



# Ni-Al 间作用势对 Ni<sub>75</sub>Al<sub>14</sub>Mo<sub>11</sub> 合金原子有序化影响的微观相场模拟

马庆爽, 靳玉春, 赵宇宏, 侯 华, 王欣然, 王 锟

(中北大学 材料科学与工程学院, 太原 030051)

**摘 要:** 采用三元微观相场动力学模型, 研究第一到第四层 Ni-Al 原子间作用势对 Ni<sub>75</sub>Al<sub>14</sub>Mo<sub>11</sub> 合金沉淀过程中原子有序行为及  $\gamma'$  相沉淀的影响。结果表明: 当第一层 Ni-Al 原子间作用势增大时, Al 和 Mo 有序化和簇聚的程度和速度增大; 当第二层 Ni-Al 原子间作用势增大时, Al 和 Mo 有序化和簇聚的程度和速度降低; 当第三层 Ni-Al 原子间作用势增大时, Al 和 Mo 的有序化和簇聚的程度和速度增大, 相比之下沉淀后期较大的原子间作用势对 Mo 的影响程度较小; 第四层 Ni-Al 原子间作用势对 Ni 和 Al 有序化和簇聚的影响与第二层原子间作用势的影响相同。第一、三层 Ni-Al 原子间作用势增大, 将促进  $\gamma'$  相的生成, 且  $\gamma'$  相体积分数增大, 而第二、四层原子间作用势对  $\gamma'$  相影响与第一、三层的影响效果则相反。

**关键词:** 微观相场; Ni<sub>75</sub>Al<sub>14</sub>Mo<sub>11</sub> 合金;  $\gamma'$  相; 沉淀

**中图分类号:** TG166.7

**文献标志码:** A

## Microscopic phase-field simulation for influence of Ni-Al interaction energy on ordering behavior of Ni<sub>75</sub>Al<sub>14</sub>Mo<sub>11</sub> alloy atoms

MA Qing-shuang, JIN Yu-chun, ZHAO Yu-hong, HOU Hua, WANG Xin-ran, WANG Kun

(College of Materials Science and Engineering, North University of China, Taiyuan 030051, China)

**Abstract:** The influence of Ni-Al interaction energy from the first layer to the fourth layer on the ordering behavior of Ni<sub>75</sub>Al<sub>14</sub>Mo<sub>11</sub> alloy atoms and the precipitation of  $\gamma'$  phase was investigated by the microscopic phase-field kinetic model. The results show that as the first Ni-Al interaction energy increases, the ordering and the clustering degree of Al and Mo atoms increase. As the second Ni-Al interaction energy increases, the ordering and the clustering degree of Al and Mo atoms decrease. As the third Ni-Al interaction energy increase, the degree and speed of the ordering and the clustering of Al and Mo atoms increase. Compared with the early process, the larger atomic interaction in the later precipitation process has less impact on the Mo atoms. And the influence of the fourth Ni-Al interaction energy is the same with the second one. The increase of the first and the third Ni-Al interaction energy promotes the generation of  $\gamma'$  phase, and the volume fraction increases, while the influences of the second and the fourth Ni-Al interatomic energy on  $\gamma'$  phase are contrast to those of the first and the third ones.

**Key words:** microscopic phase-field; Ni<sub>75</sub>Al<sub>14</sub>Mo<sub>11</sub> alloy;  $\gamma'$  phase; precipitation

镍基高温合金因其特殊的物理特性<sup>[1-3]</sup>是目前材料中高温强度最高且应用范围最广的一类合金, 也是工业上许多热端零部件的主要用材。 $\gamma'$ 相是该合金的

主要的析出强化相<sup>[4-5]</sup>, 它能提高合金的高温屈服强度。

原子间作用势决定原子间有序能, 是与电子密度、

**基金项目:** 国家国际科技合作专项项目(2011DFA50520); 国家自然科学基金资助项目(51204147, 51274175); 山西省回国留学人员科研资助项目(2011-重点6, 2013-81); 山西省国际科技合作项目(2013081017, 2012081013)

**收稿日期:** 2014-10-13; **修订日期:** 2015-02-10

**通信作者:** 赵宇宏, 教授, 博士; 电话: 15035172958; E-mail: zyh388@sina.com

温度、电场强度等参数有关的变量,且原子间作用势随外加势场的变化趋势较为复杂。原子间作用势的变化可间接研究外场(电场、磁场等)对合金沉淀的影响。WANG 等<sup>[6]</sup>采用相场法研究发现,随 Mo 含量的升高, Ni-Al-Mo 合金中  $\gamma'$  沉淀相形貌由立方形转变为球形且粗化速率降低。赵宇宏等<sup>[7]</sup>研究了 Ni-Mo 四近邻作用能对 Ni<sub>75</sub>Al<sub>14</sub>Mo<sub>11</sub> 合金沉淀行为的影响,发现一、三层 Ni-Mo 原子间作用能增加,促进该合金早期沉淀相的有序化和簇聚,而二、四层作用相反。王永欣等<sup>[8]</sup>编制了引入原子间相互作用能变化的 Al<sub>3</sub>Li( $\delta'$ )相沉淀原子层面计算机模拟程序,开展了原子间相互作用势对原子图像、序参数影响的计算机模拟,探明随最近邻原子间作用势  $W_1$  的增大,有序相沉淀的孕育期缩短,形核率增加,合金有序化速度和原子簇聚速度加快。DONG 等<sup>[9]</sup>用微观相场法结合自由能和原子间作用势研究了 Ni<sub>0.75</sub>Al<sub>0.05</sub>Fe<sub>0.2</sub> 合金在 1000 K 时效中沉淀前期的析出相的形成和转变过程,发现 L1<sub>0</sub> 相转变为 L1<sub>2</sub> 相的过程与自由能和原子间作用势有关。赵彦等<sup>[10-11]</sup>使用微观相场法研究了有序能对 Ni-Cr-Al 合金中 Cr 替代行为的影响,发现不同近邻原子间有序能会改变 Cr 在  $\gamma'$  中  $\alpha$  和  $\beta$  的占位几率。甄辉辉等<sup>[12]</sup>和徐聪等<sup>[13]</sup>模拟了不同合金体系在不同原子间相互作用势下的沉淀行为。温玉锋等<sup>[14]</sup>采用第一性原理研究了合金元素对 Ni<sub>3</sub>Al (010)面反相畴界能的影响,优先占据 Ni<sub>3</sub>Al 铝亚点阵位置的合金元素 Ti、Mo、Ta、W 和 Re 则会增大 Ni<sub>3</sub>Al(010)面的反相畴界能。然而,目前对 Ni-Al-Mo 合金体系的研究较少,且关于 Ni-Al 原子间作用势对 Ni<sub>75</sub>Al<sub>14</sub>Mo<sub>11</sub> 合金相沉淀及原子有序行为影响的研究还未见报道。

因此,考虑到研究外势场对原子有序行为影响的重要性,本文作者通过三元微观相场模型,研究了 Ni<sub>75</sub>Al<sub>14</sub>Mo<sub>11</sub> 合金在 1 073 K 时效过程中原子间作用势对 Al、Mo 原子有序化和簇聚及  $\gamma'$  相沉淀过程的影响和规律。

## 1 微观相场动力学模型

微观相场方程由 KHACHATURYAN<sup>[15]</sup>创建,实际上是 Cahn-Hilliard 方程的离散形式,后由 PODURI 等<sup>[16]</sup>和 CHEN<sup>[17]</sup>对其作了更进一步的研究。微观相场方程是以各溶质原子在晶格位置的占位几率为基本变量来描述沉淀过程原子组态和相形貌。用  $P(r, t)$  代表原子在  $t$  时刻和格点位置  $r$  上的占位几率。对于三元体系,设  $P_A(r, t)$ 、 $P_B(r, t)$ 、 $P_C(r, t)$  分别是 A、B 和

C 原子在  $t$  时刻、占据格点位置  $r$  的几率,由于

$$P_A(r, t) + P_B(r, t) + P_C(r, t) = 1 \quad (1)$$

所以每个格点上只有两个方程是独立的。假设以 A 原子和 B 原子的占位几率为两个独立变量,微扩散方程为

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dP_A(r, t)}{dt} = \frac{1}{k_B T} \cdot \\ \quad \sum_{r'} \left[ L_{AA}(r-r') \frac{\partial F}{\partial P_A(r', t)} + L_{AB}(r-r') \frac{\partial F}{\partial P_B(r', t)} \right] \\ \frac{dP_B(r, t)}{dt} = \frac{1}{k_B T} \cdot \\ \quad \sum_{r'} \left[ L_{BA}(r-r') \frac{\partial F}{\partial P_A(r', t)} + L_{BB}(r-r') \frac{\partial F}{\partial P_B(r', t)} \right] \end{array} \right. \quad (2)$$

式中:  $L_{\alpha\beta}(r-r')$  是单位时间内,与一对  $\alpha$  和  $\beta$  原子在格点位置  $r$  和  $r'$  上的交换几率有关的常数,  $\alpha$  为 A、B 或 C;  $\beta$  为 A、B 或 C;  $F$  为体系的总自由能。为描述形核过程,可对式(2)添加热起伏项  $\xi(k, t)$ 。

在平均场近似下,由于  $P_C(r, t) = 1 - P_A(r, t) - P_B(r, t)$ ,并忽略掉与单个格点占有几率函数的不均匀分布无关的项,自由能公式为

$$F = -\frac{1}{2} \sum_r \sum_{r'} [-V_{AB}(r-r') + V_{BC}(r-r') + V_{AC}(r-r') P_A(r) P_B(r') + V_{AC}(r-r') P_A(r) P_A(r') + V_{BC}(r-r') P_B(r) P_B(r')] + k_B T \sum_r [P_A(r) \ln(P_A(r)) + P_B(r) \ln(P_B(r)) + (1 - P_A(r) - P_B(r)) \cdot \ln(1 - P_A(r) - P_B(r))] \quad (3)$$

式中:  $V_{\alpha\beta}(r-r')$  为原子间有效作用能。采用四近邻原子间作用近似,设  $V_{\alpha\beta}^1$ 、 $V_{\alpha\beta}^2$ 、 $V_{\alpha\beta}^3$ 、 $V_{\alpha\beta}^4$  分别表示第一、第二、第三、第四近邻原子间相互作用能,则有

$$V_{\alpha\beta}(k) = 4V_{\alpha\beta}^1 (\cos \pi h \cdot \cos \pi k + \cos \pi h \cdot \cos \pi l + \cos \pi k \cdot \cos \pi l) + 2V_{\alpha\beta}^2 (\cos 2\pi h + 2 \cos \pi k + 2 \cos \pi l) + 8V_{\alpha\beta}^3 (\cos 2\pi h \cdot \cos \pi k \cdot \cos \pi l + \cos \pi h \cdot \cos 2\pi k \cdot \cos \pi l + \cos \pi h \cdot \cos \pi k \cdot \cos 2\pi l) + 4V_{\alpha\beta}^4 (\cos 2\pi h \cdot \cos 2\pi k + \cos 2\pi h \cdot \cos 2\pi l + \cos 2\pi k \cdot \cos 2\pi l) \quad (4)$$

在平均场作用下,可以从长程有序角度描述原子形成超结构的过程。对每个格点最近邻和次近邻的原子占位几率进行平均,可求得成分序参数;由格点原

子占位几率同样可求出长程序参数, 其数学表达式如式(5)所示:

$$\eta(i, j) = \frac{P(i, j) - C(i, j)}{C(i, j) \cdot \cos((i + j)\pi)} \quad (5)$$

式中:  $\eta(i, j)$  为坐标为  $(i, j)$  处的长程序参数;  $P(i, j)$  为溶质原子占位几率;  $C(i, j)$  为成分序参数。

## 2 模拟结果与分析

模拟采用微观相场动力学模型, 时效温度为 1073 K, 模拟步长为  $2 \times 10^{-6}$ , 模拟步数代替真实时间, Ni-Al 第一、二、三、四层原子间作用势分别  $\pm 5$  meV 进行研究。

### 2.1 1073 K 时效过程中的原子占位演化图

图 1 所示为 FCC 的空间三维结构及其在(010)面的二维投影。其中图 1(a)和(b)分别为平衡  $\text{Ni}_3\text{Al}$  相的晶体结构示意图及其在[010]方向上的二维投影, 图 1(c)所示为其非化学计量比有序相在[010]方向上的二维投影。圆圈的颜色代表溶质 Al 原子的占位几率, 占位几率越大, 圆圈的灰度显示就越深。

图 2 所示为 1073 K 时  $\text{Ni}_{75}\text{Al}_{14}\text{Mo}_{11}$  合金在不同模拟步数下沉淀时原子占位的演化图像。从图 2 可以看到, 在 8400 步时, 基体中开始出现一些有序化区域(见图 2(a)中圆圈标注区域); 随着时间的推移, 有序化区域逐渐形成有序相, 并且在该有序相内由非化学计量

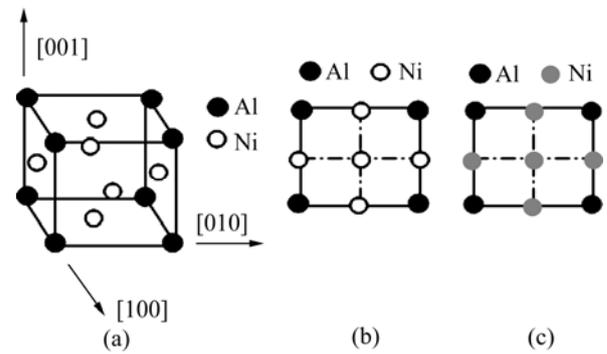


图 1  $\gamma'$  相的三维结构示意图及其在[010]方向上的二维投影和非化学计量比  $\gamma'$  相示意图

Fig. 1 3D structure of  $\gamma'$  ordering phase(a), 2D structure along [010] projection(b) and nonstoichiometric  $\gamma'$  ordering phase(c)

比有序相朝着化学计量比有序相方向演化(见图 2(b)); 在 25000 步时有序相颗粒变得多且清晰进入粗化阶段(见图 2(c)); 随畴界能的减小, 有序相颗粒发生碰撞、融合, 较大的颗粒长大, 较小的颗粒消失(见图 2(d)和(e)); 随后镍原子开始从沉淀相中反向析出且逐渐粗化, 使得有序相间的界面变宽, 最终完成相形貌的演化(见图 2(f))。

### 2.2 Ni-Al 原子间作用势对 Al 原子有序化和簇聚的影响

在微观相场模型和有序度分析基础之上, 引入对 Al 原子有序化过程的讨论。图 3 所示为 Ni-Al 第一到四层原子间作用势对 Al 原子有序化和簇聚的影响。其

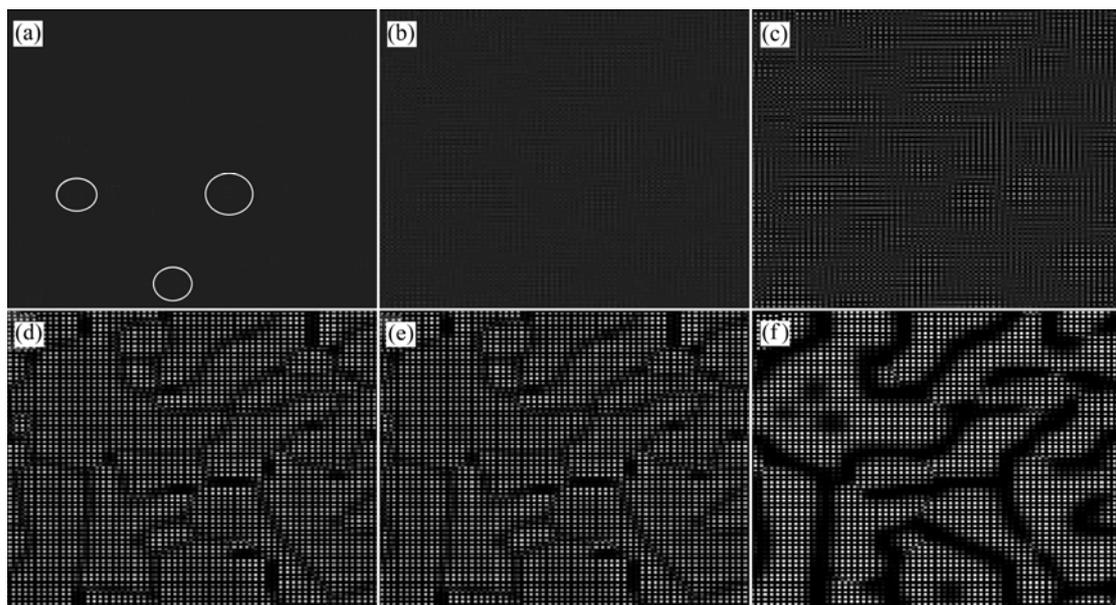


图 2 1073 K 时  $\text{Ni}_{75}\text{Al}_{14}\text{Mo}_{11}$  合金在不同模拟步数下沉淀时原子占位的演化图像

Fig. 2 Atomic figures of microstructure evolution of  $\text{Ni}_{75}\text{Al}_{14}\text{Mo}_{11}$  alloy at different simulation steps at 1073 K: (a)  $t=8400$ ; (b)  $t=20000$ ; (c)  $t=25000$ ; (d)  $t=40000$ ; (e)  $t=77000$ ; (f)  $t=500000$

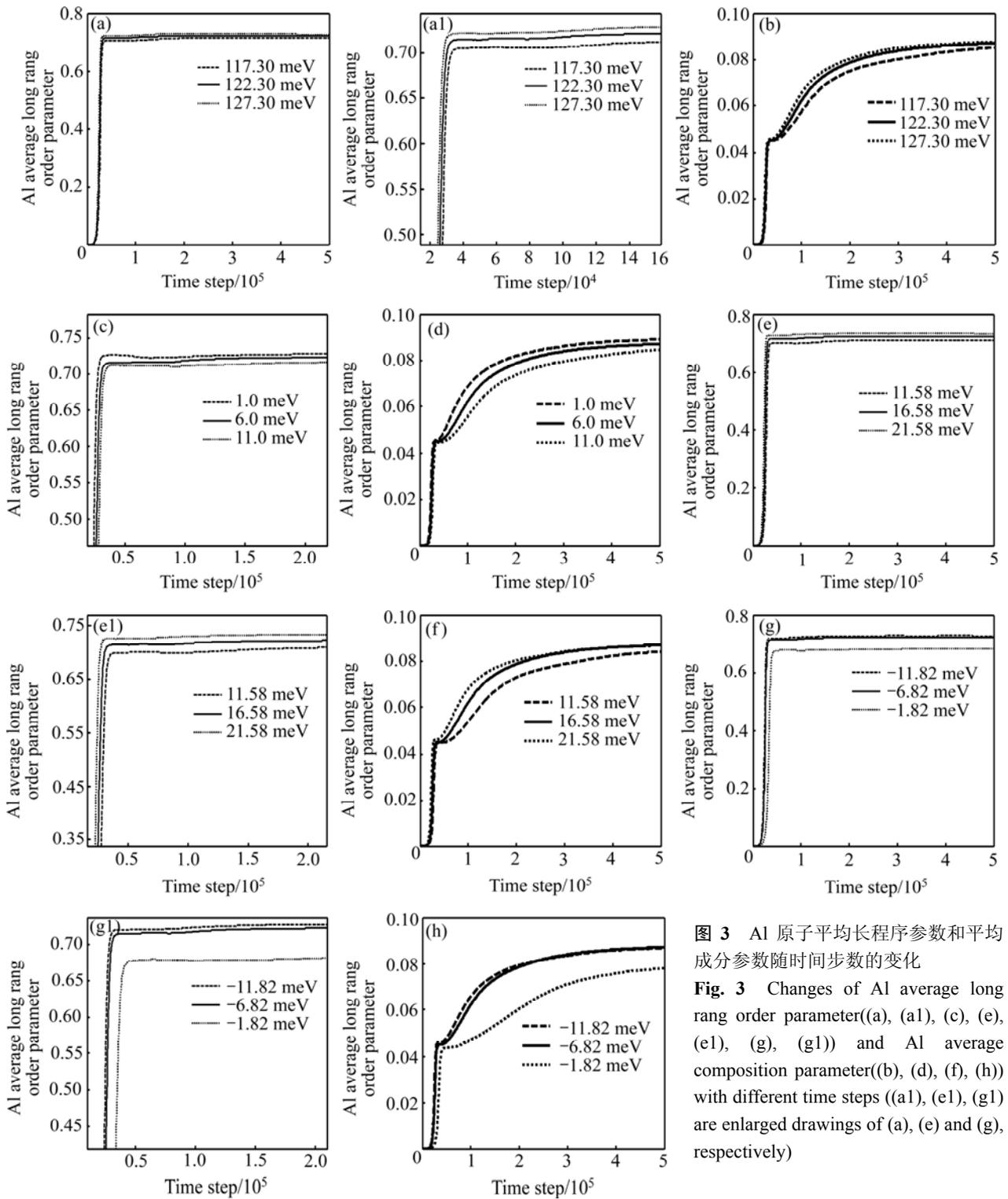


图 3 Al 原子平均长程序参数和平均成分参数随时间步数的变化  
**Fig. 3** Changes of Al average long rang order parameter((a), (a1), (c), (e), (e1), (g), (g1)) and Al average composition parameter((b), (d), (f), (h)) with different time steps ((a1), (e1), (g1) are enlarged drawings of (a), (e) and (g), respectively)

中, 图 3(a1), (e1)和(g1)所示分别是图 3(a), (e)和(g)的局部放大图。从图 3((a), (a1), (b), (e), (e1), (f))中可看到, 第一, 三层 Ni-Al 间作用势增大, 促进了 Al 原子的有序化与簇聚的程度和速度; 但在后期, 一、三层原子间作用势的增大对 Al 原子的簇聚影响不大; 从图 3((c), (d), (g), (h))看出, 第二、四层原子间作用势增大, 同时抑制了 Al 原子的有序化和簇聚, 相比

之下, 第二、四层原子间作用势对二者的影响程度更大。由于 Ni-Al 合金系沉淀过程中析出 Ni<sub>3</sub>Al 型 L<sub>12</sub> 有序相, Al 原子将占据 L<sub>12</sub> 结构的顶角位置来完成有序化行为, 从对沉淀机制的影响考虑, 基于 Al 原子有序化和簇聚的讨论, 当第二、四层原子间作用势增大时, 原子有序化和簇聚速度减慢, 推断出第二层 Ni-Al 间作用势的增大, 使得有序相的沉淀机制趋向于朝着

形核长大的趋势进行。随 Ni-Al 的第一、三层原子间作用势的增大, Al 原子的有序化和簇聚速度增大加快有序核心的形成, 这将有助于有序相以失稳分解的机制析出。说明原子间有序能的变化会引起有序相沉淀机制的变化。

### 2.3 Ni-Al 原子间作用势对 Mo 原子有序化和簇聚的影响

图 4 所示为 Mo 原子的平均长程序参数、平均成分序参数随时间的演化, 其中图 4(a1), (c1), (e1), (g1) 所示分别是图 4(a), (c), (e), (g) 的局部放大图。从图

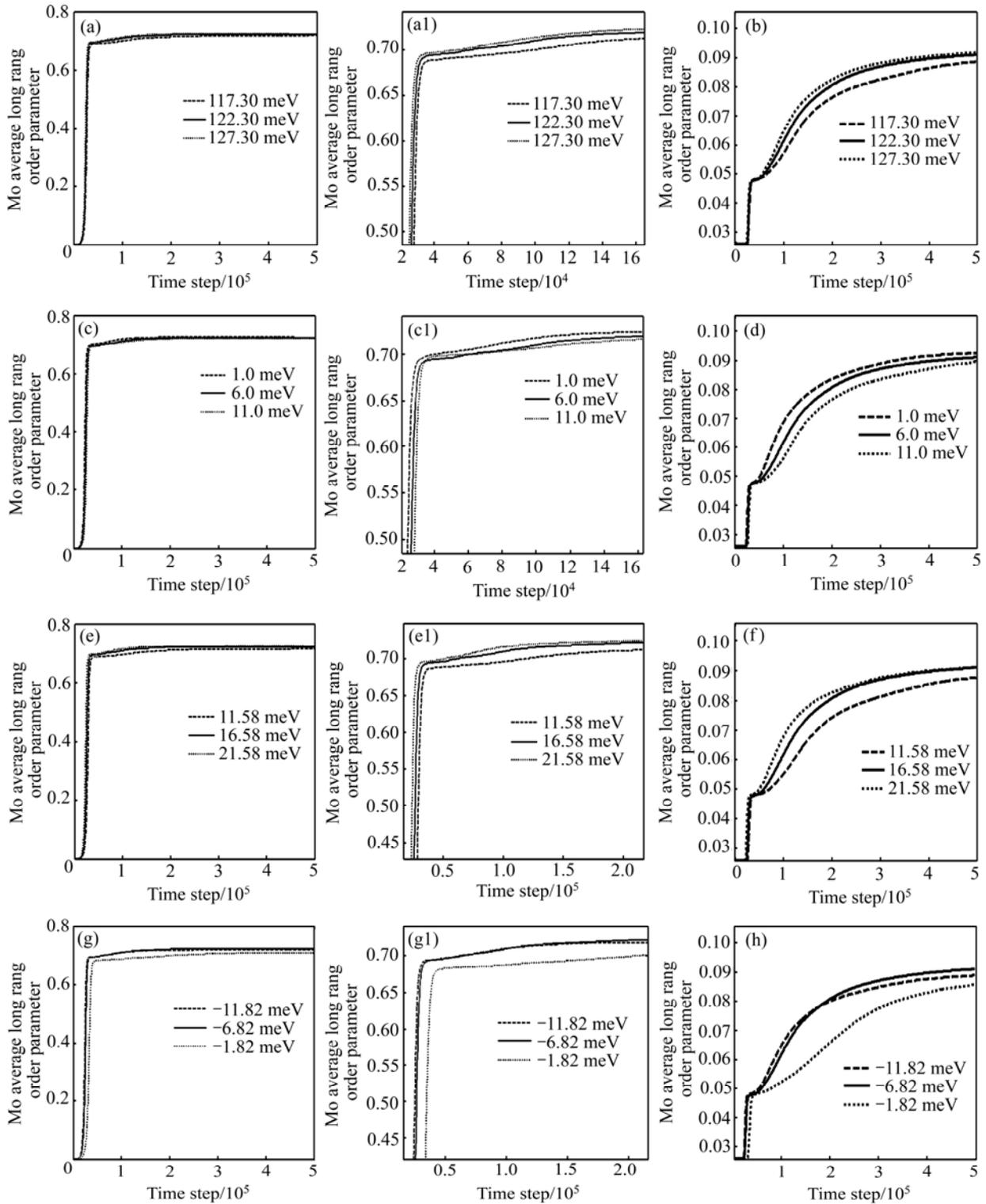


图 4 Mo 原子平均长程序参数和平均成分序参数随时间步数的变化

Fig. 4 Mo average long rang order parameter ((a), (c), (e), (g)) and Mo average composition order parameter((b), (d), (f), (h)) ((a1), (c1), (g1) are enlarged drawings of (a), (c) and (g), respectively)

4(a), (a1), (b)中可以看到随第一层 Ni-Al 间作用势的增大, Mo 原子的有序化和簇聚的程度和速度都增大。而随第二层 Ni-Al 间作用势的增大, Mo 原子的有序化和簇聚程度减小(见图 4(c), (c1), (d))。第三层 Ni-Al 间作用势的增大会增大 Mo 原子的有序化和簇聚的速度和程度, 但在时效后期, 较大的原子间作用势下原子的簇聚程度几乎不变(见图 4(e)~(f))。而第四层原子间作用势的增大使 Mo 的有序化和原子簇聚的程度和速度都减小(见图 4(g), (g1), (h))。杨东然等<sup>[18]</sup>研究也表明, 在 Ni-Al 合金系时效过程中 Mo 原子趋向于替代 Al 原子占据  $\beta$  位, 其主要通过替代 L1<sub>2</sub> 有序相中 Al 原子的位置达到有序化, 其本质上属于原子的有序化行为。故随时间变化, Mo 原子的有序度也增大。

#### 2.4 各层原子间作用势对 $\gamma'$ 相体积分数的影响

从图 5(a)和(c)可以清晰地看出, 第一、三层 Ni-Al 间作用势增大会促进  $\gamma'$  相的生成, 时间提前, 即孕育期缩短, 且最终体积分数增大; 相反, 第二、四层原子间作用势的增大会抑制  $\gamma'$  相的生成, 其孕育期增长, 且最终其体积分数减小(见图 5(b)和(d))。与第一层

Ni-Al 间作用势相比, 第三层 Ni-Al 间作用势增大使  $\gamma'$  相最终体积分数的增大幅度更大; 与第二层 Ni-Al 间作用势相比, 第四层原子间作用势的增大使  $\gamma'$  相最终体积分数的减小幅度更大。结合原子间作用势对 Al、Mo 有序化和簇聚的影响分析, 二者得到了一致的结论。第一、三层 Ni-Al 作用势增大, 促进了 Al、Mo 原子有序化和簇聚的速度和程度, 则在图 5(a)和 4(c)中表现为  $\gamma'$  相提前生成且体积分数增大。第二、四层原子间作用势的影响与第一、三层相反(见图 5(b)和 (d))。

#### 2.5 分析

本实验的结果与现象均是在模拟计算过程中得出的。第一、三层 Ni-Al 作用势增大, 促进了 Al、Mo 原子有序化和簇聚的速度和程度,  $\gamma'$  相提前生成且体积分数增大; 而第二、四层原子间作用势的影响与第一、三层相反。但在已查阅的相关文献中还未有关于此现象的全面理论分析, 故做以下讨论。原子间作用势决定原子间有序能, 由于微量元素的加入, 会改变 Ni<sub>3</sub>Al 的化学计量, 降低其有序能<sup>[19]</sup>。合金中的 Mo

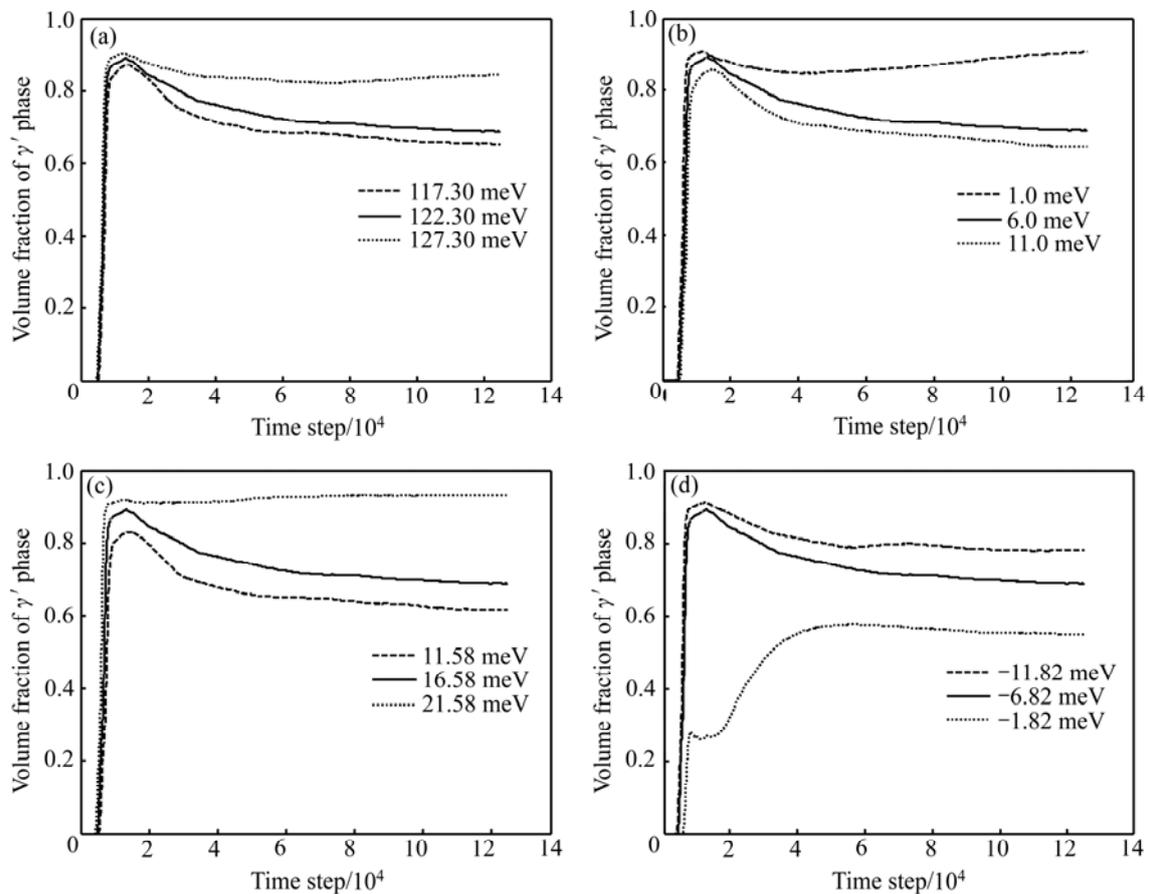


图 5 原子间作用势对  $\gamma'$  相体积分数的影响

Fig. 5 Effect of atomic interchange energy on volume fractions of  $\gamma'$  phase

可视为掺杂元素,该原子趋向于替代 Al 原子,当原子间作用势改变时会影响  $\gamma'$  相的有序能,从而出现实验中模拟出现的现象。

### 3 结论

1) 第一、三层 Ni-Al 间作用势增大将加速 Al 原子的有序化和簇聚,使  $\gamma'$  有序相的形核机制朝着失稳分解的趋势进行;第二、四层 Ni-Al 原子间作用势增大减弱 Al 原子的有序化和簇聚,使得有序相的形核机制朝着形核长大的趋势进行。

2) 当第一层 Ni-Al 间作用势的增大时, Mo 原子的有序化和簇聚的程度和速度都增大;而随第二层 Ni-Al 间作用势的增大, Mo 原子的有序化和簇聚程度减小;当第三层 Ni-Al 间作用势的增大时, Mo 原子的有序化和簇聚的速度和程度增大,但在后期,较大的原子间作用势下原子的簇聚程度几乎不变;而第四层原子间作用势的增大使 Mo 的有序化和原子簇聚的程度和速度都减小。

3) 第一、三层 Ni-Al 间作用势增大促进  $\gamma'$  相的生成,且其体积分数增大;而第二、四层原子间作用势对  $\gamma'$  相体积分数的影响与第一、三层的相反。

### REFERENCES

[1] ZHOU Peng-jie, YU Jin-jiang, SUN Xiao-feng, GUAN Heng-rong, HU Zhuang-qi. Roles of Zr and Y in cast microstructure of M951 nickel-based superalloy[J]. Transactions of Nonferrous Metals Society of China, 2012, 7(22): 1594-1598.

[2] SAVIN O V, STEPANOVA N N, AKSHENTSEV Y N, RODIONOV D P. Ordering kinetics in ternary Ni<sub>3</sub>Al-X alloys[J]. Scripta Materialia, 2001, 45(8): 883-888.

[3] CERMAK J, ROTHOVA V. Concentration dependence of ternary inter-diffusion coefficients in Ni<sub>3</sub>Al/Ni<sub>3</sub>Al-X couples with X=Cr, Fe, Nb and Ti[J]. Acta Materialia, 2003, 51(15): 4411-4421.

[4] HUANG Yan, WANG Lei, LIU Yang, FU Shun-ming, WU Jian-tao, YAN Ping. Microstructure evolution of a new directionally solidified Ni-based superalloy after long-term aging at 950 °C upto 1000 h[J]. Transactions of Nonferrous Metals Society of China, 2011, 10(21): 2199-2204.

[5] REN X D, ZHAN Q B, YUAN S Q, ZHOU J Z, WANG Y, REN N F, SUN G F, ZHENG L M, DAI F Z, YANG H M, DAI W J. A finite element analysis of thermal relaxation of residual stress in laser shock processing Ni-based alloy GH4169[J]. Materials and

Design, 2014, 54: 708-711.

[6] WANG T, SHENG G, LIU Z K. Coarsening kinetics of  $\gamma'$  precipitates in the Ni-Al-Mo system[J]. Acta Materialia, 2008, 56(19): 5544-5551.

[7] 赵宇宏, 侯 华, 任娟娜. Ni-Mo 四近邻作用能对对 Ni<sub>75</sub>Al<sub>14</sub>Mo<sub>11</sub> 合金沉淀行为影响的微观相场[J]. 中南大学学报(自然科学版), 2012, 43(8): 2964-2972.

ZHAO Yu-hong, HOU Hua, REN Juan-na. Microscopic phase-field simulation for influence of Ni-Mo fourth-nearest interaction energy on precipitation process of Ni<sub>75</sub>Al<sub>14</sub>Mo<sub>11</sub> alloy[J]. Journal of Central South University (Natural Science Edition), 2012, 43(8): 2964-2972.

[8] 王永欣, 陈 铮, 刘 兵, 马 良, 唐丽英, 赵宇宏.  $\delta'$  相在外场下早期沉淀机制的计算机模拟[J]. 中国有色金属学报, 2004, 14(2): 255-261.

WANG Yong-xin, CHEN Zheng, LIU Bing, MA Liang, TANG Li-ying, ZHAO Yu-hong. Computer simulation on precipitation of  $\delta'$  phase in early stage of external energy field[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2004, 14(2): 255-261.

[9] DONG Wei-ping, WANG Yong-xin, CHEN Zheng, YANG Kun. Ageing process of pre-precipitation phase in Ni<sub>0.75</sub>Al<sub>0.05</sub>Fe<sub>0.2</sub> alloy based on phase field method[J]. Transactions of Nonferrous Metals Society of China, 2011, 21(5): 1105-1111.

[10] 赵 彦, 陈 铮, 王永欣, 张利鹏, 张明义, 张 静. Ni-Al 有序能对 Ni<sub>75</sub>Al<sub>13</sub>Cr<sub>12</sub> 合金原子有序行为影响的微观相场模拟[J]. 稀有金属材料与工程, 2009, 38(5): 1756-1762.

ZHAO Yan, CHEN Zheng, WANG Yong-xin, ZHANG Li-peng, ZHANG Ming-yi, ZHANG Jing. Microscopic phase field simulation for the influence of Ni-Al ordering energy on ordering behavior of Ni<sub>75</sub>Al<sub>13</sub>Cr<sub>12</sub> alloy atoms[J]. Rare Metal Materials and Engineering, 2009, 38(5): 1756-1762.

[11] 赵 彦, 陈 铮, 王永欣, 霍进良, 张利鹏, 张明义. 有序能对 Ni<sub>75</sub>Al<sub>15</sub>Cr<sub>10</sub> 合金 Cr 替代行为影响的微观相场研究[J]. 金属学报, 2009, 45(5): 635-642.

ZHAO Yan, CHEN Zheng, WANG Yong-xin, ZHANG Li-peng, ZHANG Ming-yi. A microscopic phase-field study for the influence of ordering energy on Cr substitution behavior in Ni<sub>75</sub>Al<sub>15</sub>Cr<sub>10</sub> alloy[J]. Acta Metal Sin, 2009, 45(5): 635-642.

[12] 甄辉辉, 王永欣, 陈 铮, 张 静, 张明义, 霍进良. 四近邻对势对 Ni<sub>75</sub>Al<sub>5</sub>V<sub>20</sub> 合金沉淀机制影响的微观相场模拟[J]. 稀有金属材料与工程, 2009, 38(2): 286-290.

ZHEN Hui-hui, WANG Yong-xin, CHEN Zheng, ZHANG Jing, ZHANG Ming-yi, HUO Jin-liang. Microscopic phase-field simulation for the effect of the fourth-nearest pair potentials on precipitation mechanism of Ni<sub>75</sub>Al<sub>5</sub>V<sub>20</sub> alloy[J]. Rare Metal Materials and Engineering, 2009, 38(2): 286-290.

[13] 徐 聪, 陈 铮, 王永欣, 钟汉文, 孙立岩, 苗海川. 原子间相互作用能对 Ni<sub>75</sub>Al<sub>x</sub>V<sub>25-x</sub> 合金孕育期影响的微观相场模拟[J].

- 稀有金属材料与工程, 2009, 38(11): 1935–1939.
- XU Cong, CHEN Zheng, WANG Yong-xin, ZHONG Han-wen, SUN Li-yan, MIAO Hai-chuan, Phase-field simulation for the effect of atomic interchange energy on the incubation time of  $\text{Ni}_{75}\text{Al}_x\text{V}_{25-x}$  alloy[J]. Rare Metal Materials and Engineering, 2009, 38(11): 1935–1939.
- [14] 温玉锋, 孙 坚, 黄 健. 合金元素对  $\text{Ni}_3\text{Al}$  (010)面反相畴界能影响的第一性原理研究[J]. 中国有色金属学报, 2012, 22(2): 515–519.
- WEN Yu-feng, SUN Jian, HUANG Jian. First-principles study of influence of alloying elements on (010) antiphase boundary energy in  $\text{Ni}_3\text{Al}$ [J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2012, 22(2): 515–519.
- [15] KHACHATURYAN A G. Theory of structural transformations in solids[M]. New York: Wiley Press, 1983: 129.
- [16] PODURI R, CHEN L Q. Computer simulation of morphological evolution and coarsening of  $\text{Al}_3\text{Li}$  precipitates in Al-Li alloys[J]. Acta Materialia, 1998, 46(11): 3915–3928.
- [17] CHEN L Q. A computer simulation technique for spinodal decomposition and ordering in ternary system[J]. Scripta Metallurgical et Material, 1993, 29: 683–688.
- [18] 杨东然, 赵宇宏, 杨 玲, 侯 华.  $\text{Ni}_{75}\text{Al}_{14}\text{Mo}_{11}$  合金沉淀过程及其  $\gamma'$ 相原子占位的微观相场[J]. 材料热处理学报, 2014, 35(2): 193–198.
- YANG Dong-ran, ZHAO Yu-Hong, YANG Ling, HOU Hua. Microscopic phase-field simulation of precipitation process and atomic site occupation of  $\gamma'$  phase in  $\text{Ni}_{75}\text{Al}_{14}\text{Mo}_{11}$  alloy[J]. Transactions of Materials and Heat Treatment, 2014, 35(2): 193–198.
- [19] 梅炳初, 王为民, 袁 润.  $\text{Ni}_3\text{Al}$  的有序性、脆性及塑性[J]. 武汉工业大学学报, 1996, 18(1): 1–4.
- MEI Bing-chu, WANG Wei-min, YUAN Run. Ordering, brittleness and ductility of  $\text{Ni}_3\text{Al}$ [J]. Journal of Wuhan University of Industry, 1996, 18(1): 1–4.

(编辑 王 超)