

JMatPro 钴合金模块介绍

中仿科技
施翀 (Joy)
2011年12月

目 录

- 钴合金背景知识介绍
- 钴合金模块功能介绍、演示
 - ✓ 热力学计算
 - ✓ 凝固计算
 - ✓ 热物性能计算
 - ✓ 机械性能计算
 - ✓ 相转变计算
 - ✓ 数据导出

钴合金背景知识介绍

钴合金：一般含镍10~22%，铬20~30%以及钨、钼、钽和铌等固溶强化和碳化物形成元素 **高温合金**

固溶强化相：GAMMA相（合金元素与面心立方晶体结构钴形成的固溶体）

碳化物强化相：主要碳化物是MC, $M_{23}C_6$, M_6C ；碳化物热稳定性好，温度上升时碳化物凝聚长大速度慢，重新回溶于基体的温度也较高（最高可达1100°C）

用途：适于制作航空喷气发动机、工业燃气轮机、舰船燃气轮机的导向叶片和喷嘴导叶以及柴油机喷嘴等

钴合金的分类

按使用用途分类

1. 钴基耐磨损合金

基体具有较低的层错能及基体组织在应力作用或温度变化影响下面心立方转变为密排六方结构

2. 钴基耐磨损和水溶液腐蚀合金

钴的硫化物熔点（如Co-Co₄S₃共晶，877℃）高，并且硫在钴中的扩散率低

3. 钴基耐高温合金

固溶强化，沉淀强化，碳化物强化

钴合金中的相组织

基体相: γ 相 (GAMMA相), 面心立方结构 (FCC) 固溶强化
COBALT_HCP相, 密排立方结构 (HCP)

沉淀相: γ' 相, γ 相中的析出相, 起到强化作用

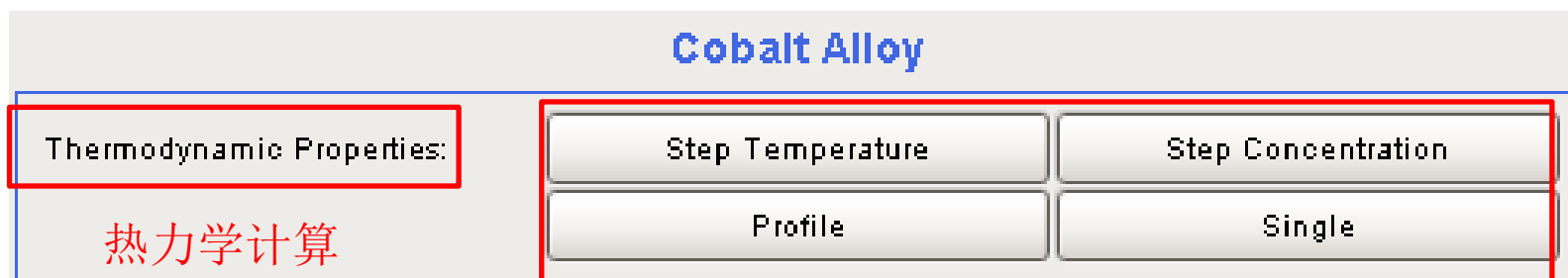
碳化物: MC, $M_{23}C_6$, M_6C 等, 也起到强化作用

硫化物: Co₄S₃, 熔点高 (877 °C), 增强抗腐蚀作用

脆性相: σ , Laves相等, 使合金脆化

钴合金模块功能介绍、演示

一.热力学计算—平衡相图绘制



- ① Step Temperature: 温度—相组成图
- ② Step Concentration & Profile: 合金成分—相组成图
- ③ Single: 固定温度和合金成分的相组成图

热力学计算的理论基础（CALPHAD 技术）

根据热力学原理，体系在恒温恒压达到平衡的一般条件：

- (1) 体系的总吉布斯自由能 G 达到最小值 G_{\min}
- (2) 组元 i 在各相中的化学势相等，即有

每一相的摩尔
吉布斯自由能：

$$G_m = \sum_i X_i G_i^0 + RT \sum_i X_i \ln X_i + \sum_i \sum_j X_i X_j \sum_v \Omega_v (X_i - X_j)^v$$

纯组元的吉
布斯自由能
之和

理想混合熵引
起的自由能增
加

偏离理想溶液引
起的超额自由能

一.热力学计算—1.Step temperature

设置合金成分

	Wt %
Co	52.25
Al	0.0
Ni	10.0
Cr	29.0
Fe	1.0
Hf	0.0
Mn	0.0
Mo	0.0
Nb	0.0
Si	0.0
Ta	0.0
Ti	0.0
W	7.5
Zr	0.0
B	0.0
C	0.25
N	0.0

FSX-414 Reset

Choice of phases for:
Cobalt Alloy

<input checked="" type="checkbox"/> LIQUID	<input checked="" type="checkbox"/> GAMMA
<input checked="" type="checkbox"/> GAMMA_PRIME	<input checked="" type="checkbox"/> NI2M
<input checked="" type="checkbox"/> ETA	<input checked="" type="checkbox"/> DELTA
<input checked="" type="checkbox"/> SIGMA	<input checked="" type="checkbox"/> MU
<input checked="" type="checkbox"/> LAVES	<input checked="" type="checkbox"/> P_PHASE
<input checked="" type="checkbox"/> R_PHASE	<input checked="" type="checkbox"/> G_PHASE
<input checked="" type="checkbox"/> NIMO	<input checked="" type="checkbox"/> COBALT_HCP
<input checked="" type="checkbox"/> MC	<input checked="" type="checkbox"/> MN
<input checked="" type="checkbox"/> M23C6	<input checked="" type="checkbox"/> M6C
<input checked="" type="checkbox"/> M7C3	<input checked="" type="checkbox"/> M2(C,N)
<input checked="" type="checkbox"/> M3B2	<input checked="" type="checkbox"/> MB2

Temperature:

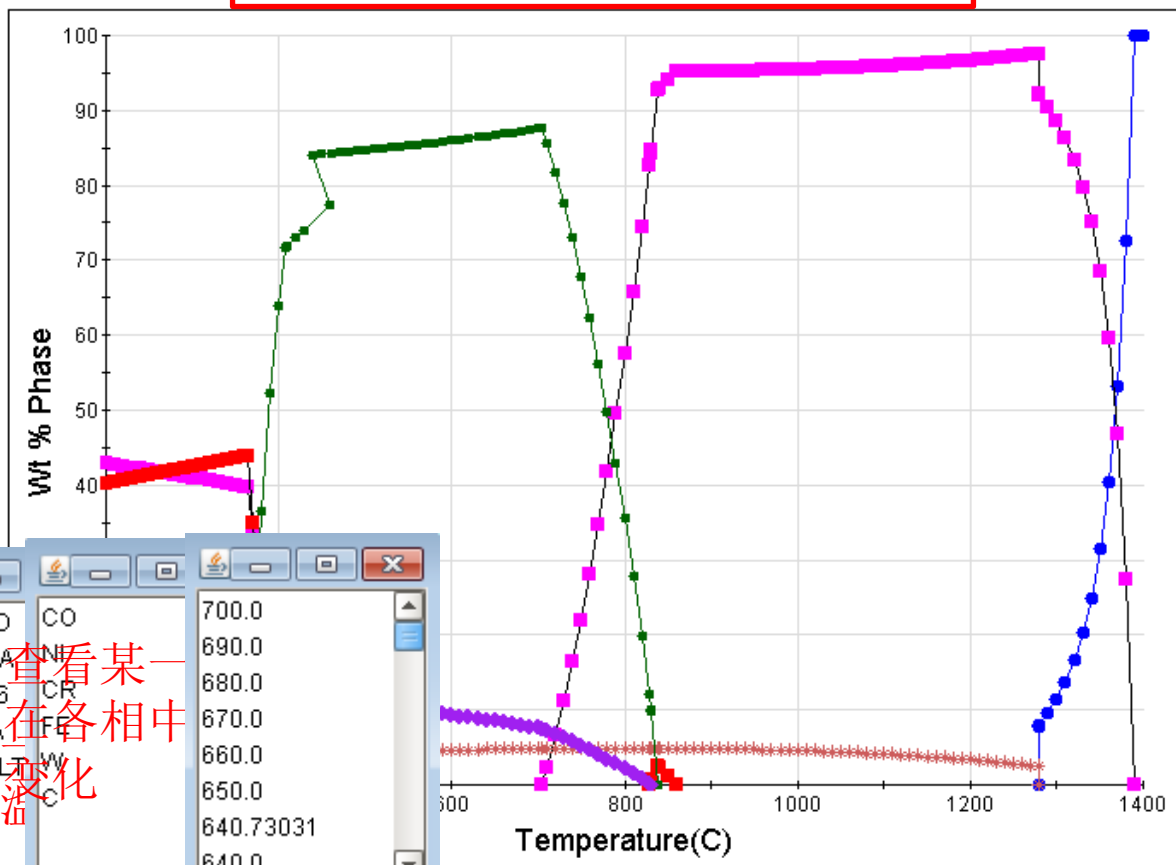
温度设置

是否考虑所有可能出现的稳态相

计算结果

Co-10.0Ni-29.0Cr-1.0Fe-7.5W-0.25C wt(%)

合金成分一定



- LIQUID
- GAMMA
- M23C6
- SIGMA
- COBALT_HCP
- MU

Clear all

Select all

勾选需要显示的相

LIQUID	CO	700.0
GAMMA	NI	690.0
M23C6	CR	680.0
SIGMA	FE	670.0
COBALT_HCP	WV	660.0
MU	C	650.0
		640.73031
		640.0

查看某一元素在各相中含量随温度变化

还给出了热力学函数变化曲线

一.热力学计算—2.Step Concentration

Cobalt Alloy

Thermodynamic Properties:

Step Temperature

Step Concentration

Profile

Single

	Wt %
Co	52.25
Al	0.0
Ni	10.0
Cr	29.0
Fe	1.0
Hf	0.0
Mn	0.0
Mo	0.0
Nb	0.0
Si	0.0
Ta	0.0
Ti	0.0
W	7.5
Zr	0.0
B	0.0
C	0.25
N	0.0

FSX-414 Reset

Cobalt Alloy

Concentration Step Calculation

Temperature

Fixed temperature (C):

Phases

Take all phases into account

Balancing

One element
 All elements

Element to vary:

Composition range (%):

Start: End: Step:

选择一种合金
元素平衡元素

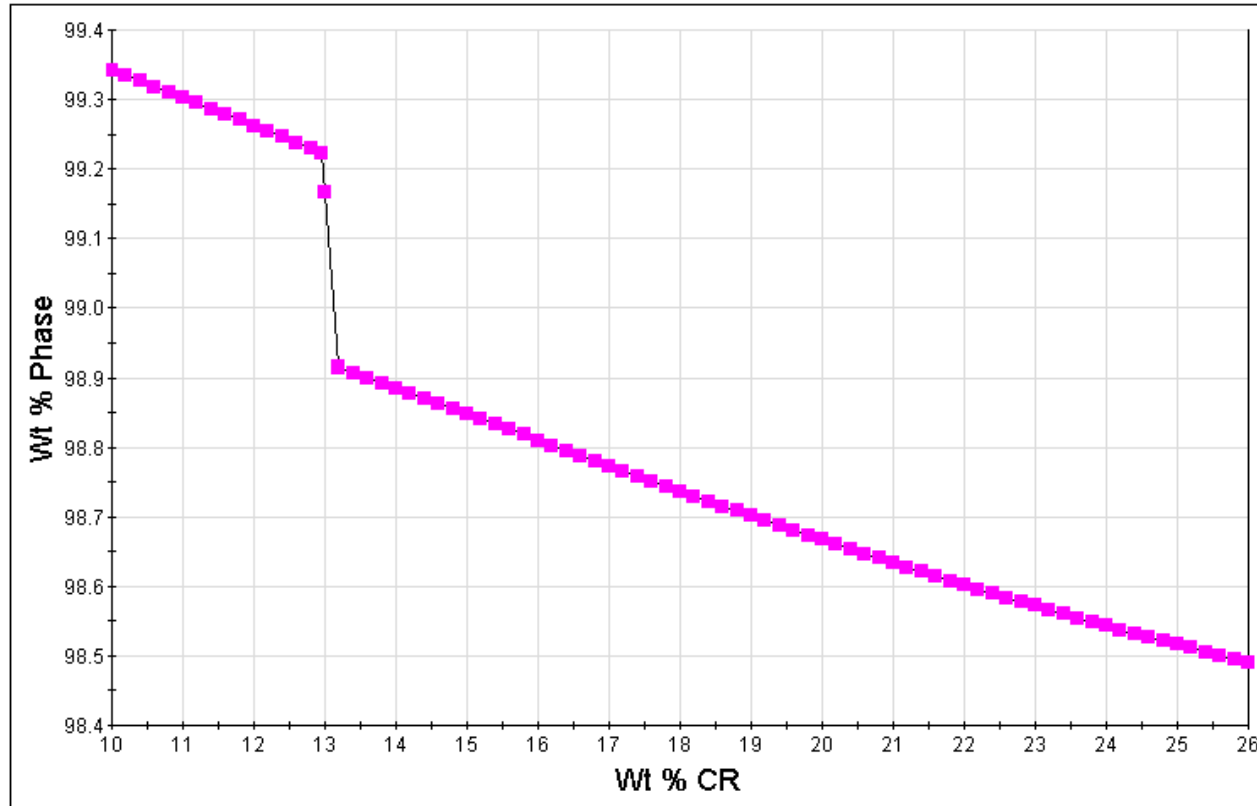
固定温度

选择平衡元素

除了成分变化以外的
合金元素全为平衡元
素

计算结果

Co-9.0Ni-26.0Cr-3.0Fe-0.8Mn-5.0Mo-0.3Si-2.0W-0.06C-0.08N wt(%)



T= 1000.0C (Balance: CO)

- GAMMA
- M23C6
- M2(C,N)
- MN

Clear all

Select all

Data: %Ph Ph El % ΔG α Cp H G S Phases details Options: wt °C grid zoom pan list help print save close

一.热力学计算—3.Profile



Profile: 计算固定温度时的 **多种合金成分同时变化时** 一相组成图

参数设置界面

	Wt %
Co	53.76
Al	0.0
Ni	9.0
Cr	26.0
Fe	3.0
Hf	0.0
Mn	0.8
Mo	5.0
Nb	0.0
Si	0.3
Ta	0.0
Ti	0.0
W	2.0
Zr	0.0
B	0.0
C	0.06
N	0.08

Cobalt Alloy
Profile Calculation

Temperature

Fixed temperature (C):

Concentration Intervals

Number of intervals:

Phases

Take all phases into account

Elements variation

	Start	End		Start	End		Start	End
Al	<input type="text" value="0.0"/>	<input type="text" value="0.0"/>	Mo	<input type="text" value="5"/>	<input type="text" value="0.0"/>	Zr	<input type="text" value="0.0"/>	<input type="text" value="0.0"/>
Ni	<input type="text" value="9"/>	<input type="text" value="0.0"/>	Nb	<input type="text" value="0.0"/>	<input type="text" value="0.0"/>	B	<input type="text" value="0.0"/>	<input type="text" value="0.0"/>
Cr	<input type="text" value="26"/>	<input type="text" value="0.0"/>	Si	<input type="text" value="0.3"/>	<input type="text" value="0.0"/>	C	<input type="text" value="0.06"/>	<input type="text" value="0.0"/>
Fe	<input type="text" value="3"/>	<input type="text" value="0.0"/>	Ta	<input type="text" value="0.0"/>	<input type="text" value="0.0"/>	N	<input type="text" value="0.08"/>	<input type="text" value="0.0"/>
Hf	<input type="text" value="0.0"/>	<input type="text" value="0.0"/>	Ti	<input type="text" value="0.0"/>	<input type="text" value="0.0"/>			
Mn	<input type="text" value="0.8"/>	<input type="text" value="0.0"/>	W	<input type="text" value="2"/>	<input type="text" value="0.0"/>			

Show different start

Haynes Ultimet

确定计算步长

指定多种合金成分同时变化

除Co以外，Co为平衡元素

一.热力学计算—4.Signal



Singal: 计算同时固定温度和合金成分时的相组成

参数设置界面

	Wt %
Co	53.76
Al	0.0
Ni	9.0
Cr	26.0
Fe	3.0
Hf	0.0
Mn	0.8
Mo	5.0
Nb	0.0
Si	0.3
Ta	0.0
Ti	0.0
W	2.0
Zr	0.0
B	0.0
C	0.06
N	0.08

Haynes Ultimet

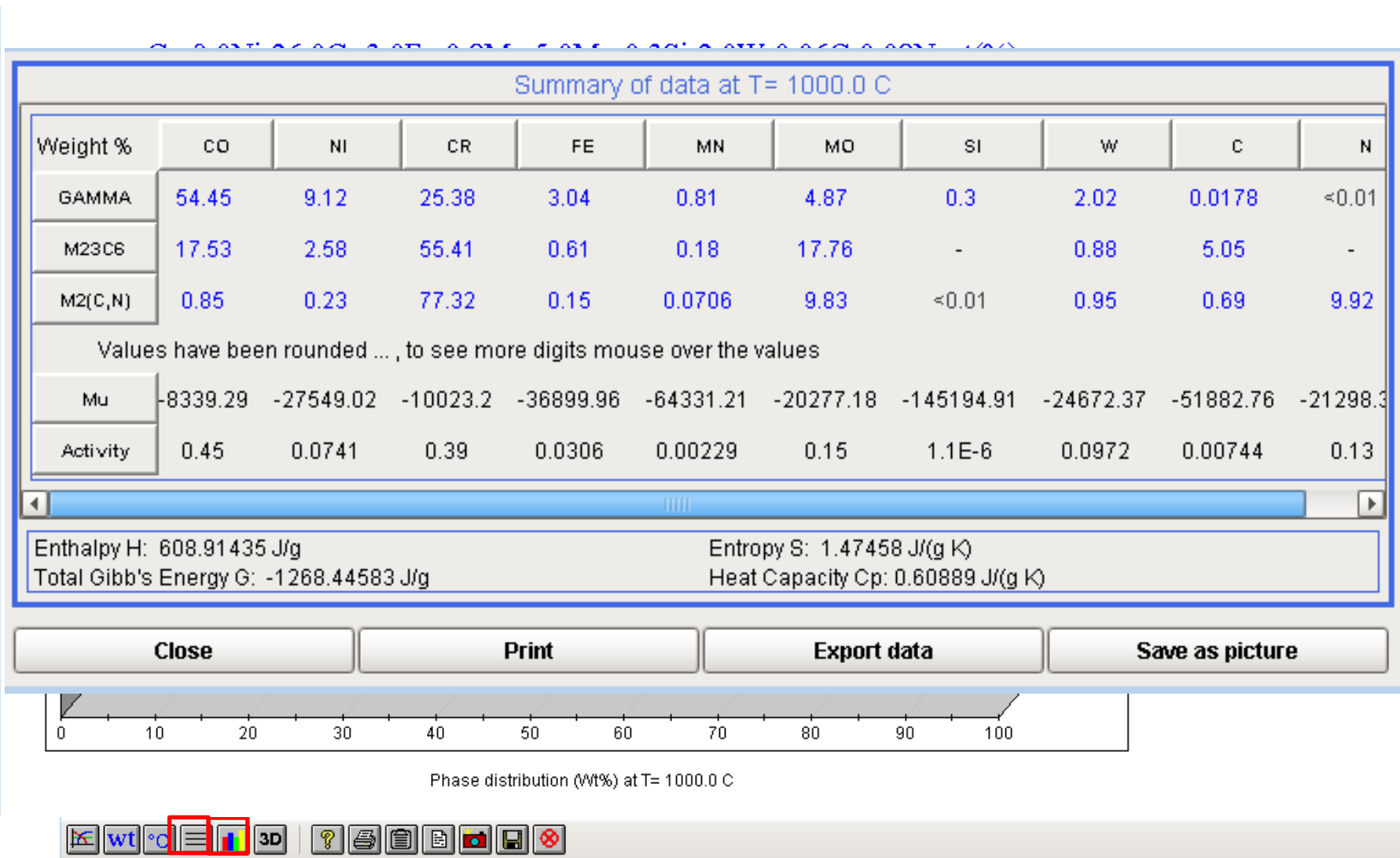
Cobalt Alloy
Single Calculation

Temperatures (°C)

Temperature:

Phases

Take all phases into account



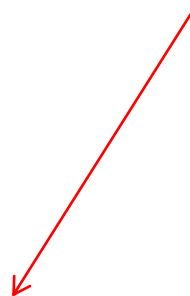
显示不同形式的图

二.凝固计算

Solidification:

Phases and Properties

凝固计算，模拟铸造过程



计算凝固过程中相组织结构，热物性能以及冷却曲线

凝固计算的理论基础

Scheil-Gulliver 模型

前提假设:

- ① 固相中的溶质扩散可以被忽略
- ② 液相中的溶质扩散非常快, 以至于扩散完全

计算公式:

形成固相所占分数 $f_s = 1 - \left(\frac{T_f - T}{T_f - T_L} \right)^{\left[\frac{1}{k-1} \right]}$

形成固相中合金成分 $C_s = kC_0(1 - f_s)^{k-1}$

凝固计算的理论基础

材料性能计算：

- ① 相组成计算（非平衡条件下）
- ② 基于每一相的合金成分计算该相的相关性能

$$P = \sum_i x_i P_i^0 + \sum_i \sum_{j>i} x_i x_j \left(\sum_v \Omega_{ij}^v (x_i - x_j)^v \right)$$

- ③ 根据材料的相组成及每个相的性能利用混合定律计算出材料的整体性能

$$P_t = x_\alpha P_\alpha + x_\beta P_\beta + P_{III} F_s$$

凝固计算——Phases&Properties（相组成&材料性能计算）

	Wt %
Co	53.76
Al	0.0
Ni	9.0
Cr	26.0
Fe	3.0
Hf	0.0
Mn	0.8
Mo	5.0
Nb	0.0
Si	0.3
Ta	0.0
Ti	0.0
W	2.0
Zr	0.0
B	0.0
C	0.06
N	0.08

Haynes Ultimet

Cobalt Alloy

Solidification calculation

Temperatures (C)

Start:

Step:

Solidification cut-off

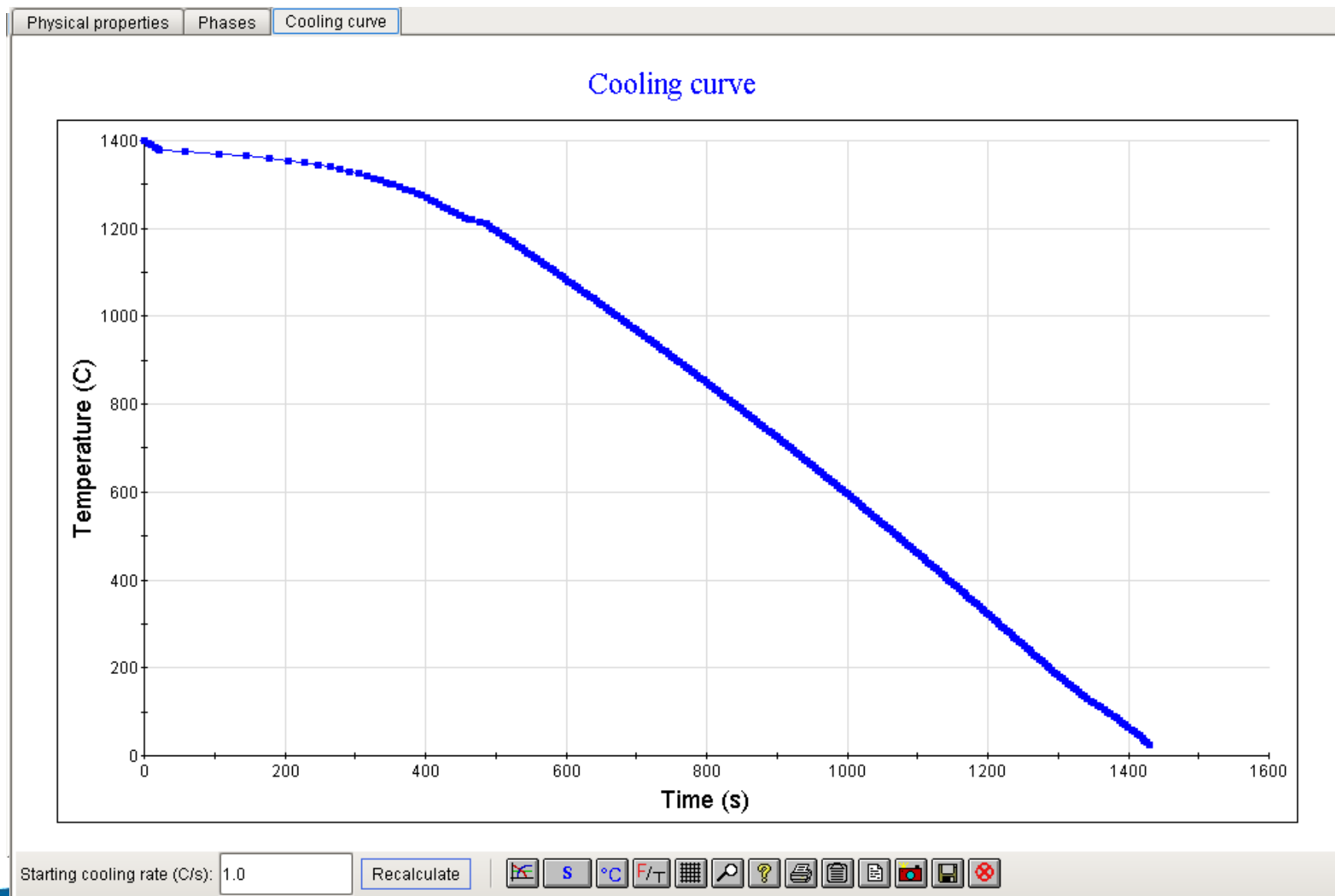
Fraction liquid (Wt)

Phases

Take all solid phases into account

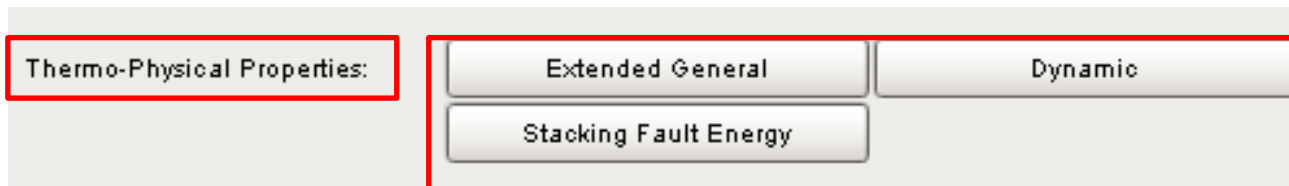
凝固 开始温度

凝固截止点



Infinitely Closer to Real
无限接近真实!

三.热物性能计算



热物性能计算

平衡相组织结构

① Extended General

② Dynmic

③ Stacking Fault Energy: 堆垛层错能计算

热物性能的计算

热物性能计算的理论基础

材料性能计算：

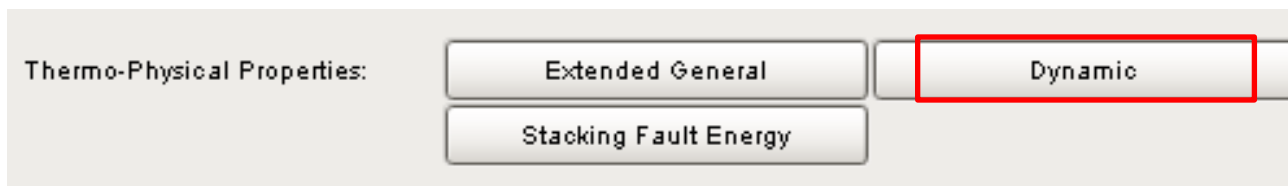
- ① 相组成计算（平衡条件下）
- ② 基于每一相的合金成分计算该相的相关性能

$$P = \sum_i x_i P_i^0 + \sum_i \sum_{j>i} x_i x_j \left(\sum_v \Omega_{ij}^v (x_i - x_j)^v \right)$$

- ③ 根据材料的相组成及每个相的性能利用混合定律计算出材料的整体性能

$$P_t = x_\alpha P_\alpha + x_\beta P_\beta + P_{III} F_s$$

三.热物性能计算—1.Dynamic



参数设置界面

	Wt %
Co	53.76
Al	0.0
Ni	9.0
Cr	26.0
Fe	3.0
Hf	0.0
Mn	0.8
Mo	5.0
Nb	0.0
Si	0.3
Ta	0.0
Ti	0.0
W	2.0
Zr	0.0
B	0.0
C	0.06
N	0.08

Cobalt Alloy
Concentration Step Calculation

Temperature

Fixed temperature (C):

Phases

Take all phases into account

Balancing

One element All elements

Balance:

Element to vary:

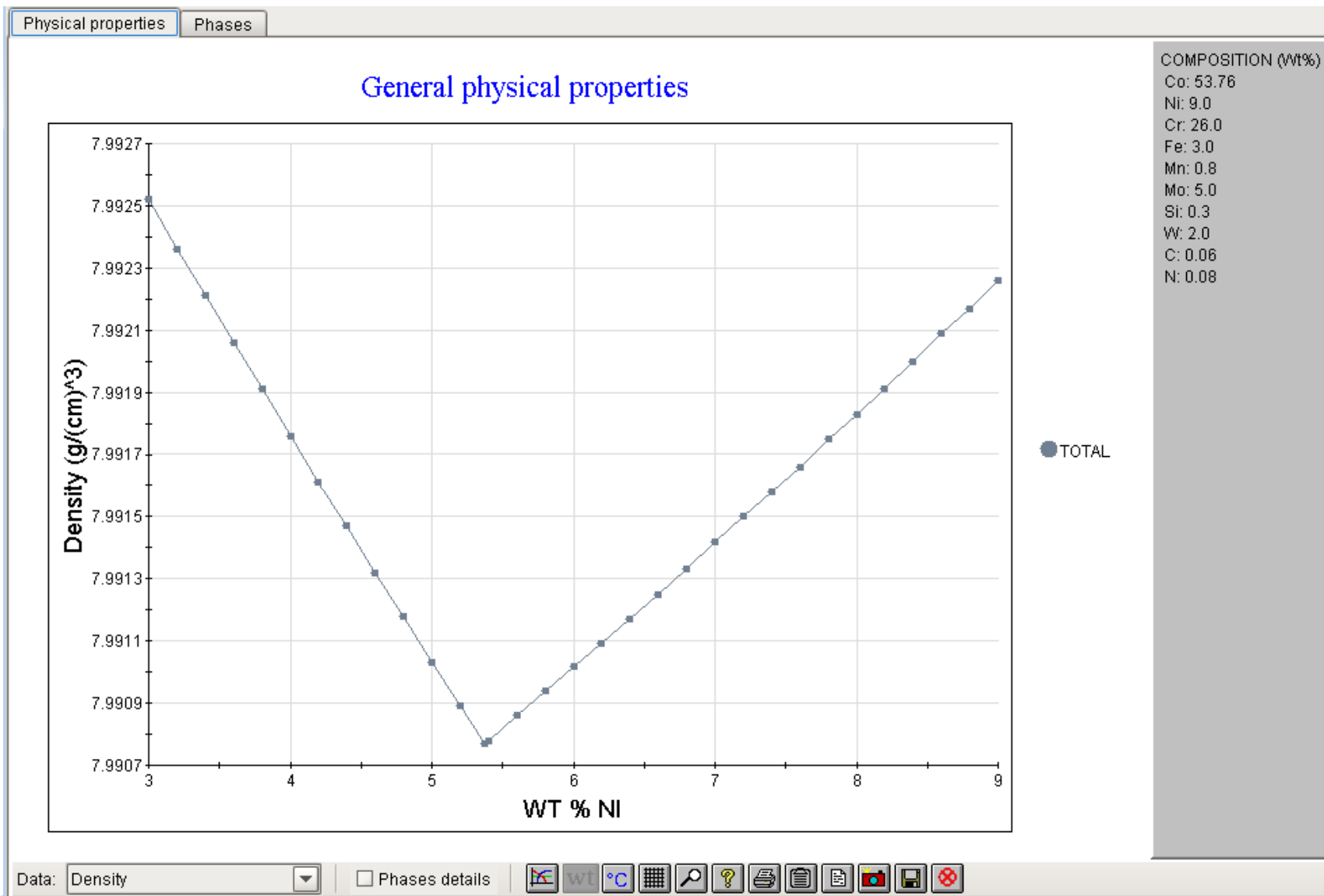
Composition range (%):
 Start: End: Step:

Haynes Ultimet

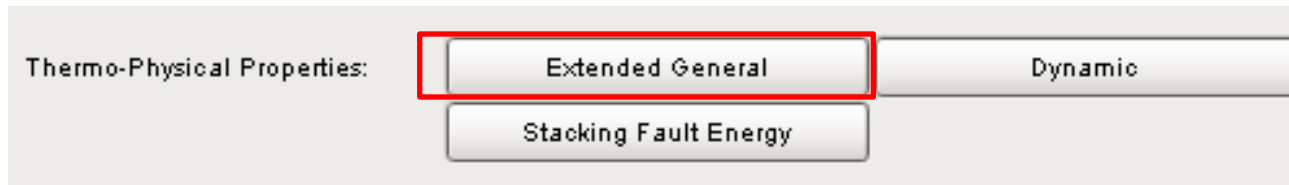
↗ 热力学计算

↖ 载入已经计算好的结果

计算结果



三.热物性能计算—2. Extended General



参数设置界面

	Wt %
Co	53.76
Al	0.0
Ni	9.0
Cr	26.0
Fe	3.0
Hf	0.0
Mn	0.8
Mo	5.0
Nb	0.0
Si	0.3
Ta	0.0
Ti	0.0
W	2.0
Zr	0.0

Cobalt Alloy

Thermo-Physical and Physical Properties

Temperatures (C)

Heat treatment:

Upper limit:

Step:

Phases

Take all phases into account

Heat treatment: 在此温度以下的相组成都与该温度时的相组成相同

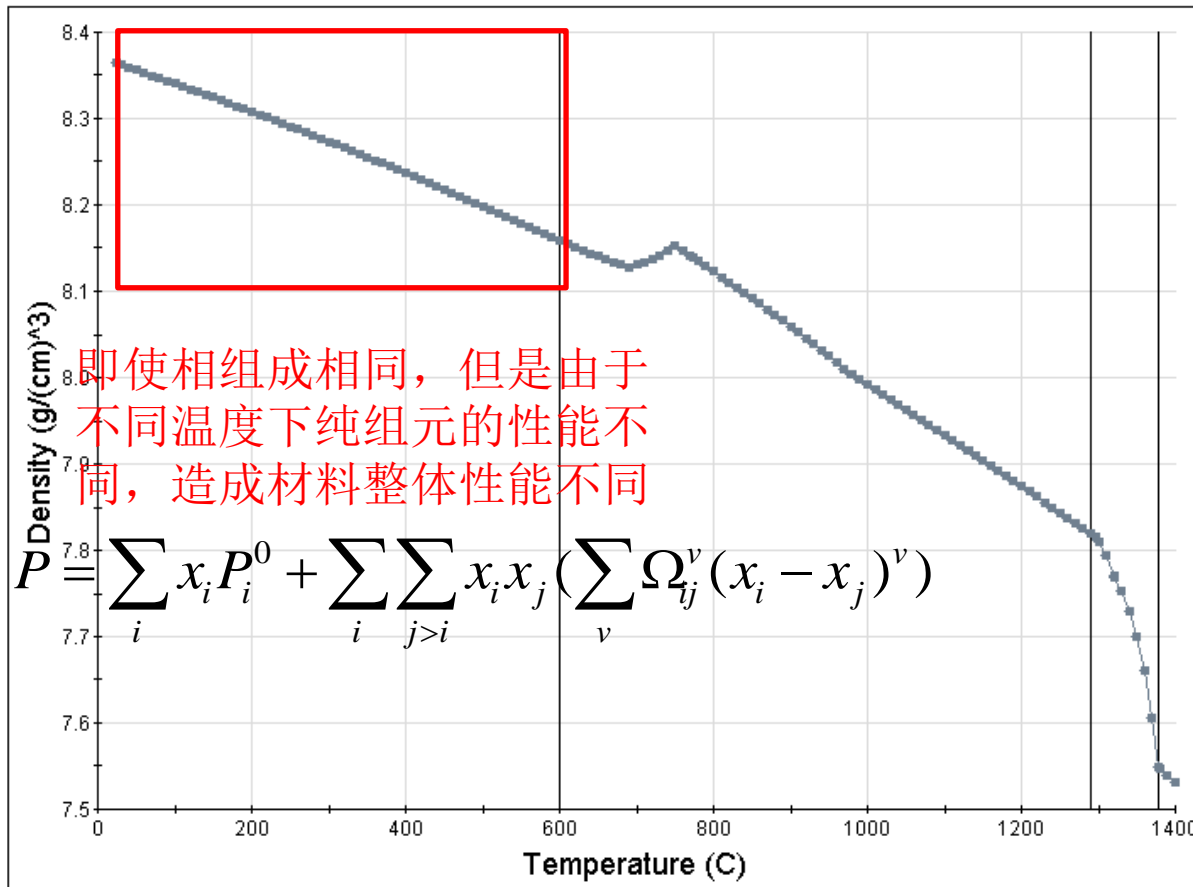
Upper limit: 设置最高温度，对于高于Heat treatment温度的温度下的相组成通过热力学计算

计算结果

Haynes Ultimet Physical properties

COMPOSITION (wt%)

Co:	53.76
Ni:	9.0
Cr:	26.0
Fe:	3.0
Mn:	0.8
Mo:	5.0
Si:	0.3
W:	2.0
C:	0.06
N:	0.08



● TOTAL

在相
相组

即使相组成相同，但是由于
不同温度下纯组元的性能不
同，造成材料整体性能不同

$$P = \sum_i x_i P_i^0 + \sum_i \sum_{j>i} x_i x_j \left(\sum_v \Omega_{ij}^v (x_i - x_j)^v \right)$$

Data: Density

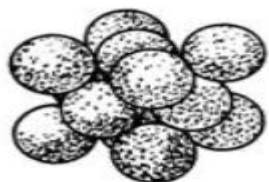


Phases details

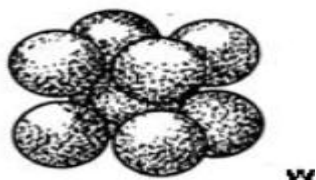


三.热物性能计算—3. Stacking Fault Energy

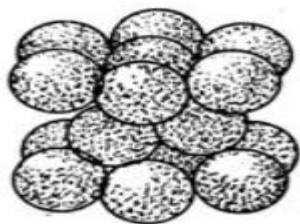
堆垛层错：实际晶体中，晶面堆垛顺序发生局部差错而产生的一种晶体缺陷



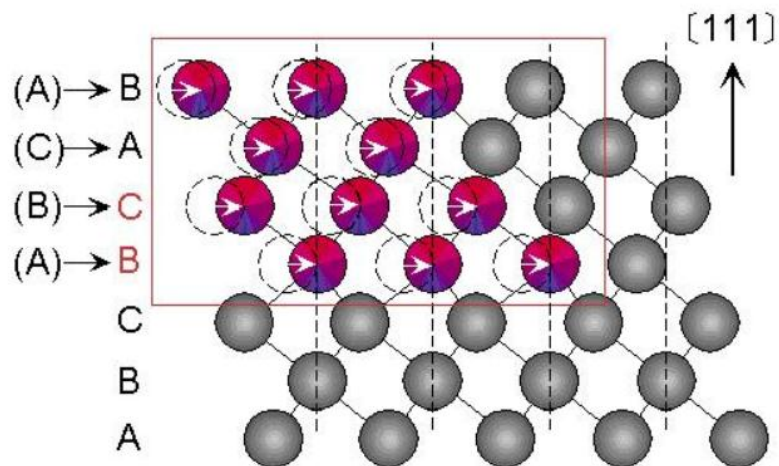
面心立方 (FCC)



体心立方 (BCC)



密排六方 (HCP)



堆垛顺序发生差错

参数设置界面

	Wt %
Co	53.76
Al	0.0
Ni	9.0
Cr	26.0
Fe	3.0
Hf	0.0
Mn	0.8
Mo	5.0
Nb	0.0
Si	0.3
Ta	0.0
Ti	0.0
W	2.0
Zr	0.0
B	0.0
C	0.06
N	0.08

Haynes Ultimet

Cobalt Alloy

Stacking Fault Energy

Heat treatment

Temperature T(C):

Phases included in the calculation

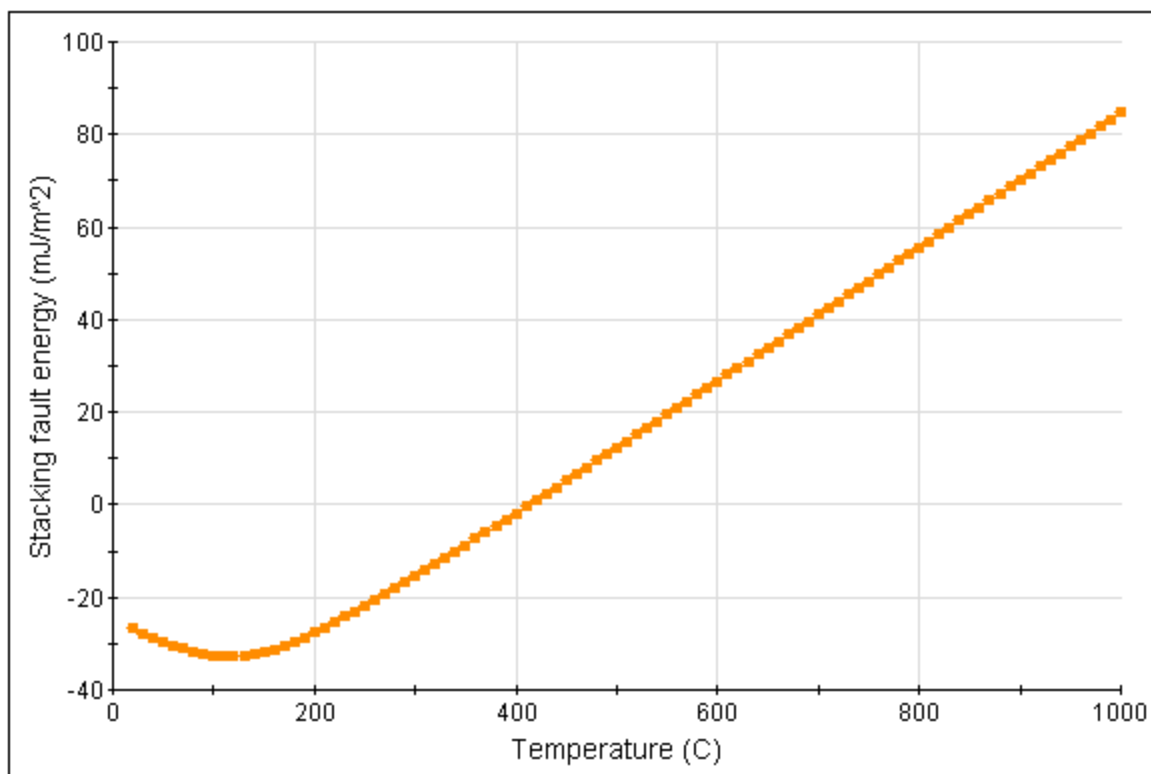
<input checked="" type="checkbox"/> LIQUID	<input checked="" type="checkbox"/> GAMMA	<input checked="" type="checkbox"/> GAMMA_PRIME
<input checked="" type="checkbox"/> NI2M	<input checked="" type="checkbox"/> ETA	<input checked="" type="checkbox"/> DELTA
<input type="checkbox"/> SIGMA	<input type="checkbox"/> MU	<input type="checkbox"/> LAVES
<input type="checkbox"/> P_PHASE	<input type="checkbox"/> R_PHASE	<input type="checkbox"/> G_PHASE
<input type="checkbox"/> NIMO	<input checked="" type="checkbox"/> COBALT_HCP	<input checked="" type="checkbox"/> MC
<input checked="" type="checkbox"/> MN	<input checked="" type="checkbox"/> M23C6	<input checked="" type="checkbox"/> M6C
<input checked="" type="checkbox"/> M7C3	<input checked="" type="checkbox"/> M2(C,N)	<input checked="" type="checkbox"/> M3B2
<input checked="" type="checkbox"/> MB2		

需要计算的温度上限
也是计算该温度下的
相组成

选择参与计算的相

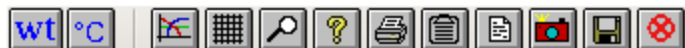
计算结果

Stacking Fault Energy



COMPOSITION (wt%)

Co: 51.0
Ni: 10.0
Cr: 20.0
Fe: 3.0
Mn: 0.7
Si: 0.2
W: 15.0
C: 0.1



更多资源请关注

中仿科技年会专栏:

<http://conference.cntech.com.cn>

中仿科技网络研讨会:

<http://webinar.cntech.com.cn>

中仿科技公开培训:

<http://training.cntech.com.cn>

中仿科技市场活动报名:

<http://seminar.cntech.com.cn>

中仿科技资源下载中心:

<http://down.cntech.com.cn>

中仿社区:

<http://i.cntech.com.cn>

中国视频教程网:

<http://www.cax.cn>

中国仿真互动:

<http://www.simwe.com>