



Ni-Al-Cr 原子间近邻作用势及 沉淀过程的相场法模拟

董卫平^{1,2}, 胡海磊¹, 汪彬^{1,2}, 王琳琳^{1,2}, 陈铮³

(1. 浙江师范大学 工学院, 金华 321004;

2. 浙江师范大学 浙江省城市轨道交通智能运维技术与装备重点实验室, 金华 321004;

3. 西北工业大学 材料学院, 西安 710072)

摘 要: 基于微观相场理论研究了不同原子间近邻作用势(W)对 Ni-Al-Cr 合金析出过程和微观结构的影响。根据原子间近邻作用势与长程序参数方程的 $L1_0$ 、 $L1_2$ 和 $D0_{22}$ 相的原子间近邻作用势公式, 计算出 Ni-Al-Cr 合金的 $L1_0$ 、 $L1_2$ 和 $D0_{22}$ 相的不同原子间近邻作用势。结果表明: 随着温度的增长/减小, 原子间近邻作用势近似呈线性增长/减小; 随着溶质原子浓度的增长以及长程序参数的增大, 原子间近邻作用势均呈上升趋势; Ni-Al、Ni-Cr、Cr-Al 原子间近邻作用势的变化对 $L1_0$ 、 $L1_2$ 和 $D0_{22}$ 析出相的沉淀形貌和体积分数的影响也各不相同: Ni-Al 的第二近邻作用势的变化对于沉淀形貌和体积分数几乎无影响, 而 Ni-Cr 第四近邻作用势的变化对沉淀形貌和体积分数的影响非常大。同时发现与其他方法相比, 所得不同原子间近邻作用势结果近似, 且沉淀形貌与实验结果吻合。

关键词: Ni-Al-Cr 合金; 微观相场理论; 原子间近邻作用势; 析出相; 沉淀形貌

文章编号: 1004-0609(2020)-10-2360-09

中图分类号: TG111.5

文献标志码: A

近年来, 镍基高温合金在发动机、航天等领域均有广泛应用^[1-2]。材料的宏观性质由其微观结构决定, 因此微观结构的研究对于镍基高温合金性能的提高极其重要^[3-5]。微观相场法是 1990 年开始发展的一种关于材料微观结构的计算方法。该方法可以完整地再现沉淀阶段的微观结构^[6]、组成^[7]和有序化程度^[8], 因此, 用于微观结构析出过程的研究有很大优势。

原子间近邻作用势是计算机仿真中最基础的变量, 也是影响计算结果的最主要的参数, 常见计算原子间近邻作用势方法有: 第一原理算法^[9-10]、嵌入原子法^[11-12]等, 使用微观相场反演法来计算原子间近邻作用势较少。本文作者利用原子间近邻作用势和长程序参数之间的关系方程^[13], 计算出原子间近邻作用势随温度和原子浓度变化而变化的过程。这个计算模型适用于 $L1_0$ 相, 如 Ni(Al,Fe)、Ni(Al,V)、Ni(Al,Cr)^[6,14]; 二元 $L1_2$ 结构相, 如 Al_3Li 、 Ni_3Al 、 Ni_3Fe , 得到了满意的结果^[15-16]; 三元镍基高温合金 $L1_2$ 和 $D0_{22}$ 相^[17-18]。本文作者基于此模型计算出 Ni-Al-Cr 合金中 $L1_0$ 、 $L1_2$

和 $D0_{22}$ 相的原子间近邻作用势, 通过原子间近邻作用势的变化与有序相析出的体积分数以及析出相沉淀形貌对比分析, 得出了各原子间近邻作用势的改变对于有序相析出的影响。此外, 我们通过与相关实验进行对比^[17,19-21], 验证本文中采用的相场反演法的准确性。

本文作者基于微观相场理论所得公式^[22], 计算原子间近邻作用势, 并与其他方法的结果进行对比来证明公式的正确性以及普遍性。

1 原子间近邻作用势公式

本文原子间近邻作用势求值方程的推导是基于离散格点形式的微观相场动力学方程, 即 Cahn-Hilliard 扩散方程的微观离散格点形式, 最早是由 KHACHATURYAN^[13] 创建。基于该方程, KHACHATURYAN^[13] 进一步得出溶质原子(B 原子)占位几率和自由能之间关系的方程:

基金项目: 浙江省自然科学基金资助项目(LY18E010002); 浙江省基础公益研究计划资助项目(LGG18E050010)

收稿日期: 2019-11-04; 修订日期: 2020-06-18

通信作者: 董卫平, 副教授, 博士; 电话: 18757606151; E-mail: dwp@zjnu.cn

$$x + \sum_{n=1}^{n-1} n_k E_s(\mathbf{r}) = \left[\exp \left(\frac{-\mu + V(0)x + \sum_{i=1}^{k-1} V(\mathbf{k}_i) \eta_s E_s(\mathbf{r})}{k_n T} \right) + 1 \right]^{-1} \quad (1)$$

式中: x 为溶质原子(B 原子)的浓度; η_s 是长程序参数; $E_s(\mathbf{r})$ 是与晶格对称性有关的函数; μ 是 A、B 原子之间的化学势; $t-1$ 是超晶格结构非零向量 $\mathbf{k}_s$ 的数目。在此 $V(\mathbf{k}) = \sum_r \tilde{V}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$, 是原子间近邻作用势的傅里叶变换形式。

$L1_0$ 结构原子间近邻作用势 W_1 和长程序参数 η 之间关系方程:

$$\frac{-4W_1 \cdot \eta}{k_B T} = \ln \frac{(1-\eta)[1-x(1+\eta)]}{(1+\eta)[1-x(1-\eta)]} \quad (2)$$

$L1_2$ 结构原子间近邻作用势 W_1 和长程序参数 η 间关系方程:

$$\frac{-4W_1 \cdot \eta}{k_B T} = \ln \frac{(1-\eta)[1-x(1+3\cdot\eta)]}{(1+3\cdot\eta)[1-x(1-\eta)]} \quad (3)$$

$D0_{22}$ 结构原子间近邻作用势 W_1 和长程序参数 η 之间的关系方程:

$$-\frac{2W_1}{k_B T} (\eta_1 + \eta_2) = \ln \frac{[1-x(1+\eta_1+2\eta_2)](1-\eta_1)}{[1-x(1-\eta_1)](1+\eta_1+2\eta_2)} \quad (4)$$

由上述式(2)~(4)可以看出, 只要长程序参数确定, 就可求得不同温度、溶质浓度下的原子间近邻作用势 W_1 , 并将该计算方法称为微观相场反演法。上述方程称为微观相场反演原子间近邻作用势方程, 该方程计算所得原子间近邻作用势是随温度和浓度变化的。

2 结果与分析

2.1 原子间近邻作用势的影响因子

原子间近邻作用势近年来在物理、化学及材料科学等领域得到广泛的应用, 其影响因子也一直是学者研究的方向。由式(4)可知, 温度、溶质浓度、长程序参数均对原子间近邻作用势有影响。

本文作者通过微观相场法计算原子间近邻作用势与温度的关系, Ni-Al-Cr 合金中依次析出的无序相 $L1_0$ 、有序相 $L1_2$ 和 $D0_{22}$ 中, 取不同浓度的溶质原子($L1_0$ 为 Al+Cr; $L1_2$ 为 Al; $D0_{22}$ 为 Cr), 得到原子间近邻作用势与温度的变化曲线如图 1(a)所示。在长程序参数

一定的条件下, 温度在 600 K 到 1000 K 变化时, 3 种相的原子间近邻作用势和温度呈近似线性相关, 且随温度升高, 原子间近邻作用势增大, $L1_0$ 相的原子间近邻作用势较小主要是在 Ni-Al-Cr 合金中 $L1_0$ 相属不稳定的过渡结构, 将很快转变为有序相 $L1_2$ 。溶质浓度的不同也会对原子间近邻作用势有影响。Ni-Al-Cr 合金中, 3 种相在不同温度($T=873$ K 和 $T=900$ K)下原子间近邻作用势如图 1(b)所示, 无序相 $L1_0$ 在溶质浓度在 0~0.25(摩尔分数)间变化时, 原子间近邻作用势近似呈线性增加; 有序相 $L1_2$ 在 Al 的浓度为 0~0.25(摩尔分数)时, 原子间近邻作用势随着溶质浓度的增大而增加, 并且浓度越高, 增加得越快。而有序相 $D0_{22}$ 在 Al 的浓度为 0~0.25 时, 即 Cr 浓度从 0.25 到 0(摩尔分数)变化时, 与有序相 $L1_2$ 的变化恰好相反, 且两种相的原子间近邻作用势有交点。研究表明, 交点与有序相析出序列有关。

Ni-Al-Cr 合金的原子间近邻作用势随长程序参数变化曲线如图 2 所示。 $L1_0$ 结构 Ni(Al,Cr)相的原子间近邻作用势与长程序参数关系如图 2(a)所示, 可取长

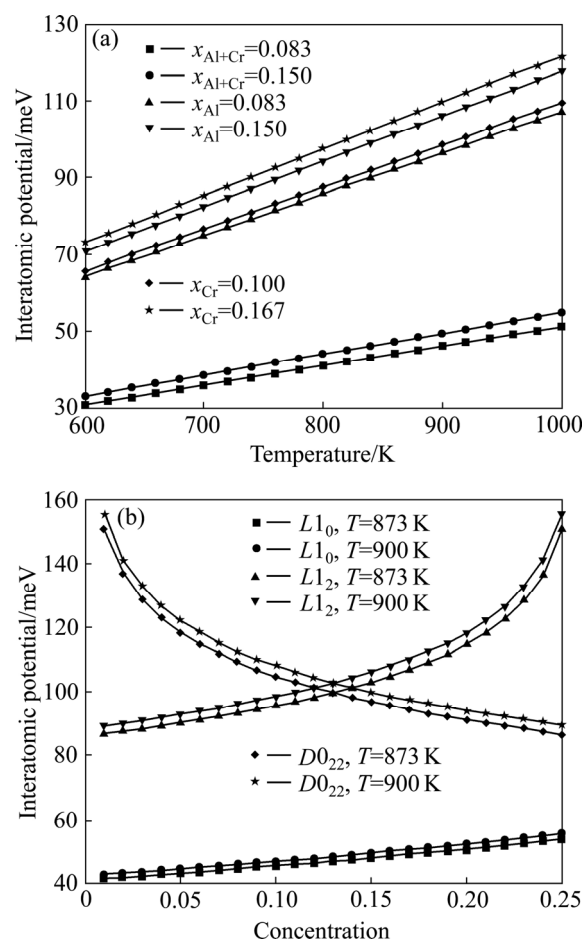


图1 原子间近邻作用势随温度和溶质浓度变化曲线
Fig. 1 Change curves of interatomic potential with temperature(a) and concentration(b)

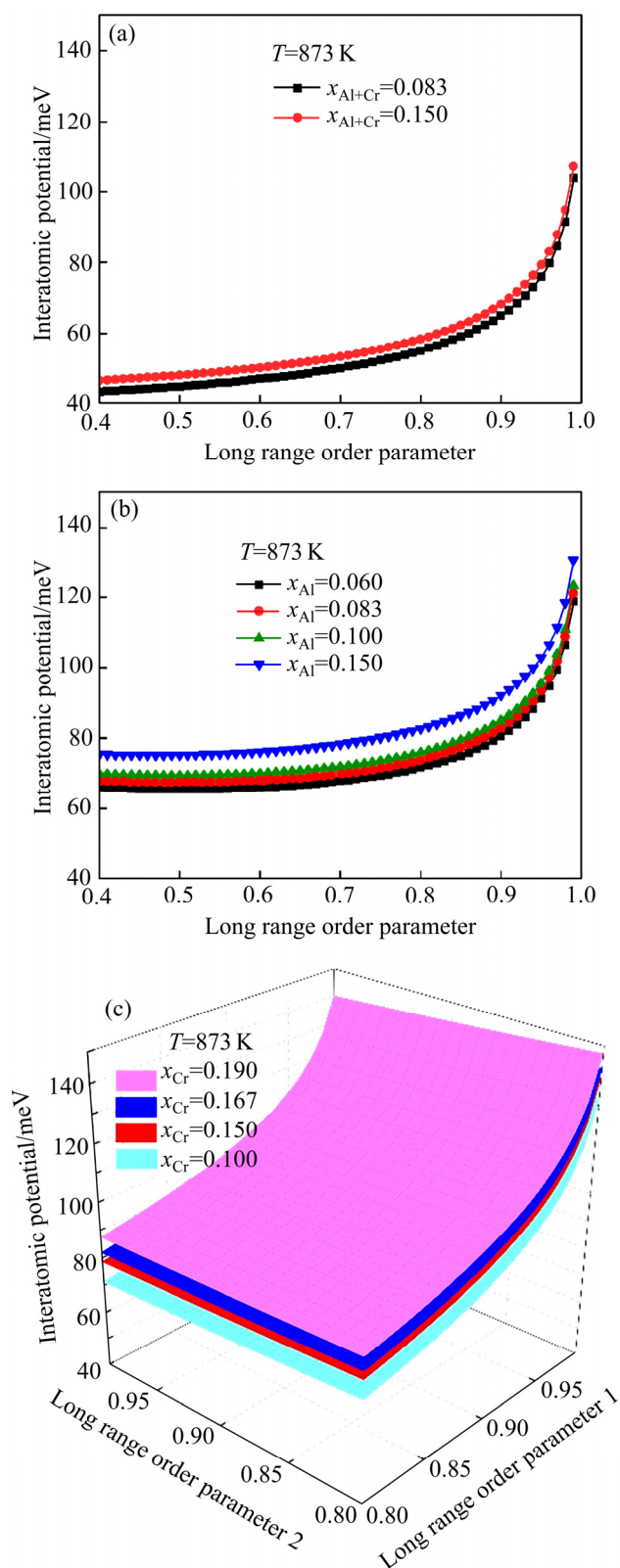


图2 L_{10} 、 L_{12} 和 D_{022} 原子间近邻作用势随长程序参数变化曲线

Fig. 2 Change curves of interatomic potential of L_{10} (a), L_{12} (b) and D_{022} (c) with range order parameter

程序参数范围在 0.4~0.6 (L_{10} 为过渡结构, 有序化程度较低) 间做优化平均处理得到 L_{10} 结构的原子间近邻作用势。曲线先近似线性上升, 在长程序参数靠近 1 时上升速度加快。 L_{12} 结构 Ni_3Al 相的 Ni-Al 间的原子间近邻作用势与长程序参数关系如图 2(b) 所示, 长程序参数范围在 0.8~0.99 (L_{12} 和 D_{022} 为稳定相, 有序化程度较高) 间做优化平均处理所得结果为 L_{12} 结构的原子间近邻作用势。由图 2(b) 可见, 曲线先平稳上升, 在长程序参数靠近 1 的时候上升速度加快。 D_{022} 结构 Ni_3Cr 相的 Ni-Cr 间的原子间近邻作用势与长程序参数如图 2(c) 所示, 长程序范围在 0.8~0.99 间做优化平均处理所得结果为 D_{022} 结构的原子间近邻作用势。由图 2 可见, 在长程序参数越靠近 1 的时候, 上升速度越快, 原子间近邻作用势越大, 析出相越稳定。

2.2 原子间近邻作用势对微结构的影响

本文作者通过微观相场法模拟 $Ni_{0.75}Al_{0.083}Cr_{0.167}$ 合金中温度为 900 K 时不同原子间近邻作用势下 L_{12} 和 D_{022} 结构的析出体积分数来分析其对微结构的析出情况和形貌的影响。将分别改变各个近邻的原子间近邻作用势 (+10 meV 表示近邻作用势增加 10 meV; -10 meV 表示近邻作用势减小 10 meV), 与初始原子间近邻作用势所得的模拟结果进行比较。

2.2.1 Ni-Cr 之间近邻作用势对微结构的影响

Ni-Cr 之间近邻作用势对 L_{12} 相体积分数的影响如图 3(a) 所示。其中红色星形为 Ni-Cr 之间近邻作用势不变时, L_{12} 相的体积分数在 2000 步开始上升即开始析出, 并迅速上升即粗化长大, 在 3600 时达到最大值后减小, 5000 步之后趋于稳定。其他曲线为原子间近邻作用势改变后得到的 L_{12} 相体积分数, 原子间近邻作用势改变对体积分数有很大影响。当 Ni-Cr 之间第一近邻的作用势 +10 meV 时, L_{12} 相在 1400 步开始析出 (L_{12} 相析出时间比近邻作用势不变时提前), 并迅速上升, 在 3400 时达到最大值并趋于稳定, 不影响最终体积分数; 当第一近邻的作用势 -10 meV 时, L_{12} 相在 2600 步才析出 (L_{12} 相析出时间比近邻作用势不变时延后), 之后曲线迅速上升, 5400 步达到最大值, 再逐渐下降, 并且体积分数最大值大于近邻作用势不变时的最大值即最终析出的 L_{12} 相增多。其他近邻改变对体积分数的影响与第一近邻改变时不同。当第二近邻的作用势 +10 meV 时, L_{12} 相在 2800 步才开始析出即延后析出, 而当第二近邻的作用势 -10 meV 时, L_{12} 相在 1400 步就开始析出即提前析出, 最终体积分

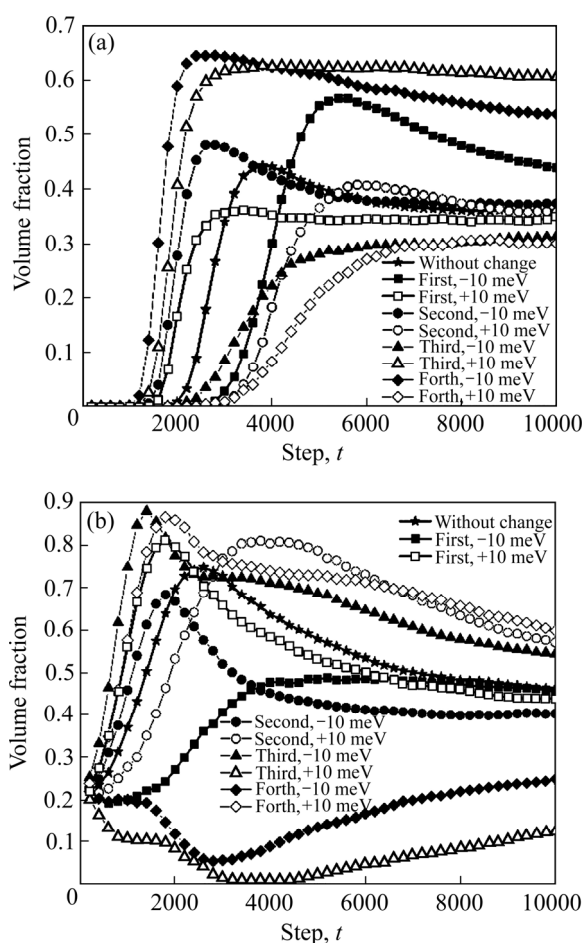


图3 L_{12} 和 D_{022} 相体积分数的随 Ni-Cr 近邻作用势变化曲线
Fig. 3 Change curves of volume fractions of L_{12} and D_{022} phases with interatomic potential of Ni-Cr

数与 Ni-Cr 之间近邻作用势不变时接近。当第三近邻的作用势+10 meV 时和第四近邻的作用势-10 meV 时, L_{12} 相均提前析出, 且最终体积分数比 Ni-Cr 之间近邻作用势不变时增大较多; 当第三近邻的作用势-10 meV 时和第四近邻的作用势+10 meV 时, L_{12} 相析出时间延后, 最终体积分数稍减小。Ni-Cr 之间近邻作用势对 D_{022} 相体积分数的影响如图 3(b)所示。当第一近邻的作用势+10 meV 时, 对 D_{022} 相体积分数的影响极小, 当第一近邻的作用势-10 meV 时, D_{022} 相体积分数先略微下降, 后逐渐上升趋于稳定, 最终体积分数的值也非常接近近邻作用势不变时(星形曲线)。当第二近邻的作用势改变, D_{022} 相析出前期相差不大, 最终体积分数有影响, -10 meV 时体积分数减小, +10 meV 时体积分数增大。第三近邻+10 meV 和第四近邻-10 meV 的作用势改变, 对 D_{022} 相的影响非常大。

综上所述, 原子间第三近邻和第四近邻作用势对

L_{12} 相和 D_{022} 相的沉淀过程和最终体积分数的影响都较其他两近作用势邻大; 当第一近邻的作用势-10 meV、第三近邻的作用势+10 meV 和第四近邻的作用势-10 meV 时, 此三者对 L_{12} 相最终析出体积分数影响很大; 第三近邻+10 meV 和第四近邻-10 meV 的作用势改变, 对于 D_{022} 相的影响很大; 第二近邻的作用势对 L_{12} 相析出有影响而对最终体积分数无影响, 对 D_{022} 相析出过程无影响而对最终体积分数影响较大; 其他原子间近邻作用势改变均影响较小。

研究发现, 各近邻作用势均对析出相有影响。本文作者选取影响较大的第四近邻作用势改变时的析出沉淀相形貌和初始近邻作用势不变时的析出相沉淀形貌作对比, 结果如图 4 所示, 其中蓝色为 L_{12} 结构, 红色为 D_{022} 结构。2000 步时, 第四近邻作用势-10 meV 时, 已经开始有部分有序相析出(见图 4(a)), 而此时近邻作用势不变时几乎为无序(见图 4(d)); 第四近邻作用势+10 meV 时, 相析出比不变时稍多(见图 4(g))。在 5000 步时, 第四近邻作用势-10 meV 时, D_{022} 相少量析出且介于 L_{12} 相之间; 第四近邻作用势+10 meV 时, 有序化还在继续进行。在 10000 步时, 第四近邻作用势-10 meV 时, D_{022} 相相较于 5000 步时所占百分比有所增加, 但依旧少于 L_{12} 相, 对应图 3(a)中绿色方形曲线最终体积分数远大于图 3(b)中绿色方形曲线的最终值; +10 meV 时, L_{12} 相沉淀少于 D_{022} 相, 对应图 3(a)中淡绿空方形曲线最终体积分数远小于图 3(b)中淡绿空方形曲线的最终值。研究表明, 其他近邻作用势改变同样对微结构有影响, 第一和第二近邻作用势改变的影响较小, 第三近邻作用势改变对微结构的影响与第四近邻作用势改变对微结构的影响恰好相反。

2.2.2 Ni-Al 之间作用势对微结构的影响

本文作者研究了 Ni-Al 间各个近邻作用势改变后对析出和微结构的影响, 发现 Ni-Al 间第二近邻的作用势改变对于析出和微结构几乎无影响。第一近邻和第三近邻作用势的改变对析出和微结构的影响相似: 当-10 meV 时, L_{12} 相会推迟析出, 对 D_{022} 相体积分数的影响较明显, 峰值和最终值均高于作用势不变时; 而+10 meV 时, L_{12} 相都会比作用势不变时稍微提前析出, D_{022} 相峰值和最终值均低于作用势不变时。第四近邻作用势改变的影响与第三近邻作用势改变的影响相反。对合金析出过程中沉淀形貌微结构的影响, 第一近邻和第三近邻相似, -10 meV 的析出相沉淀图中的 D_{022} 结构多于 L_{12} 结构; +10 meV 的析出

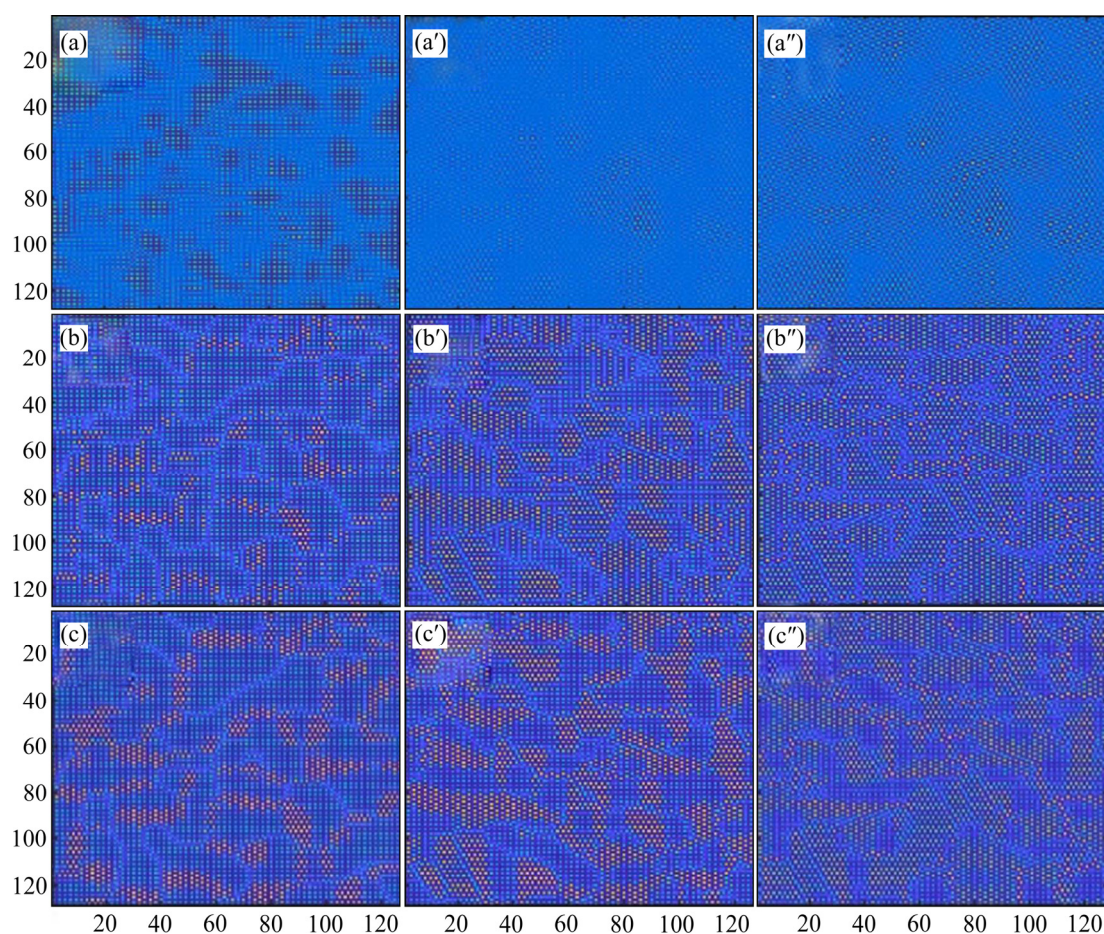


图4 第四近邻作用势-10 meV 时、近邻作用势不变时以及第四近邻作用势+10 meV 时的沉淀形貌图

Fig. 4 Precipitation morphologies of fourth interatomic potential of -10 meV((a)-(c)) and without change((a')-(c')) and fourth interatomic potential of +10 meV((a'')-(c'')): (a), (a'), (a'') 2000 steps; (b), (b'), (b'') 5000 steps; (c), (c'), (c'') 10000 steps

相沉淀图中的 $L1_2$ 结构多于 $D0_{22}$ 结构；但第三近邻原子间作用势-10 meV 时， $L1_0$ 结构无序相析出明显增多。同样，Ni-Al 间的第二近邻的作用势的改变并不影响沉淀形貌微结构。第四近邻作用势改变对沉淀形貌微结构的影响与第三近邻作用势改变相反。

2.2.3 Cr-Al 之间作用势对于微结构的影响

Cr-Al 原子间近邻作用势的变化对 Ni-Al-Cr 合金相析出过程和沉淀形貌微结构的影响如表 2 所示。研究表明，第一近邻作用势和第二近邻作用势的改变对合金相析出过程和微结构所造成的影响正好相反：当第一近邻作用势减小 10 meV(-10 meV)或第二近邻作用势增加 10 meV(+10 meV)时， $L1_2$ 相比作用势不变时会稍提前析出， $L1_2$ 相体积分数的峰值大于作用势不变时 $L1_2$ 相的体积分数峰值， $L1_2$ 相体积分数的最终值大于作用势不变时 $L1_2$ 相体积分数的最终值； $D0_{22}$ 相比作用势不变时推迟析出， $D0_{22}$ 相体积分数峰值和最终值均低于作用势不变时的 $D0_{22}$ 相体积分数

峰值和最终值，且合金沉淀形貌微结构中 $D0_{22}$ 结构多于 $L1_2$ 结构。第一近邻作用势增加 10 meV(+10 meV)或第二近邻作用势减小 10 meV(-10 meV)时，得到的结果与第一近邻作用势减小 10 meV(-10 meV)或第二近邻作用势增加 10 meV(+10 meV)得到的结果刚好相反。

第三近邻作用势减小 10 meV(-10 meV)时得到的结果与作用势不变时得到的结果进行对比，发现 $L1_2$ 相会提前析出且 $L1_2$ 相的最终体积分数减小， $D0_{22}$ 相的体积分数峰值高于作用势不变时 $D0_{22}$ 相的体积分数峰值，且合金沉淀形貌微结构中 $L1_0$ 结构明显增多；第三近邻作用势增加 10 meV(+10 meV)时， $L1_2$ 相比作用势不变时推迟析出， $D0_{22}$ 相体积分数的峰值和作用势不变时 $D0_{22}$ 相体积分数的峰值几乎一样；第三近邻作用势无论增大还是减小，对 $D0_{22}$ 相的体积分数最终值均无影响。

第四近邻作用势减小 10 meV(-10 meV)时， $L1_2$

表 1 Ni-Al 近邻作用势改变对微结构的影响

Table 1 Effect of varying Ni-Al neighbor potentials on microstructure

Nearest interatomic potential	Potential change	Volume fraction of $L1_2$ structure	Volume fraction of $D0_{22}$ structure	Precipitation at 5000 steps
First	-10 meV	Delayed precipitation, final value decreases	Peak and final values are higher than preset conditions	$D0_{22}$ structure has more precipitation phases than $L1_2$ structure
	+10 meV	Precipitated slightly earlier, final value slightly increased	Peak and final values are below preset conditions	$L1_2$ structure has more precipitation phases than $D0_{22}$ structure
Second	-10 meV	Without effect	Without effect	Without effect
	+10 meV	Without effect	Without effect	Without effect
Third	-10 meV	Delayed precipitation, final value decreases	Peak and final values are higher than preset conditions	Increased disordered phase of $L1_0$ structure and ordered phase of $D0_{22}$ structure
	+10 meV	Precipitated slightly in advance, final value remains unchanged	Peak and final values are below preset conditions	$L1_2$ structure precipitation phase slightly increased
Forth	-10 meV	Precipitated slightly earlier, final value slightly increased	Peak and final values are below preset conditions	$L1_2$ structure has more precipitation phases than $D0_{22}$ structure
	+10 meV	Precipitated very late, final value decreased significantly	Peak and final values are higher than preset conditions	Increased disordered phase of $L1_0$ structure and ordered phase of $D0_{22}$ structure

表 2 Cr-Al 近邻作用势改变对微结构的影响

Table 2 Effect of varying Cr-Al neighbor potentials on microstructure

Nearest interatomic potential	Potential changes	Volume fraction of $L1_2$ structure	Volume fraction of $D0_{22}$ structure	Precipitation at 5000 steps
First	-10 meV	Precipitated slightly earlier, final value increases	Peak and final values are below preset conditions	$L1_2$ structure has more precipitation phases than $D0_{22}$ structure
	+10 meV	Delayed precipitation, final value decreases	Peak and final values are higher than preset conditions	$D0_{22}$ structure has more precipitation phases than $L1_2$ structure
Second	-10 meV	Delayed precipitation, final value decreases	Peak and final values are higher than preset conditions	$D0_{22}$ structure has more precipitation phases than $L1_2$ structure
	+10 meV	Precipitated slightly earlier, final value slightly increases	Peak and final values are below preset conditions	$L1_2$ structure has more precipitation phases than $D0_{22}$ structure
Third	-10 meV	Precipitated earlier, final value decreases	Peak value is higher than preset condition, and final value is approximately equal to preset condition	Disordered phase of $L1_0$ structure increases obviously
	+10 meV	Delayed precipitation, final value increases	Peak and final values are approximately equal to preset conditions	$D0_{22}$ structure has more precipitation phases than $L1_2$ structure
Forth	-10 meV	Delayed precipitation, final value decreases	Peak and final values are higher than preset conditions	Disordered phase of $L1_0$ structure increases obviously
	+10 meV	Precipitated slightly earlier, final value increases	Peak and final values are below preset conditions	$L1_2$ structure precipitation phase slightly increases

相比作用势不变时稍推迟析出, $D0_{22}$ 相体积分数的峰值和最终值均高于作用势不变时 $D0_{22}$ 相体积分数的峰值和最终值, 且合金的微结构中 $L1_0$ 结构明显增多; 第四近邻作用势增加 10 meV(+10 meV)时, 对相析出和微结构的影响与第四近邻作用势减小 10 meV(-10 meV)时相反。

2.3 与实验结果对比

图 5 所示为 Ni_3Al 、 Ni_3Cr 相在温度 1046.5 K 和不同溶质浓度时采用微观相场反演法计算的第一近邻原子间近邻作用势值与其他计算值^[17, 19-20]的对比。可见

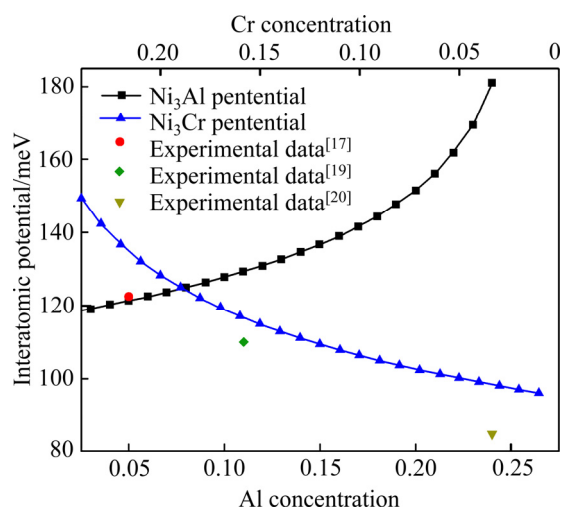


图 5 $Ni-Cr$ 、 $Ni-Al$ 原子间近邻作用势随溶质浓度的变化曲线与实验对比^[17, 19-20]

Fig. 5 Calculation of interatomic potentials of $Ni-Cr$ and $Ni-Al$ compare with experiment^[17, 19-20]

在一定误差允许范围内, 二者结果几乎接近。由于目前采用其他方法还尚未计算出与温度和浓度相关的原子间近邻作用势值, 因此本文采用的微观相场反演原子间近邻作用势方法拓宽了原子间近邻作用势计算方法, 也进一步阐明了原子间近邻作用势与温度以及浓度之间的密切关系, 对以后精确的模拟研究镍基高温合金有重要作用。如图 6(a)和(b)所示, 在合金成分 $Ni_{0.793}Al_{0.157}Cr_{0.05}$ 和温度 1173 K 相同的情况下, 利用相场反演法计算得到原子间近邻作用势, 将其代入微观相场方程中模拟得到沉淀形貌图, 再将模拟结果与实验所得的 $\gamma' + \gamma$ 微观结构相组织形态比较, 两者的相组织形态相似^[21], 进一步证明了本文的相场反演法的科学性及准确性。

3 结论

1) 原子间近邻作用势影响因子有温度、溶质浓度和长程序参数: 随着温度的升高, 原子近邻作用势呈线性增加; 随着溶质原子浓度的增加, $L1_0$ 预析出相的原子间近邻作用势呈近似线性的上升, 而 $L1_2$ 和 $D0_{22}$ 预析出相的原子间近邻作用势先是缓慢上升, 再迅速增大; 随着长程序参数的增大, 原子间近邻作用势也随之增大。

2) 原子间近邻作用势对体积分数和析出结果有影响: $Ni-Cr$ 第三近邻作用势对析出相的沉淀形貌和体积分数的影响最大, $Ni-Cr$ 第一近邻作用势对析出相的沉淀形貌和体积分数的影响最小; $Ni-Al$ 的第四

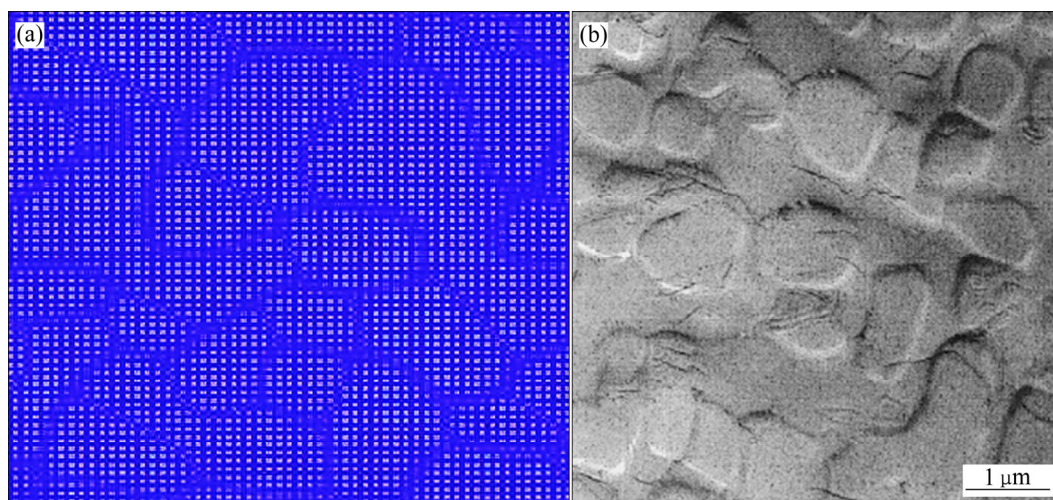


图 6 $Ni_{0.793}Al_{0.157}Cr_{0.05}$ 合金在 1173 K 时相场模拟得到合金沉淀形貌以及实验得到的 TEM 像^[21]

Fig. 6 Precipitation morphologies simulated by microscopic phase-field method(a) and TEM image of experiment(b)^[21] of $Ni_{0.793}Al_{0.157}Cr_{0.05}$ alloy at 1173 K

近邻作用势对于析出相的沉淀形貌和体积分数的影响最大, Ni-Al 第二近邻作用势对析出相的沉淀形貌和体积分数无影响。Cr-Al 第三近邻作用势对于析出相的沉淀形貌和体积分数的影响最大, Cr-Al 第一近邻作用势对析出相的沉淀形貌和体积分数的影响最小。

3) 微观相场法计算所得原子间近邻作用势与其他方法得到的作用势结果十分接近, 同时, 所得原子间近邻作用势模拟得到的 Ni-Al-Cr 合金的金相组织形貌与实验结果吻合, 验证了本文采取的相场反演法的正确性和可行性。

REFERENCES

- [1] YABANSU Y C, ISKAKOV A, KAPUSTINA A, RAJAGOPANLAN S, KALIDINDI S R. Application of Gaussian process regression models for capturing the evolution of microstructure statistics in aging of nickel-based superalloys[J]. *Acta Materialia*, 2019, 178: 45–58.
- [2] VENKAT Y, SINGH S, DAS D K, PANDEY A K. Effect of fine alumina in improving refractoriness of ceramic shell moulds used for aeronautical grade Ni-base superalloy castings[J]. *Ceramics International*, 2018, 44(11): 12030–12035.
- [3] 马庆爽. 镍基合金沉淀过程及原子间相互作用势的微观相场理论研究[D]. 太原: 中北大学, 2017.
MA Qing-shuang. Precipitation process of nickel base alloy and the interatomic potential calculation by microscopic phase-field simulation[D]. Taiyuan: North University of China, 2017.
- [4] YANG Kun, CHEN Zheng, WANG Yong-xin, FAN Xiao-li. Microscopic phase-field study on directional coarsening mechanism caused by interaction between precipitates in Ni-Al-V alloy[J]. *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*, 2013, 23(1): 193–200.
- [5] DING Qing-qing, LI Su-zhi, CHEN Long-qing, HAN Xiao-dong, ZHANG Ze, YU Qian, Li Ji-xue. Re segregation at interfacial dislocation network in a nickel-based superalloy[J]. *Acta Materialia*, 2018, 154: 137–146.
- [6] LU Yan-li, CHEN Zheng, LI Xiang, TANG Kong-kui. Microscopic phase-field study of the effect of temperature on the pre-precipitates of Ni-Al-Cr alloy [J]. *Computational Materials Science*, 2015, 99: 247–252.
- [7] 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.
- [8] ZHANG Jing, CHEN Zheng, DU Xiu-juan, CHEN Cheng, YANG Tao. Characterization of lattice defects for $L1_2$ -Ni₃Al involving the ordering process via the microscopic phase field method[J]. *Superlattices and Microstructures*, 2012, 52(4): 834–843.
- [9] KUMAR V, SANTOSH R, CHANDRA S. First-principle calculations of structural, electronic, optical and thermal properties of hydrogenated graphene[J]. *Materials Science and Engineering B*, 2017, 226: 64–71.
- [10] LIU Xuan, SHA Gang, WU Qin-li, LIANG Yao-jian, HUANG Jia-ting, JIN Ke, XUE Yun-fei, WANG Ben-peng, WANG Lin-jing, WANG Lu, WANG Fu-chi, FAN Qun-bo, XIA Zhen-hai. Phase stability of an high-entropy Al-Cr-Fe-Ni-V alloy with exceptional mechanical properties: First-principles and APT investigations[J]. *Computational Materials Science*, 2019, 170: 1–9.
- [11] ZHAO Xiao-wang, FOSTER M E, SILLS R B. An Fe-Ni-Cr embedded atom method potential for austenitic and ferritic systems[J]. *Journal of Computational Chemistry*, 2018, 39(29): 2420–2431.
- [12] JIN H S, PAK J Y, JONG Y S. Study on the properties of vacancies and phonon dispersions by the improved ones of the modified analytic embedded atom method potentials for Al, Ni, and Ir[J]. *Applied Physics A*, 2017, 123(4): 257.
- [13] KHACHATURYAN A G. Theory of structural transformation in solids[M]. New York: Wiley, 1983: 1–99.
- [14] LIANG Jing-jing, LI Rui-qin, ZHAO Yao-hong. Simulation of pre-precipitation in Ni₇₅Al₁₄Mo₁₁ alloy by microscopic phase-field model[J]. *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*, 2015, 25(7): 2361–2366.
- [15] 徐 聪, 陈 铮, 卢艳丽, 钟汉文, 张 静, 苗海川. 微观相场法反演 $L1_2$ 结构的原子间相互作用势[J]. *稀有金属材料与工程*, 2010, 39(6): 1027–1030.
XU Cong, CHEN Zheng, LU Yan-li, ZHONG Han-wen, ZHANG Jing, MIAO Hai-chuan. Inversion of the first nearest neighbor interchange interaction potential in $L1_2$ structure by microscopic phase-field simulation[J]. *Rare Metal Materials and Engineering*, 2010, 39(6): 1027–1030.
- [16] 郑晓娟, 赵宇宏, 侯 华, 靳玉春, 马庆爽, 田晋忠. 微观相场模拟弹性畸变能对 $L1_2$ 相沉淀全过程的影响[J]. *中国有色金属学报*, 2017, 27(10): 2098–2104.
ZHENG Xiao-juan, ZHAO Yu-hong, HOU Hua, JIN Yu-chun, MA Qing-shuang, TIAN Jin-zhong. Effect of elastic strain energy on $L1_2$ phase precipitation simulated by using microscopic phase-field method[J]. *The Chinese Journal of Nonferrous Metals*, 2017, 27(10): 2098–2104.

- [17] PODURI 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.
- [18] LU Yan-li, LU Guang-ming, LIU Fang, CHEN Zheng, TANG Kong-kui. Phase-field study on the pre-precipitated phase of ordered intermetallic compounds in binary and ternary Ni-Al base alloys[J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2015, 637: 149–154.
- [19] BONNY G, BAKAEV A, OLSSON P, DOMAIN C, ZHURKIN E E, POSSELT M. Interatomic potential to study the formation of NiCr clusters in high Cr ferritic steels[J]. *Journal of Nuclear Materials: Materials Aspects of Fission and Fusion*, 2017, 484: 42–50.
- [20] MENAND A, CADEL E, PAREIGE C, BLAVETTE D. Three-dimensional atomic scale microscope with the atom probe[J]. *Ultramicroscopy*, 1999, 78: 63–72.
- [21] BROŽ P, SVOBODA M, BURŠÍK J, KROUPA A, HAVRÁNKOVÁ J. Theoretical and experimental study of the influence of Cr on the $\gamma+\gamma'$ phase field boundary in the Ni-Al-Cr system[J]. *Materials Science & Engineering A*, 2002, 325(1/2): 59–65.
- [22] 董卫平, 王琳琳, 王小明, 陈 铮. 微观相场法反演 $\text{Ni}_{0.75}\text{Al}_x\text{V}_{0.25-x}$ 合金的原子间相互作用势[J]. *稀有金属材料与工程*, 2018, 47(1): 201–206.
- DONG Wei-ping, WANG Lin-lin, WANG Xiao-ming, CHEN Zheng. Inversion of the interatomic potential in $\text{Ni}_{0.75}\text{Al}_x\text{V}_{0.25-x}$ alloy by microscopic phase-field simulation[J]. *Rare Metal Materials and Engineering*, 2018, 47(1): 201–206.

Ni-Al-Cr neighbor potentials and precipitation morphology by phase-field theory

DONG Wei-ping^{1,2}, HU Hai-lei¹, WANG Bin^{1,2}, WANG Lin-lin^{1,2}, CHEN Zheng³

(1. College of Engineering, Zhejiang Normal University, Jinhua 321004, China;

2. Key Laboratory of Intelligent Operation and Maintenance Technology and Equipment for Urban Rail Transit of Zhejiang Province, Zhejiang Normal University, Jinhua 321004, China;

3. College of Material, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China)

Abstract: The effects of different interatomic potentials to the precipitation process and microstructure of Ni-Al-Cr alloy based on the microscopic phase-field theory were investigated. According to the formula of the interatomic nearest neighbor interaction potentials of $L1_0$, $L1_2$ and $D0_{22}$ phases and the long range order parameter equation, the different interatomic potentials of $L1_0$, $L1_2$ and $D0_{22}$ phases in Ni-Al-Cr alloy were calculated. The results indicate that, with the change of temperature, the interatomic potentials change as well. With the concentrations of Al and Cr increase, the interatomic potentials increase as well. The changes of interatomic potentials of Ni-Al, Ni-Cr and Cr-Al have different effects on precipitation morphologies and volume fractions of $L1_0$ phase, $L1_2$ phase and $D0_{22}$ phase, for example, the change of the second neighbor potential of Ni-Al has no effect on the results. However, there is a great effect to precipitation morphology and volume fraction when the forth neighbor potential of Ni-Cr changes. Moreover, compared with other methods, the result of interatomic potential of this paper is close to their results, and the result of simulation is also similar to that of the experiment.

Key words: Ni-Al-Cr alloy; microscopic phase-field theory; interatomic potentials; precipitate phase; precipitation morphology

Foundation item: Project(LY18E010002) supported by the Zhejiang Provincial Natural Science Foundation of China; Project(LGG18E050010) supported by the Public Welfare Project of Zhejiang Province, China

Received date: 2019-11-04; **Accepted date:** 2020-06-18

Corresponding author: DONG Wei-ping; Tel: +86-18757606151; E-mail: dwp@zjnu.cn

(编辑 李艳红)