved, and resources and energy were saved. The paper reviewed the application of Thermo-Calc software thermodynamics and dynamics calculation technology in iron and steel research, in order to further promote the extensive application of thermodynamics, dynamics simulation calculation technology in China's steel industry, and promote the healthy and sustainable development of China's steel industry.

**【关键词】**Thermo-Calc; 钢铁材料; 文献综述

**【Keywords】**Thermo-Calc; iron and steel materials; literature review

**【DOI】**<http://dx.doi.org/10.26549/gcjsygl.v2i7.898>

## 1 引言

钢材产量大、应用广。其组成元素较多,生产工艺复杂,每一个生产环节和元素的变化都会对最终所产生的的钢铁材料的性能产生很大的影响。探知材料的组成,工艺与微观结构,乃至宏观性能之间的关系钢铁材料研究所关注的焦点和难题。而材料热力学和动力学模拟对此研究的意义尤为重大<sup>[1]</sup>。Thermo-Calc 软件是一款基于已有文献和实验数据基础之上的热力学计算软件,是由瑞典皇家技术学院的 Sundman 等研发的一套极其实用的合金数据库计算系统,并于 1981 年首次发布<sup>[2-4]</sup>。该软件是计算学领域中 strongest 和最柔性的软件包之一。目前, Thermo-Calc 软件已经更新了 20 多个版本。它的数据齐全、功能众多,在国内外得到广泛应用。论文综述了 Thermo-Calc 软件的热力学、动力学计算技术在钢铁研究中的应用,以期进一步促进热力学、动力学模拟计算技术在中国钢铁界的广泛应用,推动中国钢铁行业的健康持续发展,促进中国早日成为钢铁强国。

## 2 Thermo-Calc 软件的应用

### 2.1 相图的计算

Thermo-Calc 是一款基于 CALPHAD 技术的材料热力学、动力学模拟软件。首先,进行热力学计算。引入计算热力学之后,只需要对相图关键的热力学数据进行试验测定,通过优化

后可以外推到该体系完整的相图及其相关的数据。很大程度上地减少了经过试验研究相图的工作量。当然,热力学计算技术不仅能够获得相图的相关信息,还能够计算出化学式、活度、相变驱动力等。

#### 2.1.1 二元相图的计算

二元相图描述了两组元成分不同条件下的变化规律,绘制和分析二元相图是进一步研究三元乃至多元体系相变规律的基础<sup>[5]</sup>。目前,人们通过实验已经绘制出了很多多元合金的二元相图,为生产实践提供了有利的理论依据。但是通过实验获得的二元相图步骤繁琐费时费力,而且由于实验条件和技术手段的限制,还有很大一部分的相图很难获得。如何找出多元体系中状态参量、相态和相组成的关系,并通过热力学方法,从相图中得到体系中各项热力学参数,在实验中无法得到有效解决,特别是对于一些极端条件下的实验则根本无法实现。因此,模拟绘制二元相图并从中获得材料体系的结构数据,就成为大家密切关注的一个研究问题<sup>[6]</sup>。利用 Thermo-Calc 提供的简单的计算界面和模块可以快速地计算各种合金体系的二元相图,其在钢铁领域能计算 20 多种钢铁二元合金相图,包括 Fe-C、Fe-Cr、Fe-Cu、Fe-Al、Fe-C、Fe-O、Fe-S、Fe-Mn、Fe-V、Fe-Ti、Fe-Mn、Fe-Zr、Fe-Nb、Fe-Mo、Fe-W、Fe-Pr、Fe-CO、Fe-Ni 等。

当然,利用 Thermo-Calc 提供的 Binary-Phase-Diagram 模

块除了计算二元相图外,还可以计算吉布斯自由能,活度以及相分数曲线。

### 2.1.2 三元及多元相图的计算

工业上实际应用的大多都是多元多相合金。而多元合金的计算远比二元合金的计算复杂。而目前大多数三元合金体系没有可供参考的相图。

国内外的一些学者就利用 Thermo-Calc 软件绘制出相关的三元甚至多元相图,从而解决了相关问题。商延庚等利用 Thermo-Calc 计算了 Sn-Ag-Cu 三元平衡相图,根据 217℃时的平衡相图,制定出了该温度下的最佳成分,计算结果与 DSC 分析相符<sup>[7]</sup>。同样,U. Hecht 等人在研究 Al-Cu-Ag 系沿共晶沟定向凝固的固液界面形貌演变时,利用 Thermo-Calc 计算的三元相图选择出了合适的合金成分<sup>[8]</sup>。

利用 Thermo-Calc 软件及其提供的三元合金数据库,可以绘制等温截面图,液相面的单变量线和投影面、等值线和垂直截面等。对于大多数钢铁材料,均具有三元以上的组元,所以多元系相图比二元和三元相图用途更广泛。但是等压 n 元体系的相图不能在平面和高维空间表示,所以必须要依赖二元或三维截面解决相关问题。

## 2.2 优化设计合金

Thermo-Calc 和 DICTRA 系统采用了来自多种国际合作渠道的(如 CAMPADA、CCT、MIT、NIST 等)经过严格筛选的高品质数据库。目前,全国已经有越来越多的高校、企业及科研机构利用 Thermo-Calc 和 DICTRA 系统优化设计工艺,改进产品质量以及设计新材料。同时 Thermo-Calc 软件也可以与其他软件配合使用,从而使问题更简单化。

在 575℃,a<sub>N</sub>=801 的条件下,Du 运用 DICTRA 中的移动相界面模型模拟了铁的氮化过程。结果表明,化合物层的厚度( $\epsilon + \gamma'$ )随时间的变化的规律,模拟结果和实验结果一致<sup>[9]</sup>。Liu 对渗碳体的溶解变化过程进行了模拟,渗碳体变化的模拟曲线与经过实验所得值相吻合<sup>[10]</sup>。王鲁等人运用 Thermo-Calc 和 JMat-Pro 热力学模拟软件不仅对镍基 Nimonic105 合金进行了成分优化,还对新合金进行了设计研究。研究表明,通过降低 Co、Cr 和 Mo 元素含量可有效降低 Nimonic105 合金中  $\mu$  相的析出温度,同时也可降低 700℃时合金中  $\sigma$  相的析出倾向。另外,通过调整 Nimonic105 的部分合金元素配比设计了一种新型镍基合金 HR105C,它在 700~1200℃区间无  $\sigma$  相和  $\mu$  相等有害相<sup>[11]</sup>。

Thermo-Calc 软件具有完备的数据库、强大的模拟计算功能。目前它已成功地对奥氏体转变,碳化物的溶解与粗化以及渗氮层形成等钢中相变过程进行了模拟<sup>[12]</sup>,为热处理提供了准确的指导。同时,Thermo-Calc 还可以模拟合金中的元素对相变的影响,优化钢的元素组成,从而制备出性能更加优良的钢种。

## 2.3 凝固计算

材料的微观凝固组织是决定其力学性能和物理性能的主要因素。显微偏析数值模拟能够预测铸件或铸锭的显微偏析进行预测,从而预测其力学性能,从而指导其加工工艺,最终控制铸件的性能<sup>[13]</sup>。正确认识和掌握凝固规律对于优化材料加工工艺,提高材料性能具有重大意义。

Hao 等结合 Thermo-Calc 软件和实验研究,通过对一系列的 Al, Ni 等多元合金体系进行了热力学优化与相图计算分析,得到了可供合金凝固路径模拟计算使用的大量可靠的热力学数据<sup>[14]</sup>。陈福义和介万奇通过 Thermo-Calc 软件获取的热力学数据,成功地预测了 Al-Cu-Zn 合金的凝固路径<sup>[15]</sup>。闫二虎等人采用微观偏析统一模型并耦合 Thermo-Calc 研究了 Al-6.32Cu-25.13Mg (质量分数,%)合金在不同冷却速率 Rf 和固相反扩散系数 F 下的凝固路径<sup>[16]</sup>。

此外,基于 Thermo-Calc 凝固模拟计算模块及其提供的程序接口 TQ,结合其它软件,例如 MICREE 相场模拟软件,可以模拟凝固过程中的微观组织演变过程。

## 3 总结

近年来通过热力学模拟软件进行热力学模拟计算对材料的成分以及热处理工艺进行优化设计在材料科学领域已得到广泛应用<sup>[17-18]</sup>。Thermo-Calc 软件为目前最常用的热力学模拟计算软件<sup>[19]</sup>。论文对 Thermo-Calc 软件在相图计算、模拟凝固计算以及优化设计合金这三方面进行介绍。希望它能够以其简单的操作界面、完备的数据库、强大的模拟计算功能在科研工作者间被广泛地推广使用。

### 参考文献

- [1]苏航,杨才福,柴锋,等.热力学动力学计算技术在钢铁材料研究中的应用[M].北京:科学出版社,2010.27-48,121-136.
- [2]胡锦涛,宋红梅,俞敏,江来珠.铁素体不锈钢 410S 与 430 高温相组织的 Thermo-calc 计算与试验研究[J].宝钢技术,2007,(04):20-23.
- [3]陈红宇,刘正东,林肇杰,周芸.SA508-3 钢平衡相转变的热力学计算和分析[J].特殊钢,2007,(02):19-21.
- [4]何燕霖,李麟,吴晓春,王文革,叶平.预硬型塑料模具钢 718 的切削性能和夹杂物研究[J].金属热处理,2003,(01):51-54.
- [5]胡于梁.二元相图教学探[J].现代大学教育,1995,(02):41-42.
- [6]姚海南,庞四焘,高升,张季谦.Thermo-Calc 软件在二元体系相图中的应用研究[J].物理通报,2016,(02):14-17.
- [7]商延庚,许飞霞,孙大千,郎波.热力学计算在 SnAgCu 合金成分设计中的应用[J].电子工艺技术,2007,(01):10-13.
- [8]U. Hecht,Victor T. Witusiewicz, A. Drevermann, B. Büttger, S. Rex. Eutectic Solidification of Ternary Al-Cu-Ag Alloys: Coupled Growth of  $\alpha$

(下转第 335 页)

显提升,测绘仪器的种类不断增加,全站仪发展过程中,长距离棱镜全站仪的出现是一种突破性的发展,免棱镜全站仪的免棱镜视距从发展初期的数十米到现阶段的超过千米。免棱镜全站仪针对控制、地形与工程测量均能够发挥出较大价值,包括传统测距中工作人员不能够操作的悬崖等恶劣环境及建筑物变形测量等,对于免棱镜全站仪的应用有效的节省了施工时间。另外,免棱镜测距出现后,促使以往隧道工程测量作业中所面临的难题得以解决。在长测程无棱镜测距硬件也在逐步完善中,在进入市场之后各种硬件的价格不断下降,各种现代计算机技术也得以应用,开发出更为完善的软件系统,促使隧道施工放样测距水平也得到进一步提升。

## 5 AutoCAD 免棱镜全站仪技术在工程测量中的应用优势

计算业内资料在各测量环节中所占的比重较大,测量工作效率与完成期限及精准度等,均会建立在业内资料计算的效率及精准度上。若展开更为深入的探究,强化业内资料计算精准度更为高效的办法,其关键点应该是测量工具与计算方法两个方面。若在业内资料计算过程中应用到 CAD 软件,同时选择免棱镜全站仪作为测量工具,在技术层面上优势较为明显,能够对断面、曲面、不规则面给予精准测量。应用极坐标解析法,能够有效的简化工程测距工作的复杂程度。免棱镜全站仪定位功能较为精准,其自动化的程度也较高,可顺利实现目标跟踪与识别以及测距。此设备一般情况下会应用在控制

测量环节中,较少会被应用到施工测量工作中,若是将其与 CAD 软件进行联合应用,可有效简化及优化隧道挖掘施工测量办法,强化测量效率,同时也能够在一定程度上控制施工时间以及成本的投入。

## 6 结语

CAD 制图属于工程项目设计中比较常用到的软件之一,有助于提升工作效率,将全站仪应用到工程测量环节中,面棱镜技术的作用主要体现在简化传统工程测量复杂程度方面。免棱镜发展期间,全站仪技术的出现具有重要意义,免棱镜全站仪是相对于常规全站仪的概念界定,将 AutoCAD 免棱镜全站仪技术应用到工程测量环节中,联合应用来弥补两者之间的不足之处,有助于解决以往测量作业中所面对的难题,包括严峻的环境以及人为操作不便等,同时也能够在一定程度上强化测量工作效率及工作质量。

### 参考文献

(上接第 332 页)

(Al) and Al<sub>2</sub>Cu in Univariant Reaction [J]. Materials Science Forum,2006,541(508):55-56.

[9]Hong Du,John Ögren. Theoretical treatment of nitriding and nitrocarburizing of iron[J]. Metallurgical and Materials Transactions A,1996,27(4):37-42.

[10]ZI-Kui Liu,Lars Höglund,Björn Jönsson,John Ögren. An experimental and theoretical study of cementite dissolution in an Fe-Cr-C alloy[J]. Metallurgical Transactions A,1991,22(8):90-91.

[11]王鲁,杨钢,刘正东,刘宁.基于 Thermo-Calc 和 JMatPro 模拟计算的新型镍基合金设计[J].材料热处理学报,2017,38(04):193-199.

[12]何燕霖,李麟,叶平,吴晓春. Thermo-Calc 和 DICTRA 软件系统在高性能钢研制中的应用[J].金属热处理学报,2003,(04):73-77+85.

[13]刘永刚,陈光,孙国雄.凝固路径对 Al-4.5%Cu 合金显微偏析参数影响的数值模拟[J].中国有色金属学报,2005,(02):224-228.

[14]Hao D, Hu B, Zhang K, Zhang L J, Du Y.J. Mater Sci. 2014, 49:1157

[1]李超.全站仪免棱镜测距技术在煤矿测绘中的应用[J].山西科技,2017,32(06):135-139.

[2]李佩佩.AutoCAD 免棱镜全站仪技术在工程测量中的应用分析[J].企业技术开发,2016,35(08):45-46.

[3]曾强.免棱镜全站仪与 GPS-RTK 技术在大吉山钨业地形测量中的应用[J].北京测绘,2014(02):98-100.

[4]王艳波.无棱镜全站仪测量技术在水利工程测量中的应用[J].中国新技术新产品,2012,07(20):37.

[15]陈福义,介万奇.Al-Cu-Zn 合金微观偏析的实验和 Scheil 模型研究[J].金属学报,2004(06):664-668.

[16]闫二虎,孙立贤,徐芬,徐达鸣.基于 Thermo-Calc 和微观偏析统一模型对 Al-6.32Cu-25.13Mg 合金凝固路径的预测[J].金属学报,2016, 52(05):632-640.

[17]Raj Narayan Hajra,Arun Kumar Rai,Hara Prasanna Tripathy,S. Raju,S. Saroja. Influence of tungsten on transformation characteristics in P92 ferritic martensitic steel[J]. Journal of Alloys and Compounds,2016,689:829-936.

[18]吴丹,王福明,王程明,冯亚丽,李长荣.Cr-Mo-V 系高铁制动盘用钢的热力学研究[J].材料热处理学报,2016,37(08):228-233.

[19]张明达,胡春东,曹文全,董瀚.基于 Thermo-Calc 的中锰中铝 Fe-Mn-Al-C 低密度钢类 Schaeffler 相图绘制与评估[J].工程科学学报,2016,38(05):682-690.