



微观相场模拟弹性畸变能对 L₁₂ 相沉淀全过程的影响

郑晓娟, 赵宇宏, 侯 华, 靳玉春, 马庆爽, 田晋忠

(中北大学 材料科学与工程学院, 太原 030051)

摘 要: 基于微观相场法研究不同弹性畸变能对 Ni₇₅Al₅V₂₀ 合金中 L₁₂ 相沉淀过程的影响。结果表明: 虽然弹性畸变能不同, Ni₇₅Al₅V₂₀ 合金在温度为 1250 K 下沉淀时的显微组织演化过程都可大概分为 4 个阶段, 但也有不同之处; 在早期沉淀析出的 L₁₂ 相中, V 原子的占位要远大于 Al 原子的占位, 最终, 随着弹性畸变能的增大, 在 L₁₂ 相中 Al 原子的占位概率降低, V 原子的占位概率增大。在生成化学计量比的 L₁₂ 有序相时, Al 原子由 L₁₂ 相边界逐渐向其内部扩散, 而 V 原子则与之相反, 且各原子越靠近 L₁₂ 相的边界扩散速度越快, 反之越慢。

关键词: Ni₇₅Al₅V₂₀ 合金; 微观相场; 弹性畸变能; 占位概率; L₁₂ 相

文章编号: 1004-0609(2017)-10-2098-07

中图分类号: TG111.5

文献标志码: A

镍基合金被广泛应用在高温环境中^[1], 如在燃气涡轮发动机和航天先进发动机中发挥着很重要的作用^[2-4]。其中镍铝钒合金因其优越的高温性能而备受关注, 其相变过程的显微组织演化规律被广泛研究, 但通过实验手段难以分析沉淀的整个过程, 在以往的实验中大多只讨论了沉淀后期的沉淀相的调制结构形貌等现象^[5]。而计算机模拟具有其独特的优势, 是因为它可通过利用微观相场动力学模型处理合金沉淀过程中的高度非线性、高度非平衡状态等问题, 从而获得直观清晰的有序相原子层次的瞬态形貌。由于合金在沉淀时因应变时效状态不同及合金本身缺陷和造成的过饱和度的差异, 在沉淀早期就会有应变能的形成, 从而会对析出相的析出过程产生影响, 进而会直接影响到析出相的形核长大、组织形貌、数量分布原子扩散及其占位概率等^[6-8]。因此, 在研究镍基合金沉淀过程时, 通过温度与弹性畸变能的耦合进行模拟更加具有实际意义。

在以往的模拟中, 刘芳等^[6]和 LU 等^[9]研究过不同弹性畸变能、成分等对 L₁₂ 相和 DO₂₂ 相沉淀序列及其最终原子占位的影响; 陈引平等^[7]研究了弹性畸变能对 L₁₂ 相析出过程的影响。张明义等^[10-18]研究了在 Ni-Al-V 相变过程中 DO₂₂ 相中合金元素占位概率变化和 L₁₂ 相长大之间的联系, 以及 L₁₂ 相之间、DO₂₂ 相之间、L₁₂ 相与 DO₂₂ 相异相间的各原子的扩散规律。

以上只是重点分析了 L₁₂ 相在某一阶段的沉淀规律。因此, 本文作者研究了在弹性畸变能影响下 Ni₇₅Al₅V₂₀ 合金的 L₁₂ 相在整个沉淀过程中的沉淀规律。

1 微观相场法理论模型

在利用计算机模拟合金沉淀时所采用的三元微观相场模型是由 KHAUCHATURYAN 创建^[19], CHEN 等^[20-21]对此模型进行了补充和修改, 在三元合金体系下, 用 $P_A(r, t)$ 、 $P_B(r, t)$ 、 $P_C(r, t)$ 分别表示 A、B、C 原子在 t 时刻、占据晶格位置 r 的概率, 由于 $P_A(r, t) + P_B(r, t) + P_C(r, t) = 1$, 所以每个格点上只有两个方程是独立的。假设以 A 和 B 原子的占位概率为两个独立变量, 为了描述形核过程, 需要添加随机项来模拟热起伏, 使之成为随机方程, 即得到微观 Langevin 方程:

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

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(51774254, 51774253, 51701187, U1610123, 51574207, 51574206, 51574226); 山西省科技重大专项(MC2016-06)

收稿日期: 2016-08-15; **修订日期:** 2016-11-02

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

式中: $L_{\alpha\beta}(r-r')$ 是与单位时间内一对 α 和 β 原子在格点位置 r 和 r' 上的交换概率有关的常数(α 、 β =A、B 或 C); T 为温度; k_B 为波尔兹曼常数; F 为系统的总自由能; t 为时间; $\xi(r,t)$ 为热起伏项。

在平均场近似下, 系统的总自由能为

$$F = -\frac{1}{2} \sum_r \sum_{r'} \left[\begin{aligned} &V_{AB}(r-r')P_A(r)P_B(r') \\ &+ V_{BC}(r-r')P_B(r)P_C(r') \\ &+ V_{AC}(r-r')P_A(r)P_C(r') \end{aligned} \right] + k_B T \sum_r \left[\begin{aligned} &P_A(r) \ln(P_A(r)) \\ &+ P_B(r) \ln(P_B(r)) \\ &+ P_C(r) \ln(P_C(r)) \end{aligned} \right] \quad (2)$$

式中: $V_{\alpha\beta}(r-r')$ 为原子间有效作用能(α 、 β =A、B 或 C), 它由化学相互作用能 $V_{\alpha\beta}(r-r')_{ch}$ 、弹性相互作用能 $V_{\alpha\beta}(r-r')_{el}$ 组成。从而可获得倒易空间中的微扩散方程:

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{d\tilde{P}_A(k,t)}{dt} &= \frac{\tilde{L}_{AA}(k)}{k_B T} \left\{ \tilde{V}_{AC}(k) \tilde{P}_A(k,t) + \frac{1}{2} \left[-\tilde{V}_{AB}(k) + \tilde{V}_{BC}(k) + \tilde{V}_{AC}(k) \right] \tilde{P}_B(k,t) + k_B T \left[\ln \frac{P_A(r,t)}{1-P_A(r,t)-P_B(r,t)} \right]_k \right\} + \frac{\tilde{L}_{AB}(k)}{k_B T} \cdot \left\{ \tilde{V}_{BC}(k) \tilde{P}_B(k,t) + \frac{1}{2} \left[-\tilde{V}_{AB}(k) + \tilde{V}_{BC}(k) + \tilde{V}_{AC}(k) \right] \cdot \tilde{P}_A(k,t) + k_B T \left[\ln \frac{P_B(r,t)}{1-P_A(r,t)-P_B(r,t)} \right]_k \right\} + \xi(k,t) \\ \frac{d\tilde{P}_B(k,t)}{dt} &= \frac{\tilde{L}_{BA}(k)}{k_B T} \left\{ \tilde{V}_{AC}(k) \tilde{P}_A(k,t) + \frac{1}{2} \left[-\tilde{V}_{AB}(k) + \tilde{V}_{BC}(k) + \tilde{V}_{AC}(k) \right] \tilde{P}_B(k,t) + k_B T \left[\ln \frac{P_A(r,t)}{1-P_A(r,t)-P_B(r,t)} \right]_k \right\} + \frac{\tilde{L}_{BB}(k)}{k_B T} \cdot \left\{ \tilde{V}_{BC}(k) \tilde{P}_B(k,t) + \frac{1}{2} \left[-\tilde{V}_{AB}(k) + \tilde{V}_{BC}(k) + \tilde{V}_{AC}(k) \right] \cdot \tilde{P}_A(k,t) + k_B T \left[\ln \frac{P_B(r,t)}{1-P_A(r,t)-P_B(r,t)} \right]_k \right\} + \xi(k,t) \end{aligned} \right. \quad (3)$$

式中: $\left[\ln \frac{P_A(r,t)}{1-P_A(r,t)-P_B(r,t)} \right]_k$, $\left[\ln \frac{P_B(r,t)}{1-P_A(r,t)-P_B(r,t)} \right]_k$,

$V_{AB}(k)$, $V_{BC}(k)$, $V_{AC}(k)$ 分别是相应函数的傅立叶变换。

2 结果与讨论

Ni₇₅Al₅V₂₀ 合金在温度为 1250 K 下沉淀时位于 $\gamma'(\text{Ni}_3\text{Al}, \text{L}_{12}) + \theta(\text{Ni}_3\text{V}, \text{DO}_{22})$ 两相区, 因此在以下分别模拟的不同弹性畸变能($B=200, 400, 600, 800$)的沉淀过程中, L1₂ 相和 DO₂₂ 相均从无序基体中析出。在模拟时采用 128×128 格点, 以及在每个方向上都使用周期性边界条件, 无序过饱和固溶作为合金的初始状态, 时间步数 t 代表模拟时间, 其中时间步长 $\Delta t=0.0002$ 。在以下模拟得到的 Ni₇₅Al₅V₂₀ 合金显微组织演化图中, 以 Ni 原子作为黑色基体, Al 原子在某个点占位越高, 该格点灰度越高, 而 V 原子在某个格点占位越高, 则该格点白度越高。

在不同弹性畸变能下, Ni₇₅Al₅V₂₀ 合金沉淀时的原子演化过程类似, 因此, 如图 1 和 2 所示(图中数值为模拟的格点位置), 只选取了两组弹性畸变能($B=200$ 和 600)下的显微组织演化过程来进行分析。由图 1 和 2 可看出, 当 B 为 200 和 600 时, Ni₇₅Al₅V₂₀ 合金在沉淀过程中的显微组织演化均可大致分为 4 个阶段: 首先基体由无序状态转化为短程有序相(见图 1(a)和 2(a)); 然后是 L1₂ 相和 DO₂₂ 相由短程有序相转化或者由基体相直接转化而析出, 形成非化学计量比有序相(见图 1(b)和 2(b)); 再随着时间的演化, 在沉淀早期析出较多的 L1₂ 相部分转化为了 DO₂₂ 相(见图 1(c)和 2(c)); 最终 L1₂ 相和 DO₂₂ 相通过相互碰撞、融合而沿着[100]方向共同长大粗化, 形成了化学计量比有序相(见图 1(d)和 2(d))。不同弹性畸变能下的显微组织演化也有不同之处, 在 $B=200$ 时(见图 1(a)), 当 $t=8000$ 时, Ni₇₅Al₅V₂₀ 合金的短程有序相析出; 而 $B=600$ 时(见图 2(a)), 当 $t=5000$ 时, 其短程有序相就已析出。由此可见, 随着弹性畸变能的增加, 短程有序相提前析出。且由图 1 和 2 还可看到, 随着弹性畸变能的增加, L1₂ 相和 DO₂₂ 相从析出到粗化一直具有方向性(沿着[100]方向), 两相更加细化且形貌也更加规则, 趋于长方形。

为了更加清楚地了解不同弹性畸变能对 Ni₇₅Al₅V₂₀ 合金沉淀过程的影响, 对比了在不同弹性畸变能下 L1₂ 相和 DO₂₂ 相体积分数的变化。图 3 所示为 Ni₇₅Al₅V₂₀ 合金在不同弹性畸变能下的体积分数变化曲线。由图 3 可知, 在各个弹性畸变能下, L1₂ 相的体积分数先增加到一最大值, 然后降低, 向 DO₂₂ 相进行转化, 与以上模拟出的合金的显微组织演化过程相一致; 而 DO₂₂ 相的体积分数先快速增加, 后缓慢增加, 然后到达其平衡值, 其原因是当 DO₂₂ 相由基体直接析

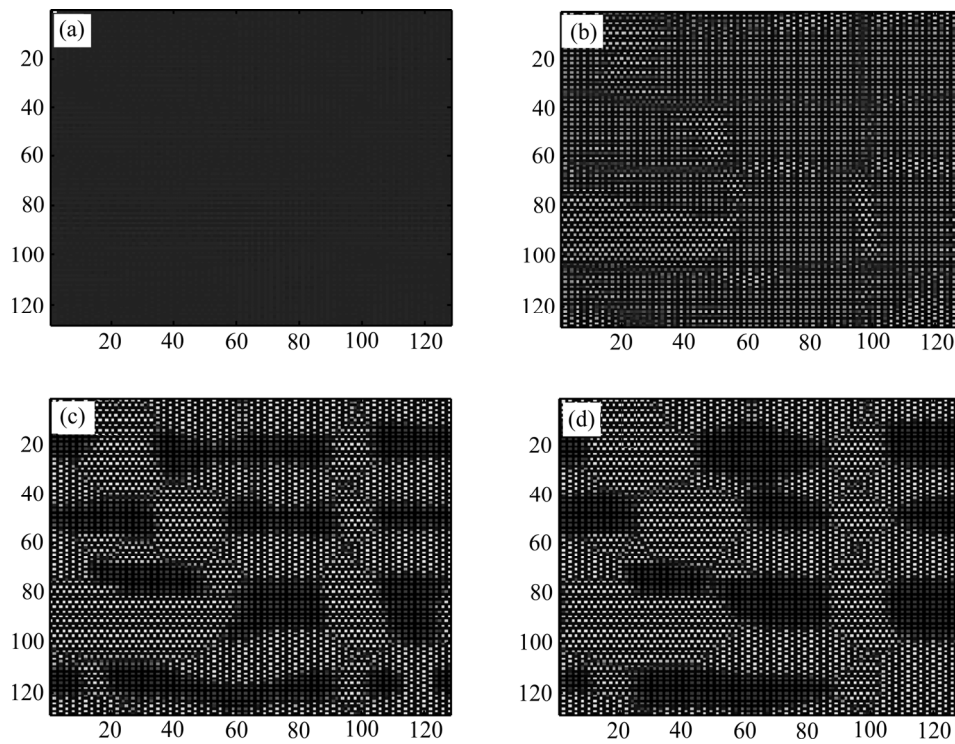


图1 温度为 1250 K 和 B 为 200 时 $\text{Ni}_{75}\text{Al}_5\text{V}_{20}$ 合金沉淀过程的微观组织演化过程

Fig. 1 Process of microscopic morphology evolution of alloy $\text{Ni}_{75}\text{Al}_5\text{V}_{20}$ at 1250 K and $B=200$: (a) $t=8000$; (b) $t=12500$; (c) $t=91500$; (d) $t=500000$

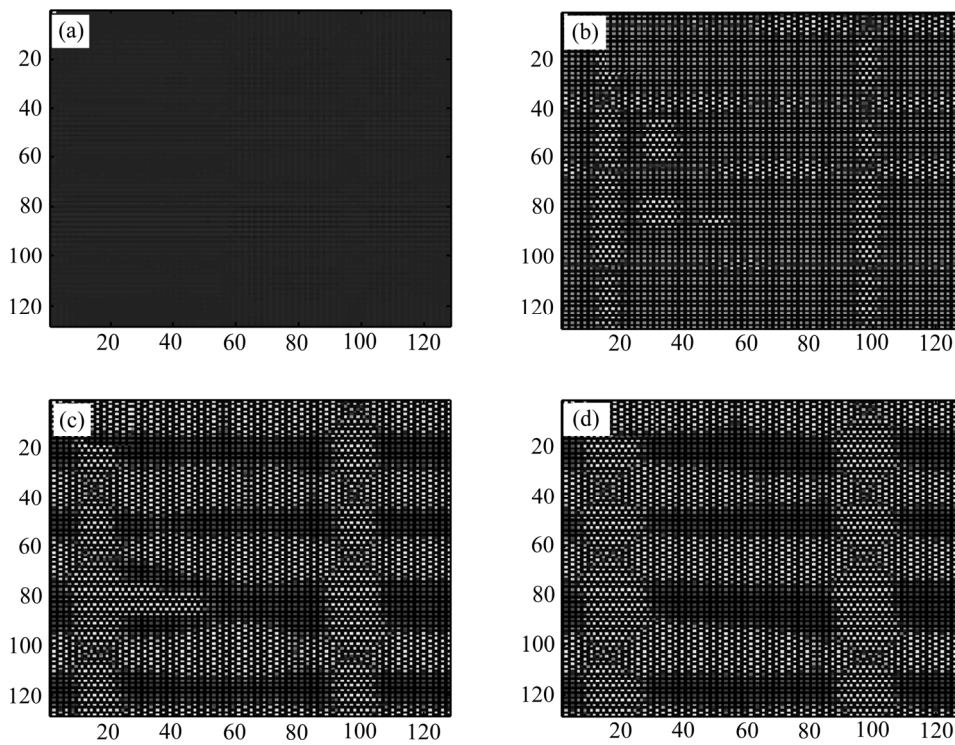


图2 温度为 1250 K 和 B 为 600 时 $\text{Ni}_{75}\text{Al}_5\text{V}_{20}$ 合金沉淀过程的微观组织演化过程

Fig. 2 Process of microscopic morphology evolution of $\text{Ni}_{75}\text{Al}_5\text{V}_{20}$ alloy at 1250 K and $B=600$: (a) $t=5000$; (b) $t=18500$; (c) $t=80000$; (d) $t=500000$

出时, 其沉淀速度较快, 而由 L_{12} 相进行转化时, 其沉淀速度较慢^[10]。通过对比图 3 中各个弹性畸变能下两相体积分数的变化可观察到, 随着弹性畸变能的增大, L_{12} 相和 DO_{22} 相的析出时间均越来越早, 即两相的孕育期缩短; L_{12} 相在早期沉淀中的析出量越来越多; L_{12} 相的最终析出量也是增多的, 而 DO_{22} 相最终析出量变化不大, 稍有减少。由此可见, 在 $Ni_{75}Al_5V_{20}$ 合金沉淀过程的整个中, 随着弹性畸变能的增加, 都有利于 L_{12} 相的析出。

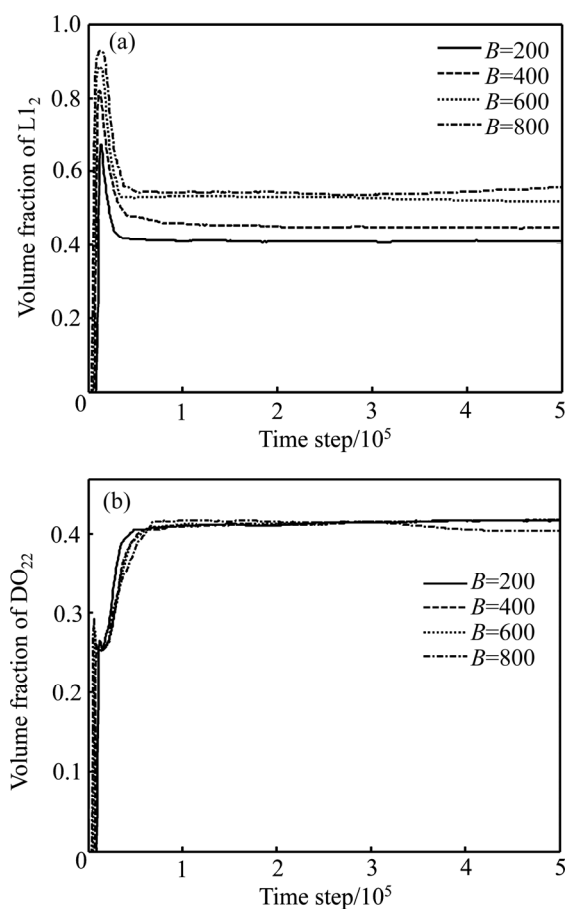


图 3 $Ni_{75}Al_5V_{20}$ 合金在不同弹性畸变能下的体积分变化曲线

Fig. 3 Volume fraction variation of L_{12} (a) and DO_{22} (b) phase of $Ni_{75}Al_5V_{20}$ alloy at different elastic strain energy

为了清楚地了解 $Ni_{75}Al_5V_{20}$ 合金的 L_{12} 相的早期扩散情况, 首先分析了在早期沉淀出的 L_{12} 相中 Al、V 原子由边界到中心的占位概率变化, 如图 4 格点 1 到格点 5、6 及格点 9 到格点 5、6 的曲线变化。由于在各个弹性畸变能下 Al、V 原子的占位变化趋势在早期沉淀出的 L_{12} 相中类似, 因此只分析了 $B=600$ 时 Al、V 原子在早期沉淀出的 L_{12} 相内扩散变化。

综合图 4(a)、图 4(b)可知, 在时间步数 $t=13500$

时, 在 L_{12} 相内, Al 原子的占位很小, 大约在 0.2 左右, 而 V 原子的占位较高, 大约在 0.64 左右, 由此可见, 在早期生成的 L_{12} 相内 V 原子占位较高。随着时间步数的增加, 当 $t=32000$ 时, Al 原子在越靠近 L_{12} 相的边界的地方占位较高, 内部占位较低, 而 V 原子与之相反, 其是在越靠近 L_{12} 相的边界的地方占位较低, 内部占位较高, 由此可见, 生成化学计量比的 L_{12} 相时, Al 原子从其边界向内扩散, 而 V 原子是从其内部向边界扩散。还可观察到在 Al、V 原子在 L_{12} 相边界扩散较快, 而越接近内部, 它们的扩散速度越慢, 这是因为溶质原子在相边界的扩散速度比相内要快。当时间步数增加到 46000 时, 由于随着溶质原子的扩散, L_{12} 相内部与边界浓度差减小, 使得相变驱动力减小, Al、V 原子的扩散速度降低, 从而它们的扩散曲线的斜率降低, 但扩散趋势与 $t=32000$ 时类似。再随着时间步数的增加, Al、V 原子的扩散速度更加缓慢, 且由于 Al 原子扩散到了 L_{12} 相内部, V 原子扩散

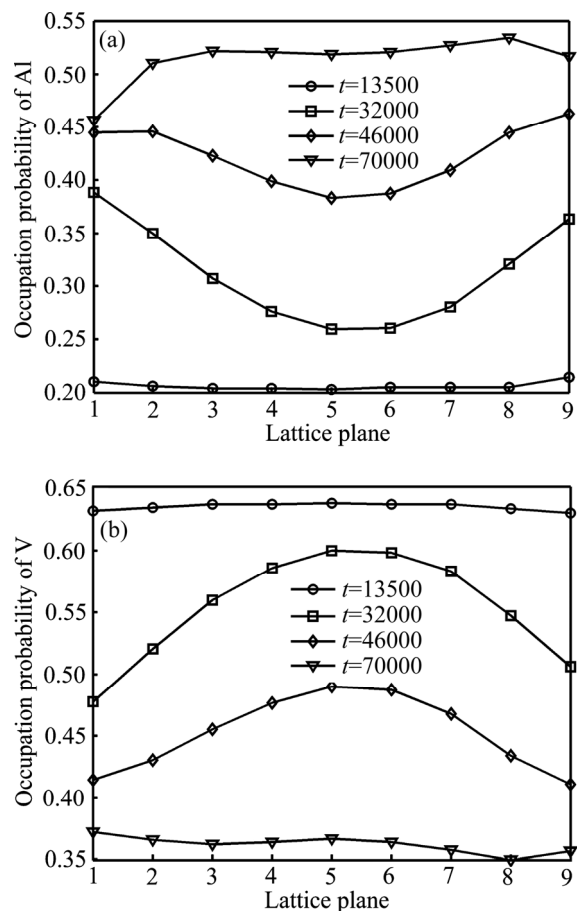


图 4 $Ni_{75}Al_5V_{20}$ 合金在 $B=600$ 时早期沉淀出的 L_{12} 相内 Al 原子与 V 原子的占位变化

Fig. 4 Occupation probability evolution of Al atom(a) and V atom(b) in L_{12} phase when early precipitation in $Ni_{75}Al_5V_{20}$ alloy at $B=600$

到了 L_{12} 相外部即 DO_{22} 相内, 如 $t=70000$ 时, Al 原子在最靠近 L_{12} 相的边界处的占位概率小于内部, 而 V 原子与之相反。

图 5 所示为 Al、V 原子在整个沉淀过程占位概率变化, 结果与图 4 所示一致, 在早期的沉淀出的 L_{12} 相内 V 原子占位较大; 而随着时间的演化 Al 原子的占位概率逐渐升高, V 原子的占位概率逐渐下降; 最终 Al、V 原子的扩散均达到了各自的动态平衡状态, 且 V 原子在 L_{12} 相内有一定的占位。综合图 5(a)和(b)可知, 随着弹性畸变能的增大, Al 原子的占位概率降低, V 原子的占位概率增大。结合以上关于 L_{12} 相和 DO_{22} 相体积分数的分析可知, 弹性畸变能增大, L_{12} 相的体积分数增多, Al 原子需要为多余的 L_{12} 相提供溶质原子, 因此 Al 原子在 L_{12} 相的占位下降; 而 DO_{22} 相与 L_{12} 相相反, 随弹性畸变能增大, DO_{22} 相的体积分数稍有减少, 因此 V 原子有较多的剩余, 最终 V 原子在 L_{12} 相的占位有所上升。

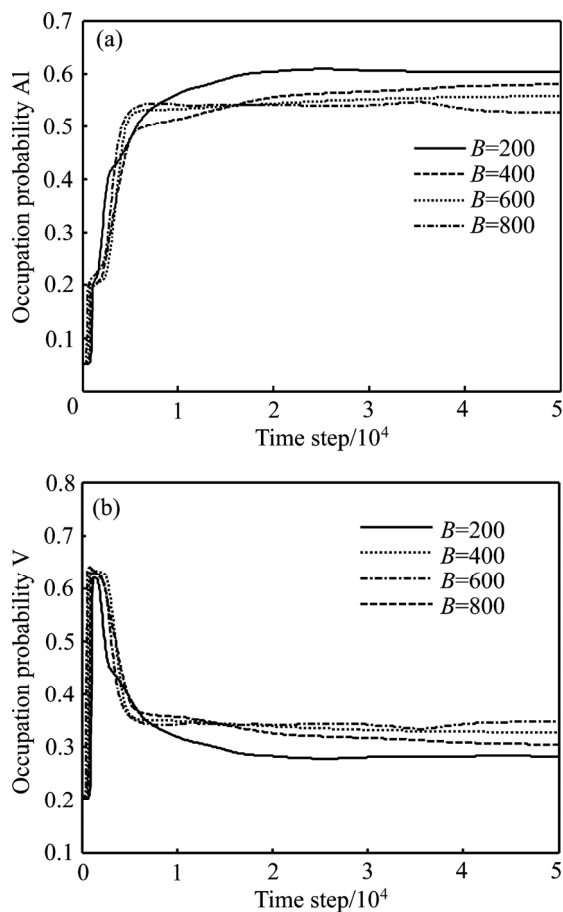


图 5 $Ni_{75}Al_5V_{20}$ 合金不同弹性畸变能下 L_{12} 相中 Al 原子与 V 原子的占位概率变化

Fig. 5 Variation of atomic occupation probability in L_{12} phase Al atom(a) and V atom(b) of $Ni_{75}Al_5V_{20}$ alloy at different elastic strain energy

3 结论

1) 当温度为 1250 K、不同弹性畸变能时, $Ni_{75}Al_5V_{20}$ 合金沉淀过程的显微组织演化过程都可大致分为 4 个阶段: 无序基体→短程有序相析出→ L_{12} 相和 DO_{22} 相由短程有序相转化或者由基体相直接转化而析出→部分 L_{12} 相转化为 DO_{22} 相→ L_{12} 相和 DO_{22} 相沿着[100]方向共同长大粗化。

2) 随着弹性畸变能的增大, 合金的孕育期缩短, L_{12} 相和 DO_{22} 相从析出到粗化一直具有方向性, 两相更加细化且形状也更加规则, 趋于长方形; 而且在沉淀过程的整个过程中都有利于 L_{12} 相的析出, 而对 DO_{22} 相的析出量影响不大。

3) 当弹性畸变能存在时, 在早期沉淀析出的 L_{12} 相中, V 原子的占位要远大于 Al 原子的占位概率; 随着时间的演化, Al 原子的占位概率逐渐升高, V 原子的占位概率逐渐降低, 最终均达到各自的平衡状态, 且 V 原子在 L_{12} 相中也有一定的占位。随着弹性畸变能的增大, 在 L_{12} 相中 Al 原子的占位概率降低, V 原子的占位概率下降。

4) 在生成化学计量比的 L_{12} 有序相时, Al 原子由 L_{12} 相边界逐渐向其内部扩散, 而 V 原子则由其内部向边界扩散。各原子越靠近在 L_{12} 相的边界扩散速度越快, 反之, 扩散速度越慢。

REFERENCES

- [1] REN X D, ZHAN Q B, YUAN S, 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.
- [2] JIANG R, EVERITT S, LEWANDOWSKI M, GAO N, REED P A. Grain size effects in a Ni-based turbine disc alloy in the time and cycle dependent crack growth regimes[J]. International Journal of Fatigue, 2014, 62: 217–227.
- [3] XIAO Feng, YANG Ren-hui, LIU Lan-xiao, ZHAO Hong-kai, FANG Liang, ZHANG Chi. Density and molar volume of molten Ni-based commercial alloys measured by modified sessile drop method[J]. Rare Metal Materials and Engineering, 2009, 38(5): 770–773.
- [4] 王新然, 赵宇宏, 侯 华, 杨东然, 王 锐, 李海峰. $Ni_{74.6}Al_xMo_{25.4-x}$ 合金早期沉淀过程的微观相场模拟[J]. 中国

- 有色金属学报, 2014, 24(7): 1730–1735.
- WANG Xin-ran, ZHAO Yu-hong, HOU Hua, YANG Dong-ran, WANG Kun, LI Hai-feng. Microscopic phase-field simulation for early precipitation process of $Ni_{74.6}Al_xMo_{25.4-x}$ alloy[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2014, 24(7): 1730–1735.
- [5] 霍进良, 王永欣, 陈 铮, 张 静, 赵 彦, 张利鹏. 应变能对 $Ni_{75}Cr_{16.4}Al_{8.6}$ 合金沉淀过程影响的微观相场研究[J]. 稀有金属材料与工程, 2008, 37(10): 1723–1727.
- HUO Jin-liang, WANG Yong-xin, CHEN Zheng, ZHANG Jing, ZHAO Yan, ZHANG Li-peng. The phase-field model study with the elastic energy for the effect on the precipitation in $Ni_{75}Cr_{16.4}Al_{8.6}$ alloy[J]. Rare Metal Materials and Engineering, 2008, 37(10): 1723–1727.
- [6] 刘 芳, 王永欣, 陈 铮, 王晓鹏, 陈 阡, 唐洪奎. 微观相场法研究应变能对 $Ni_{68.2}Al_{22.7}V_{9.1}$ 合金中两相沉淀及原子占位的影响[J]. 稀有金属材料与工程, 2012, 41(6): 973–977.
- LIU Fang, WANG Yong-xin, CHEN Zheng, WANG Xiao-peng, CHEN Qian, TANG Hong-kui. Study for the effect of strain energy on two-phase precipitation and atoms occupying in $Ni_{68.2}Al_{22.7}V_{9.1}$ alloy using the microscopic phase-field method [J]. Rare Metal Materials and Engineering, 2012, 41(6): 973–977.
- [7] 陈引平, 王永欣, 卢艳丽, 郭 舒, 杨 坤, 陈 铮. 应变能对 $Ni_{75}Al_{15}V_{10}$ 合金析出相影响的微观相场研究[J]. 稀有金属材料与工程, 2011, 40(8): 1361–1366.
- CHEN Yin-ping, WANG Yong-xin, LU Yan-li, GUO Shu, YANG Kun, CHEN Zheng. Study for the effect of strain energy on pre-precipitation phase in $Ni_{75}Al_{15}V_{10}$ alloy using the microscopic phase-field method[J]. Rare Metal Materials and Engineering, 2011, 40(8): 1361–1366.
- [8] 马庆爽, 靳玉春, 赵宇宏, 侯 华, 王欣然, 王 甦. Ni-Al 间作用势对 $Ni_{75}Al_{14}Mo_{11}$ 合金原子有序化影响的微观相场模拟[J]. 中国有色金属学报, 2015, 25(6): 1450–1457.
- MA Qing-shuang, JIN Yu-chun, ZHAO Yu-hong, HOU Hua, WANG Xin-ran, WANG Kun. Microscopic phase-field simulation for influence of Ni-Al interaction energy on ordering behavior of $Ni_{75}Al_{14}Mo_{11}$ alloy atoms[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2015, 25(6): 1450–1457.
- [9] LU Yan-li, LU Guang-ming, JIA De-wei, CHEN Zheng. Phase-field study on competition precipitation process of Ni-Al-V alloy[J]. Transactions of Nonferrous Metals Society of China, 2015, 25(2): 544–551.
- [10] ZHANG Ming-yi, LI Zhi-gang, ZHANG Jin-ling, ZHANG Hui-zhan, CHEN Zhen, ZHANG Jia-zhen. Site occupation evolution of alloying elements in Ni_3V phase during phase transformation in $Ni_{75}Al_{4.2}V_{20.8}$ [J]. Transactions of Nonferrous Metals Society of China, 2015, 25(5): 1599–1604.
- [11] 张明义, 杨 坤, 陈 铮, 王永欣, 张嘉振. L_{12} 相间有序畴界成分的微观相场研究[J]. 稀有金属材料与工程, 2013, 42(6): 1194–1198.
- ZHANG Ming-yi, YANG Kun, CHEN Zheng, WANG Yong-xin, ZHANG Jia-zhen. Microscopic phase-field Study on the compositions of ordered domain interfaces formed between L_{12} phases[J]. Rare Metal Materials and Engineering, 2013, 42(6): 1194–1198.
- [12] ZHANG Ming-yi, CHEN Zheng, WANG Yong-xin, MA Guang, LU Yan-li, FAN Xiao-li. Effect of atomic structure on migration characteristic and solute segregation of ordered domain interfaces formed in $Ni_{75}Al_xV_{25-x}$ [J]. Transactions of Nonferrous Metals Society of China, 2011, 21(3): 604–611.
- [13] 张明义, 陈 铮, 王永欣, 卢艳丽, 张 静, 范晓丽. $Ni_{75}Al_xV_{25-x}$ 合金 DO_{22} 到 L_{12} 相变过程异相界面的结构及其迁移特征[J]. 金属学报, 2009, 45(8): 930–936.
- ZHANG Ming-yi, CHEN Zheng, WANG Yong-xin, LU Yan-li, ZHANG Jing, FAN Xiao-li. Structure and migration characteristic of hetero interfaces during the phase transformation from DO_{22} to L_{12} phase in $Ni_{75}Al_xV_{25-x}$ alloys[J]. Acta Metallurgica Sinica, 2009, 45(8): 930–936.
- [14] 张明义, 杨 坤, 陈 铮, 王永欣, 张嘉振. DO_{22} 相间反相畴界成分演化的微观相场模拟[J]. 有色金属工程, 2012, 2(4): 21–27.
- ZHANG Ming-yi, YANG Kun, CHEN Zheng, WANG Yong-xin, ZHANG Jia-zhen. Microscopic phase-field study on the compositions of ordered domain interfaces formed between DO_{22} phases[J]. Nonferrous Metals Engineering, 2012, 2(4): 21–27.
- [15] 赵宇宏. 合金早期沉淀过程的原子尺度计算机模拟[D]. 西安: 西北工业大学, 2003.
- ZHAO Yu-hong. Atomic-scale computer simulation for alloy during early precipitation process[D]. Xi'an: Northwestern Polytechnical University, 2003..
- [16] 赵宇宏. 材料相变过程微观组织模拟[M]. 北京: 国防工业出版社, 2010.
- ZHAO Yu-hong. Simulation for the materials microstructure evolution in phase transformation process[M]. Beijing: National Defense Industry Press, 2010.
- [17] HOU Hua, WEN Zhi-qin, ZHAO Yu-hong. First-principles investigations on structural, elastic, thermodynamic and electronic properties of Ni_3X ($X=Al, Ga$ and Ge) under pressure[J]. Intermetallics, 2014, 44: 110–115.
- [18] QI Lei, JIN Yu-chun, ZHAO Yu-hong, HOU Hua. The structural, elastic, electronic properties and Debye temperature of Ni_3Mo under pressure from first-principles[J]. Journal of Alloys and Compounds, 2015, 621: 383–388.
- [19] KHACHATURYAN A G. Theory of structural transformations in solids[M]. New York: Wiley, 1983, 41(2): 208.

[20] PODRUI R, CHEN L Q. Computer simulation of atomic ordering and compositional clustering in the pseudobinary $\text{Ni}_3\text{Al-Ni}_3\text{V}$ system[J]. *Acta Materialia*, 1998, 46(5): 1719–1729.

[21] CHEN L Q. A computer simulation technique for spinodal decomposition and ordering in ternary systems[J]. *Scr Metall Mater*, 1993, 29(5): 683–688.

Effect of elastic strain energy on L_{12} phase precipitation simulated by using microscopic phase-field method

ZHENG Xiao-juan, ZHAO Yu-hong, HOU Hua, JIN Yu-chun, MA Qing-shuang, TIAN Jin-zhong

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

Abstract: The precipitation process of L_{12} phase in $\text{Ni}_{75}\text{Al}_5\text{V}_{20}$ alloy was mainly simulated by using the microscopic phase-field kinetic mode. The results demonstrate that the process of microscopic morphology evolution can be divided into four stages for $\text{Ni}_{75}\text{Al}_5\text{V}_{20}$ alloy at 1250 K on different elastic strain energy, but there also are some different points. The occupation probability of Al atom is greater than V atom in early precipitation of L_{12} phase when the elastic strain energy is existent. Eventually, with increasing the elastic strain energy, the occupation probability of Al atom reduces and the occupation probability of V atom increases in L_{12} phase. When stoichiometric L_{12} ordered phase generates, the Al atoms gradually diffuse from L_{12} phase boundaries to its internal, meanwhile, the V atoms gradually diffuse from L_{12} phase internal to its boundaries, and the atoms in L_{12} phase are more closer to boundary, their diffusion speed becomes more faster, conversely becomes more slowly.

Key words: $\text{Ni}_{75}\text{Al}_5\text{V}_{20}$ alloy; microscopic phase-field; elastic strain energy; occupation probability; L_{12} phase

Foundation item: Projects(51774254, 51774253, 51701187, U1610123, 51574207, 51574206, 51574226) supported by the National Natural Science Foundation of China; Project(MC2016-06) supported by the Science and Technology Major Project of Shanxi Province, China

Received date: 2016-08-15; **Accepted date:** 2016-11-02

Corresponding author: ZHAO Yu-hong; Tel: +86-15035172958; E-mail: zyh388@sina.com

(编辑 龙怀中)