



# 微观相场模拟弹性畸变能对 $\text{Ni}_{75}\text{Al}_{15}\text{Ti}_{10}$ 合金沉淀过程的影响

孙远洋, 赵宇宏, 侯 华, 靳玉春, 郑晓娟

(中北大学 材料科学与工程学院, 太原 030051)

**摘 要:** 基于三元微观相场动力学模型, 研究弹性畸变能对于  $\text{Ni}_{75}\text{Al}_{15}\text{Ti}_{10}$  合金早期沉淀过程的影响。结果表明: 合金沉淀过程经历了从  $L1_0$  相向  $L1_2$  相的转变, 且通过定量分析确定最终沉淀产物为复杂的  $\text{Ni}_3(\text{AlTi})$  相; 加入弹性畸变能可以缩短合金从无序到有序转变的时间, 同时促使其沿着特定的弹性“软”方向生长, 最终形成高度择优取向的共格显微组织。此外, 沉淀相内部主要存在  $\text{Ni}_{\text{Al}}$  以及  $\text{Al}_{\text{Ni}}$  这两种反位缺陷结构, 畸变能的引入可以降低反位缺陷浓度, 同时提高正位原子占位几率。

**关键词:** 微观相场; 弹性畸变能;  $\text{Ni}_{75}\text{Al}_{15}\text{Ti}_{10}$ ; 反位缺陷

**文章编号:** 1004-0609(2018)-01-0071-07

**中图分类号:** TG146.4

**文献标志码:** A

镍基高温合金因具有较高的高温力学强度、良好的抗疲劳、抗腐蚀及抗氧化等特性, 使其在燃气涡轮发动机和航天先进发动机等方面有着巨大的应用潜力<sup>[1-3]</sup>。近年来, 镍铝钛(Ni-Al-Ti)合金体系因其优越的高温使用性能而备受关注, 这些优异的特性主要取决于沉淀过程中生成的  $L1_2$  结构的有序  $\gamma'$ 相( $\text{Ni}_3\text{Al}$ ), 因此对  $\gamma'$ 相的微观结构、空间取向、以及合金沉淀过程中相结构的形成与转变过程的研究具有重要的理论与实践意义<sup>[4-6]</sup>。NUNOMURA 等<sup>[7]</sup>探究了合金成分对体系内部相成分以及结构的影响, 并得出了  $\text{Ni}_3\text{Al-Ni}_3\text{Ti}$  伪二元合金相图; VOGEL 等<sup>[8-9]</sup>研究了沉淀后期合金内部沉淀相随时效时间的变化, 包括沉淀相的形成与转变, 原子的聚簇等沉淀过程; CAMMAROTA 等<sup>[10]</sup>研究了热处理过程对合金微观结构以及力学性能的影响; 张明义等<sup>[11-12]</sup>通过微观相场法研究了镍铝钒合金中  $L1_2$  相及  $\text{DO}_{22}$  相之间相转化过程并探讨了界面处成分的演化; 杨坤等<sup>[13-14]</sup>研究了时效温度以及两相竞争作用对沉淀相筏化过程的影响; 赵宇宏等<sup>[15-16]</sup>研究了原子间作用势对镍铝钒合金沉淀行为的影响, 发现不同近邻作用能会影响沉淀相的有序化以及簇聚过程。

Ni-Al-Ti 合金体系内部粒子原子尺度不同, 新相与母相之间的结构差异, 必然会引起内部晶格错配产

生内部应力, 故而在计算模拟中弹性畸变能是合金沉淀过程中不可忽略的一部分, 它不仅在会影响早期的形核速率及沉淀顺序, 同时也会制约沉淀相的形貌及生长方向。弹性畸变能必然会对  $L1_2$  相的沉淀过程产生不同程度的影响, 但具体的影响机制研究相对较少。研究弹性畸变能以及温度的耦合作用对于 Ni-Al-Ti 合金体系具有重要的指导意义。本文作者基于三元微观相场模型, 以  $\text{Ni}_{75}\text{Al}_{15}\text{Ti}_{10}$  为研究对象, 研究在时效温度 1173K 时, 不同弹性畸变能作用( $M=0, 400, 800$ )对合金体系早期沉淀过程的影响。

## 1 微观相场动力学模型

微观相场方程是 Cahn-Hilliard 扩散方程的微观离散格点形式, 由 KHACHATURYAN 等创建, CHEN 等<sup>[17-18]</sup>做了发展。其通过单晶格占位几率的非平衡自由能函数联系组分和长程序参数, 将非均匀系统置于原子层面上, 以原子占据晶格位置的几率作为场变量来描述由原子在晶格格点上的扩散跃迁所引起的位移相变过程。本次模拟采用三元微观相场动力学模型, 在三元合金体系 A-B-C 中, 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

**基金项目:** 国家自然科学基金资助项目(U1610123, 51674226, 51574207, 51574206, 51274175); 国家科技部国际科技合作项目(2014DFA50320); 山西省科技重大专项(MC2016-06); 山西省国际科技合作项目(2015081041); 山西省回国留学人员科研资助项目(2016-重点 2); 山西省科技成果转化引导专项(201604D131029)

**收稿日期:** 2016-09-27; **修订日期:** 2017-02-20

**通信作者:** 赵宇宏, 教授, 博士; 电话: 15035172958; E-mail: zhaoyuhong@nuc.edu.cn

几率, 由于  $P_A(r, t)$ 、 $P_B(r, t)$ 、 $P_C(r, t)$ , 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

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

式中:  $L_{AB}(r-r')$ 是指与单位时间内, 一对 A 和 B 原子在格点位置  $r$  和  $r'$  上的交换几率有关的常数;  $F$  为体系的总自由能;  $k_B$  是玻尔兹曼常数 ( $k_B = 1.3709 \times 10^{-23}$ );  $T$  为热力学温度。

但是式(1)为一确定方程, 不能够描述形核过程, 需要在上述方程式中加上随机热起伏, 使其变为随机方程即微观 Langevin 方程, 对上式作傅立叶变换后, 得到傅立叶空间中的微观 Langevin 方程, 如式 2 所示:

$$\begin{cases} \frac{d\tilde{P}_A(\mathbf{k}, t)}{dt} = \frac{1}{k_B T} \sum_{r'} \left[ \tilde{L}_{AA}(\mathbf{k}) \left\{ \frac{\partial F}{\partial P_A(r', t)} \right\}_k + \tilde{L}_{AB}(\mathbf{k}) \left\{ \frac{\partial F}{\partial P_B(r', t)} \right\}_k \right] + \zeta(\mathbf{k}, t) \\ \frac{d\tilde{P}_B(\mathbf{k}, t)}{dt} = \frac{1}{k_B T} \sum_{r'} \left[ \tilde{L}_{BA}(\mathbf{k}) \left\{ \frac{\partial F}{\partial P_A(r', t)} \right\}_k + \tilde{L}_{BB}(\mathbf{k}) \left\{ \frac{\partial F}{\partial P_B(r', t)} \right\}_k \right] + \zeta(\mathbf{k}, t) \end{cases} \quad (2)$$

式中:  $\mathbf{k}$  为第一布里渊区定义的倒易格矢;  $\tilde{P}_A(\mathbf{k}, t)$ 、 $\tilde{P}_B(\mathbf{k}, t)$ 、 $\tilde{L}_{AA}(\mathbf{k})$ 、 $\tilde{L}_{AB}(\mathbf{k})$ 、 $\tilde{L}_{BA}(\mathbf{k})$ 、 $\tilde{L}_{BB}(\mathbf{k})$ 、 $\zeta(\mathbf{k}, t)$  分别为晶格位置坐标  $r$  的有关函数的傅立叶变换。

根据平均场近似, 体系的总自由能表达式为

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

将式(3)带入到式(2), 并将该式在二维平面上投影, 是三维非线性方程转化为二维线性微分方程, 得到最终微观相场动力学模型:

$$\begin{cases} \frac{d\tilde{P}_A(\mathbf{k}', t)}{dt} = \frac{\tilde{L}_{AA}(\mathbf{k}')}{k_B T} \left\{ \tilde{V}_{AC}(\mathbf{k}') \tilde{P}_A(\mathbf{k}', t) + \frac{1}{2} [-\tilde{V}_{AB}(\mathbf{k}') + \tilde{V}_{BC}(\mathbf{k}') + \tilde{V}_{AC}(\mathbf{k}')] \tilde{P}_B(\mathbf{k}', t) + k_B T \left[ \ln \frac{P_A(r, t)}{1 - P_A(r, t) - P_B(r, t)} \right]_{\mathbf{k}'} \right\} + \frac{\tilde{L}_{AB}(\mathbf{k}')}{k_B T} \left\{ \tilde{V}_{BC}(\mathbf{k}') \tilde{P}_B(\mathbf{k}', t) + \frac{1}{2} [-\tilde{V}_{AB}(\mathbf{k}') + \tilde{V}_{BC}(\mathbf{k}') + \tilde{V}_{AC}(\mathbf{k}')] \tilde{P}_A(\mathbf{k}', t) + k_B T \left[ \ln \frac{P_B(r, t)}{1 - P_A(r, t) - P_B(r, t)} \right]_{\mathbf{k}'} \right\} + \zeta(\mathbf{k}', t) \\ \frac{d\tilde{P}_B(\mathbf{k}', t)}{dt} = \frac{\tilde{L}_{BA}(\mathbf{k}')}{k_B T} \left\{ \tilde{V}_{AC}(\mathbf{k}') \tilde{P}_A(\mathbf{k}', t) + \frac{1}{2} [-\tilde{V}_{AB}(\mathbf{k}') + \tilde{V}_{BC}(\mathbf{k}') + \tilde{V}_{AC}(\mathbf{k}')] \tilde{P}_B(\mathbf{k}', t) + k_B T \left[ \ln \frac{P_A(r, t)}{1 - P_A(r, t) - P_B(r, t)} \right]_{\mathbf{k}'} \right\} + \frac{\tilde{L}_{BB}(\mathbf{k}')}{k_B T} \left\{ \tilde{V}_{BC}(\mathbf{k}') \tilde{P}_B(\mathbf{k}', t) + \frac{1}{2} [-\tilde{V}_{AB}(\mathbf{k}') + \tilde{V}_{BC}(\mathbf{k}') + \tilde{V}_{AC}(\mathbf{k}')] \tilde{P}_A(\mathbf{k}', t) + k_B T \left[ \ln \frac{P_B(r, t)}{1 - P_A(r, t) - P_B(r, t)} \right]_{\mathbf{k}'} \right\} + \zeta(\mathbf{k}', t) \end{cases} \quad (4)$$

通过对微观相场动力学方程的求解, 得到合金沉淀过程中发生的微观形貌演化过程。

## 2 模拟结果与分析

### 2.1 原子演化分析

图 1 所示为  $L_{12}$  型及  $L_{10}$  型的有序  $\gamma'$ -Ni<sub>3</sub>Al 相的结

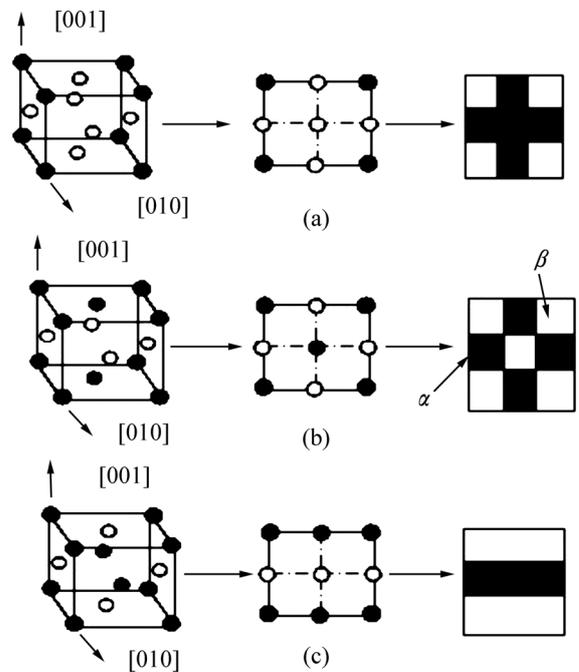


图 1 有序  $\gamma'$  相的结构示意图以及其在 [010] 方向上的二维投影: (a)  $L_{12}$  相; (b)  $L_{10}$  (I) 相; (c)  $L_{10}$  (II) 相

构示意图以及其在 $[010]$ 方向上的二维投影, 其中白色原子代表 Ni 原子, 而黑色原子代表 Al 原子, 为便于研究, 规定平衡状态的 Ni 原子所在位置为  $\alpha$  位, Al 原子所在位置为  $\beta$  位。

图 2 所示为时效温度 1173K 时  $\text{Ni}_{75}\text{Al}_{15}\text{Ti}_{10}$  合金在不考虑弹性畸变能的情况下沉淀原子占位随时间的演化图像。如图 2(a)所示, 当时间步数  $t=500$  时, 体系内部出现了少量小范围的有序亮点, 此时基体内部

开始发生有序化转变过程, 并且有序结构分布较为随机; 随着时间步数的延长, 当  $t=5000$  时, 有序化结构不断增多, 并且随机的有序结构逐渐相连, 此时根据原子占位发现, 此时体系内部同时出现了  $L1_0(\text{I})$ 、 $L1_0(\text{II})$  前期过渡相(如图 2(b)中圆形区域中的放大图)与  $L1_2$  平衡相, 这说明体系内部正在发生  $L1_0$  相的生成以及其向  $L1_2$  相结构转变的过程; 当时间步数达到 20000 步左右时, 出现亮度较高的部分区域且与  $L1_2$

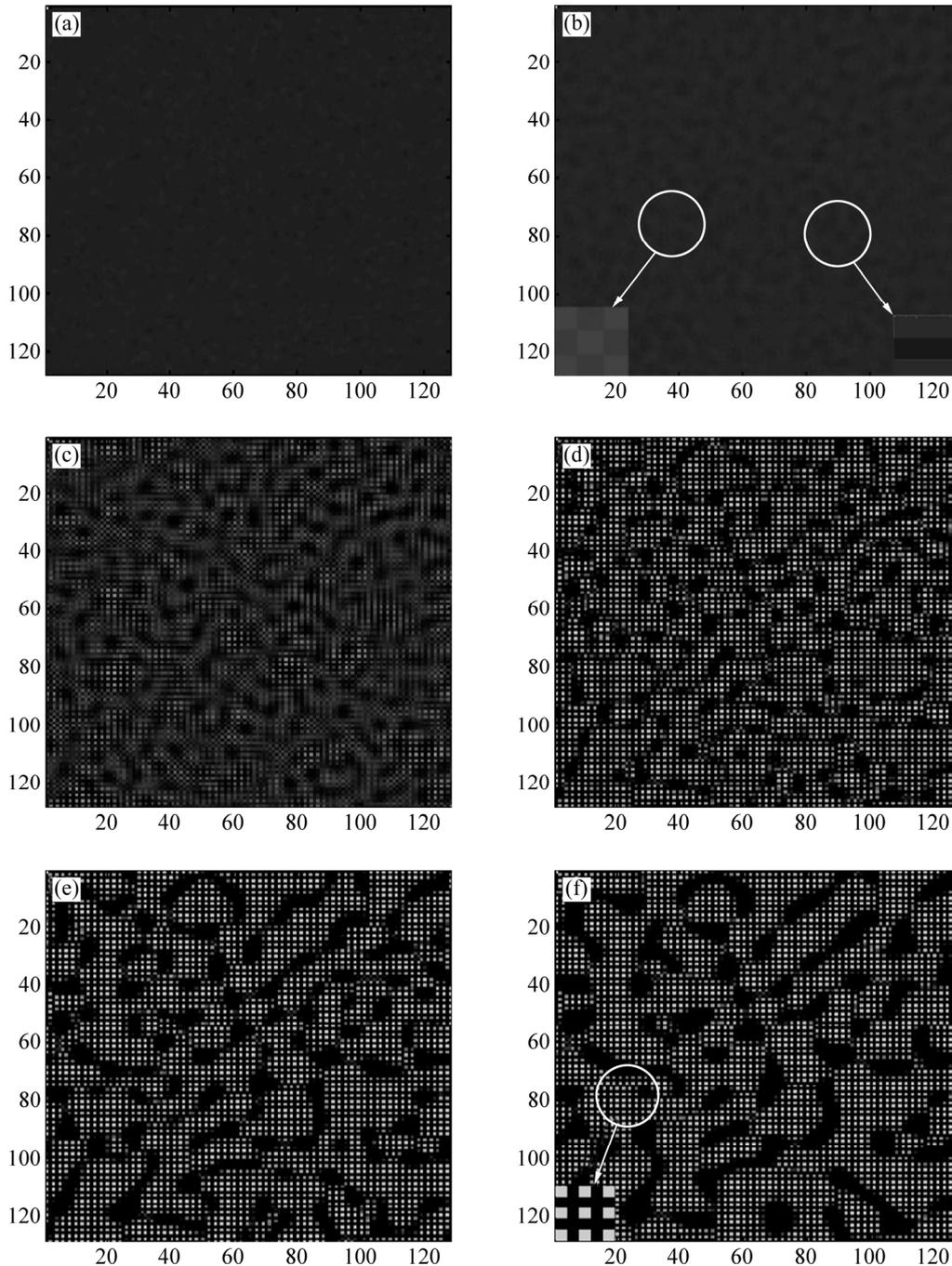


图 2  $M=0$  时  $\text{Ni}_{75}\text{Al}_{15}\text{Ti}_{10}$  的原子演化图像

Fig. 2 Microstructures evolutions of  $\text{Ni}_{75}\text{Al}_{15}\text{Ti}_{10}$  at  $M=0$ : (a)  $t=500$ ; (b)  $t=5000$ ; (c)  $t=20000$ ; (d)  $t=38000$ ; (e)  $t=100000$ ; (f)  $t=200000$

结构的二维投影相同,这说明此时原子的占位几率快速增加并且  $L1_0$  结构相已基本转化为  $L1_2$  相结构,但此时形成的有序相为非化学计量比有序相;随着有序化进程的加快,时间步数到  $3.8 \times 10^4$  步时,有序  $\gamma'$  相与基体相之间的界面逐渐清晰,并且有序相外部亮度要强于内部,这说明化学计量比  $L1_2$  相的形成是由两相界面迁移引起的 Al 原子由外向内扩散所致;当时间步数达到  $1 \times 10^5$  步时,体系内部已基本形成化学计量比有序相结构,但此时体系内部沉淀相尺寸小数量多,部分相邻小颗粒之间仍然被界面分隔,反畴畴界明显;随着时效过程的继续进行,发现小畴消失,大畴长大,有序相不断长大粗化,当时间步数达到  $2 \times 10^5$  步时,有序相粗化已十分明显。分析  $L1_2$  相内部格点处灰度发现(见图 2(f)中圆形区域中的放大图),此时  $\alpha$  位处颜色基本为纯黑色,但  $\beta$  位处并非是完全的白色,这就说明此时在  $\beta$  位置处可能是由 Al、Ti 以及少量的 Ni 共同占据所致,因此,初步判断沉淀过程所形成的  $\gamma'$  相可能为复杂的  $Ni_3(AlTi)$  相,具体定量分析见下述原子占位几率分析。

在考虑了弹性畸变能后,原子沉淀过程基本相同,不同之处在于沉淀相的生长取向差异,因此,此处仅列举了最终原子演化图像,分析了畸变能的影响。图 3 所示为  $Ni_{75}Al_{15}Ti_{10}$  合金在  $T=1150K$  时效作用下不同弹性畸变能作用下的最终演化图像( $t=2 \times 10^5$ )。在没有弹性畸变能作用时,沉淀相没有特定的生长方向,基本为无规则椭球状;在考虑了弹性畸变能后,合金中长大粗化方向呈现一定的方向性,即朝着对应的弹性“软”方向生长:在  $M=400$  时(见图 3(b)),体系内部沉淀相有沿着  $[100]$  与  $[001]$  方向发生取向生长的趋势,但是不明显;当畸变能提高到 800 时(见图 3(c)),发现沉淀相取向生长程度有明显提高,并且沉淀相形状由原先随机分布的椭球状变为规则排列的长条状,这是原子择优取向生长的结果。由此可见,弹性畸变能的引入可以大大改善体系内部沉淀相的形貌。

## 2.2 平均序参数分析

研究体系内部序参数随时间的变化规律,可以进一步对体系内部无序到有序转变过程、原子簇聚等现象进行深入研究,从而最终了解体系内部微结构的演化进程。

图 4 所示为不同弹性畸变能作用下平均长程序参数以及平均成分序参数随时效时间的变化规律。通过分析可以发现:在时效初期,序参数有所增加,但增长缓慢,这说明此阶段为有序化初期,  $L1_0$  与  $L1_2$  结构并存阶段;当时效步数达到  $1 \times 10^4$  步左右时,长

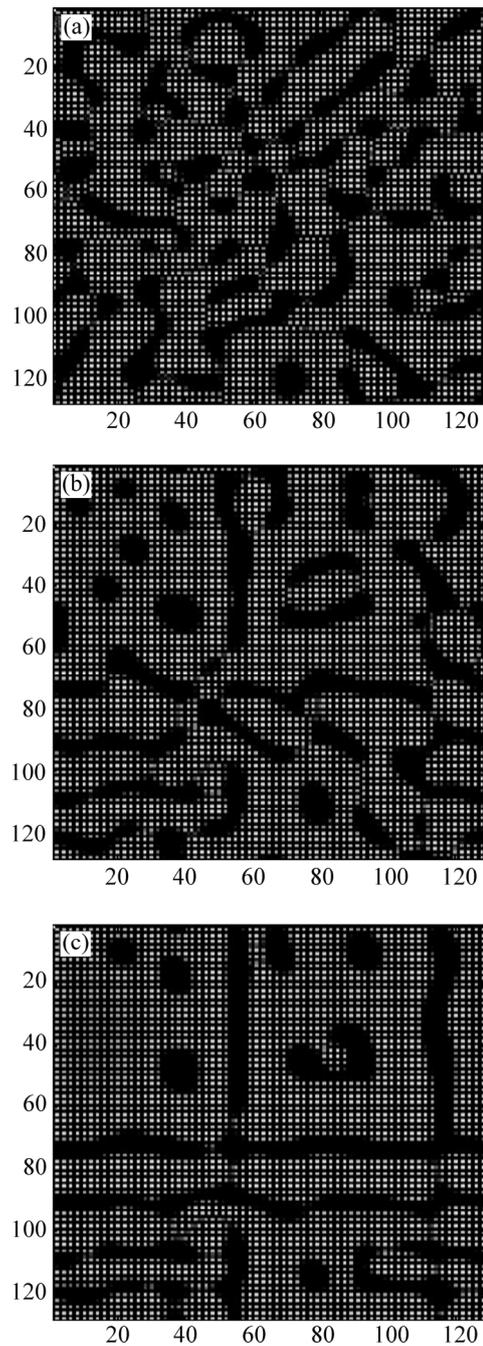


图 3 不同弹性畸变能作用下  $Ni_{75}Al_{15}Ti_{10}$  合金在  $t=2 \times 10^5$  时最终原子演化图

Fig. 3 Microstructure evolutions of  $Ni_{75}Al_{15}Ti_{10}$  at  $t=2 \times 10^5$  under different elastic strain energies: (a)  $M=0$ ; (b)  $M=400$ ; (c)  $M=800$

程序参数与成分序参数极速增长,此时对应于  $L1_0$  向  $L1_2$  相转化的快速阶段,约到  $3.5 \times 10^4$  步左右达到峰值;但随着时效过程的继续进行,平均长程序参数值又出现了下降的现象,这是由后期体系内部部分沉淀相发生分解或是  $\gamma'$  相向基体相转变所引起的,但此时

平均成分序参数仍在不断增加, 增长速度较为缓慢, 这可能是因为体系内部原子占据相应格点的几率增大所致; 此外, 在合金内部随着弹性畸变能的增大, 沉淀相从无序到有序所经历的时间有所减少, 同时序参数值也有明显增大, 这表明弹性畸变能够加快体系内部原子朝着特定的弹性“软”方向迁移, 从而最终形成高度择优取向的共格显微组织。

后, 原子在其正位处的占位几率直线上升, 三者到达平衡时的时间有所不同, Ni 原子迅速占据  $\alpha$  格点, 而 Al 与 Ti 原子占位较慢, 且沉淀后期, 出现 Al 原子占位几率不断升高, Ti 原子占位几率迅速下降的趋势, 这是由于 Ti 在 Ni<sub>3</sub>Al 相中的固溶特性所决定的, 即 Ni<sub>3</sub>Al 相中最多可固溶约 15% 的 Ti 原子<sup>[19]</sup>; 而各原子在反位的占位几率基本趋势一致, 均呈不断下降的趋

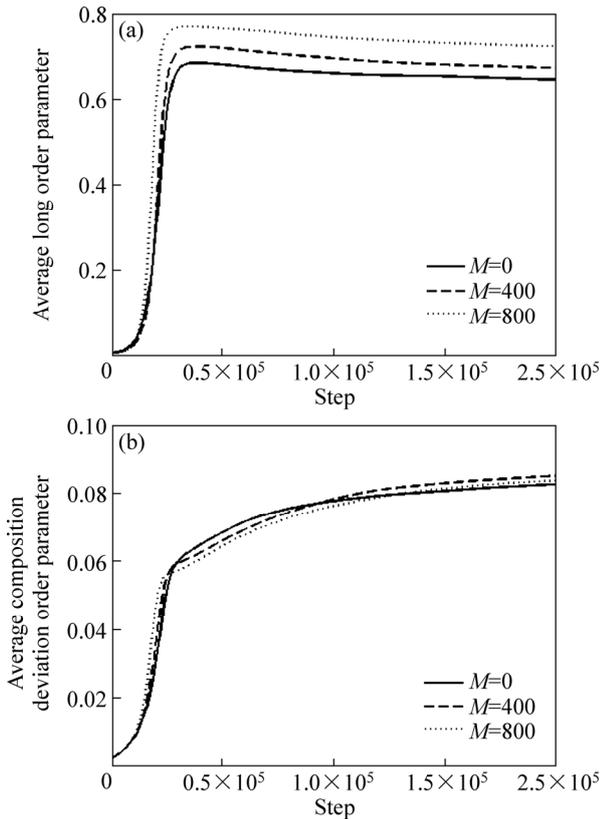


图 4 不同弹性畸变能作用下序参数与时效时间的关系  
**Fig. 4** Relationship between order parameters and aging time at different elastic strain energies: (a) Average long order parameter; (b) Average composition deviation order parameter

### 2.3 原子占位分析

通过对原子演化过程分析, 可清晰直观地看出  $\gamma'$  相中原子的占位情况, 但体系内部具体占位数值仍需定量分析研究, 因此通过分析沉淀相中原子占位几率对于理解其内部原子的扩散迁移运动, 最终沉淀相中原子的组成具有重要意义。

图 5 所示为不同弹性畸变能作用下 Ni<sub>75</sub>Al<sub>15</sub>Ti<sub>10</sub> 合金中 Ni<sub>3</sub>(AlTi)相中 Ni、Al、Ti 原子在  $\alpha$  及  $\beta$  格点处原子的占位几率演化图像, 且具体占位数值见表 1。从图 5 中看出, 大约在 1000 步之前, 各原子的数值几乎保持平稳, 这一初始阶段合金有序化进程并不明显, 基本可以认定合金体系处于无序阶段; 在 1000 步之

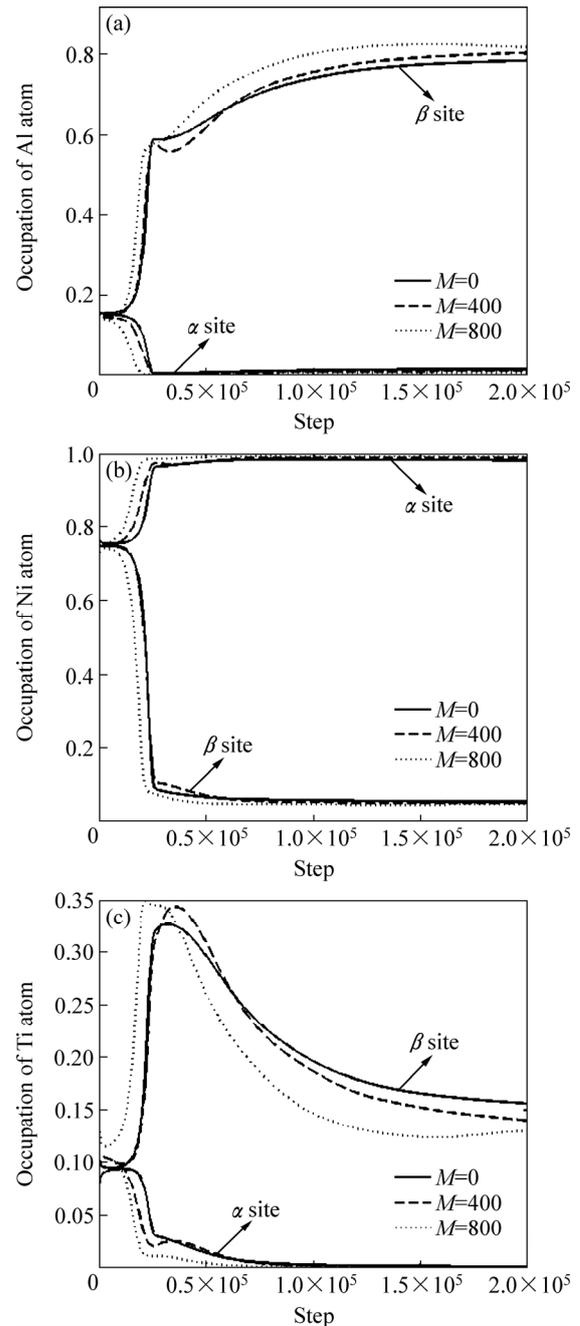


图 5 不同弹性畸变能作用下 Ni<sub>75</sub>Al<sub>15</sub>Ti<sub>10</sub> 合金  $\gamma'$  相中  $\alpha$  位及  $\beta$  位处原子占位几率演化图  
**Fig. 5** Occupations of atoms in  $\alpha$  site and  $\beta$  site in  $\gamma'$  phase of Ni<sub>75</sub>Al<sub>15</sub>Ti<sub>10</sub> at different elastic strain energies: (a) Al atom; (b) Ni atom; (c) Ti atom

表1 Ni、Al、Ti原子在 $\alpha$ 、 $\beta$ 格点处的占位几率数值Table 1 Placeholder probability values in  $\alpha$  lattice and  $\beta$  lattice of Ni, Al, Ti atoms

Strain energy	Occupation					
	Ni <sub>Ni</sub>	Al <sub>Al</sub>	Ti <sub>Al</sub>	Ni <sub>Al</sub>	Al <sub>Ni</sub>	Ti <sub>Ni</sub>
0	0.9806	0.7864	0.1565	0.5700	0.0176	0.0019
400	0.9860	0.8057	0.1402	0.5407	0.0129	0.0011
800	0.9905	0.8192	0.1305	0.5014	0.0088	0.0007

势；对比不同弹性畸变能作用的影响，发现随着弹性畸变能的增大，总体趋势是正位原子占位几率不断升高，反位缺陷浓度不断下降，而最终 Ti 原子在  $\beta$  位上的占位几率保持在 13%~15% 左右，由此可断定沉淀相为复杂的 Ni<sub>3</sub>(AlTi)相；此外，比对反位原子的具体数值可以发现，Ni<sub>Al</sub> 的占位几率明显要高于后两者，而 Ti<sub>Ni</sub> 的占位几率却很小，这表明在体系内部更容易生成 Ni<sub>Al</sub> 以及 Al<sub>Ni</sub> 这两种反位缺陷结构。

### 3 结论

1) Ni<sub>75</sub>Al<sub>15</sub>Ti<sub>10</sub> 合金在不同弹性畸变能作用下，合金沉淀过程均经历了以下两个阶段：首先为 L<sub>10</sub> 相转化为非化学计量比有序 L<sub>12</sub> 相；其次为非化学计量比 L<sub>12</sub> 相转化为化学计量比 L<sub>12</sub> 相的过程。

2) 考虑弹性畸变能后，可以加快合金的有序化进程，同时促使沉淀相沿着特定的弹性“软”方向生长，最终形成高度择优取向的共格显微组织。

3) 结合原子演化图以及定量计算发现，原子 Ti 在  $\alpha$  位的占位几率保持在 13%~15% 左右，得出最终沉淀产物为复杂的 Ni<sub>3</sub>(AlTi)相。

4) 沉淀相内部主要存在 Ni<sub>Al</sub> 以及 Al<sub>Ni</sub> 这两种反位缺陷结构，畸变能的引入可以降低反位缺陷浓度，同时提高正位原子占位几率。

### REFERENCES

- [1] PEDRAZZINI S, CHILD D J, WEST G, DOAK S S, HARDY M C, MOODY M P, BAGOT P A J. Oxidation behaviour of a next generation polycrystalline Mn containing Ni-based superalloy[J]. Scripta Materialia, 2016, 113(1): 51–54.
- [2] XUE Jia-wei, ZHANG An-feng, LI Yao, QIAN Dan, WAN Jing-chun, QI Ban-lu, TAMURA N, SONG Zhong-xiao, CHEN Kai. A synchrotron study of microstructure gradient in laser additively formed epitaxial Ni-based superalloy[J]. Science Reports, 2015, 5: 14903.
- [3] POLLOCK T M, TIN S. Nickel-based superalloys for advanced turbine engines: Chemistry, microstructure and properties[J]. Journal of Propulsion and Power, 2015, 22(2): 361–374.
- [4] BIAN Hua-kang, XU Xian-dong, LI Yun-ping, KOIZUMI Y, WANG Zhong-chang, CHEN Ming-wei, YAMANAKA K, CHIBA A. Regulating the coarsening of the  $\gamma'$  phase in superalloys[J]. NPG Asia Materials, 2015, 7(8): 275–282.
- [5] KUNDIN J, MUSHONGERA L, GOEHLER T, EMMERICH H. Phase-field modeling of the  $\gamma'$ -coarsening behavior in Ni-based superalloys[J]. Acta Materialia, 2012, 60: 3758.
- [6] WANG Tao, SHENG Guang, LIU Zi-kui, CHEN Long-Qing. Coarsening kinetics of  $\gamma'$  precipitates in the Ni-Al-Mo system[J]. Acta Materialia, 2008, 56(19): 5544–5551.
- [7] NUNOMURA Y, KANENO Y, TSUDA H, TAKASUGI T. Phase relation and microstructure in multi-phase intermetallic alloys based on Ni<sub>3</sub>Al-Ni<sub>3</sub>Ti-Ni<sub>3</sub>V pseudo-ternary alloy system[J]. Intermetallics, 2004, 12(4): 389–399.
- [8] VOGEL F, WANDERKA N, BALOGH Z, IBRAHIM M, STENDER P, SCHMITZ G, BANHART J. Evolution of nanoscale clusters in  $\gamma'$  precipitates of a Ni-Al-Ti model alloy[J]. Ultramicroscopy, 2015, 159: 278–284.
- [9] VOGEL F, WANDERKA N, BALOGH Z, IBRAHIM M, STENDER P, SCHMITZ G, BANHART J. Mapping the evolution of hierarchical microstructures in a Ni-based superalloy[J]. Nature Communications, 2013, 4(4): 2955–2955.
- [10] CAMMAROTA G P, CASAGRANDE A, POLI G, VERONESI P. Ni-Al-Ti coatings obtained by microwave assisted SHS: Effect of annealing on microstructural and mechanical properties[J]. Surface and Coatings Technology, 2009, 203(10/11): 1429–1437.
- [11] ZHANG Ming-ying, LIU Fu, CHEN Zheng, GUO Hong-jun, YUE Guang-quan, YANG Kun. Site occupation evolution of alloying elements in L<sub>12</sub> phase during phase transformation in Ni<sub>75</sub>Al<sub>17.5</sub>V<sub>17.5</sub>[J]. Transactions of Nonferrous Metals Society of China, 2012, 22(10): 2439–2443.
- [12] 张明义, 杨坤, 陈铮, 王永欣, 张嘉振. Ni<sub>75</sub>Al<sub>x</sub>V<sub>25-x</sub> 合金中异相界面成分演化的微观相场模拟[J]. 中国有色金属学报, 2013, 23(1): 73–81.

ZHANG Ming-ying, YANG Kun, CHEN Zheng, WANG Yong-xin, ZHANG Jia-zhen. Microscopic phase-field simulation of composition evolution of heterointerfaces in Ni<sub>75</sub>Al<sub>x</sub>V<sub>25-x</sub> alloys[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2013,

- 23(1): 73–81.
- [13] 杨 坤, 王永欣, 董卫平, 陈 铮, 张明义. 微观相场法研究沉淀早期两相竞争对筏化的影响[J]. 稀有金属材料与工程, 2011, 40(9): 1605–1609.  
YANG Kun, WANG Yong-xin, DONG Wen-ping, CHEN Zheng, ZHANG Ming-yi. Influence of the competitive growth between two phases on rafting during early precipitation through microscopic phase-field[J]. Rare Metal Materials and Engineering, 2011, 40(9): 1605–1609.
- [14] 杨 坤, 陈 铮, 张明义, 王永欣. 时效温度对 Ni-Al-V 合金筏化影响的微观相场模拟[J]. 中国有色金属学报, 2011, 21(4): 882–887.  
YANG Kun, CHEN Zheng, ZHANG Ming-yi, WANG Yong-xin. Microscopic phase-field simulation of influence of ageing temperature on raft in Ni-Al-V alloys[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2011, 21(4): 882–887.
- [15] 赵宇宏, 侯 华, 任娟娜. 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 (Science and Technology), 2012, 43(8): 2964–2972.
- [16] 马庆爽, 靳玉春, 赵宇宏, 侯 华, 王欣然, 王 锴. 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[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<sub>75</sub>Al<sub>14</sub>Mo<sub>11</sub> alloy atoms[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2015, 25(6): 1450–1457.
- [17] PODURI R, CHEN Long-qing. Non-classical nucleation theory of ordered intermetallic precipitates-application to the Al-Li alloy[J]. Acta Materialia, 1996, 44(10): 4253–4259.
- [18] CHEN Long-qing, KHACHATURYAN A G. Computer simulation of decomposition reactions accompanied by a congruent ordering of the second kind[J]. Scripta Metallurgica Et Materialia, 1991, 25(1): 61–66.
- [19] SCHUSTER J C. Critical data evaluation of the aluminium-nickel-titanium system[J]. Intermetallics, 2006, 14(10/11): 1304–1311.

## Effect of elastic strain energy on Ni<sub>75</sub>Al<sub>15</sub>Ti<sub>10</sub> alloy precipitation process by microscopic phase-field simulation

SUN Yuan-yang, ZHAO Yu-hong, HOU hua, JIN Yu-chun, ZHENG Xiao-juan

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

**Abstract:** Based on the ternary microscopic phase-field dynamic model, the effect of elastic strain energy on Ni<sub>75</sub>Al<sub>15</sub>Ti<sub>10</sub> alloy precipitation process was studied. The results indicate that the precipitation process experiences from the *L*<sub>10</sub> to *L*<sub>12</sub> phase transformation process and the final precipitated phase is Ni<sub>3</sub>(AlTi) by quantitative analysis. Meanwhile, the elastic strain energy can accelerate the process of transformation from disorder to order, promotes the growth along the specific elastic “soft” direction, and finally forms coherent microstructure of highly ordered orientation. Furthermore, the main existence of Ni<sub>Al</sub> and Al<sub>Ni</sub> in the precipitation phase is the structure of the two kinds of anti-site defects, and the elastic strain energy can inhibit the generation of anti-site defects, and promote the positive position of atoms to occupy the corresponding lattice point.

**Key words:** microscopic phase field; elastic strain energy; Ni<sub>75</sub>Al<sub>15</sub>Ti<sub>10</sub>; anti-site defect

**Foundation item:** Projects(U1610123, 51674226, 51574207, 51574206, 51274175) supported by the National Natural Science Foundation of China; Project(2014DFA50320) supported by International Cooperation Project of the Ministry of Science and Technology of China; Project(MC2016-06) supported by the Science and Technology Major Project of Shanxi Province, China; Project(2015081041) supported by the International Science and Technology Cooperation Project of Shanxi Province, China; Project (2016-Key 2) supported by the Shanxi Scholarship Council of China; Project(201604D131029) supported by the Transformation of Scientific and Technological Achievements Special Guide Project of Shanxi Province, China

**Received date:** 2016-09-27; **Accepted date:** 2017-02-20

**Corresponding author:** ZHAO Yu-hong; Tel: +86-15035172958; E-mail: zhaoyuhong@nuc.edu.cn

(编辑 王 超)