

# Ni<sub>75</sub>Mn<sub>x</sub>Al<sub>25-x</sub> 合金早期沉淀相的微观相场模拟

禚昌岩, 王永欣, 陈 铮, 王晓鹏

(西北工业大学 凝固技术国家重点实验室, 西安 710072)

**摘要:** 采用三元微观相场动力学模型研究 Ni<sub>75</sub>Mn<sub>x</sub>Al<sub>25-x</sub> 合金早期沉淀相的形成过程。对合金微观组织演化图像、有序相体积分数曲线、序参数曲线及占位几率的分析表明: 该合金首先析出 L1<sub>0</sub> 结构, 随后 L1<sub>0</sub> 结构向 L1<sub>2</sub> 结构转变, L1<sub>2</sub> 结构在 L1<sub>0</sub> 结构的内部析出。随着 Al 浓度的增大, 等成分有序化阶段缩短; 且 L1<sub>0</sub> 结构体积分数增大, 发生结构转变的时间提前。Al 和 Mn 原子在(001)和(002)面几乎同时有序排列, 但是一定时间后(002)面原子开始贫化, 发生结构转变, Al 原子主要占据  $\beta$  位, Mn 原子主要占据  $\alpha_{II}$  位。合金最终析出单一的 L1<sub>2</sub> 伪二元结构。

**关键词:** Ni<sub>75</sub>Mn<sub>x</sub>Al<sub>25-x</sub> 合金; 微观相场; 序参数; L1<sub>0</sub> 早期沉淀相

中图分类号: TG111.5 文献标志码: A

## Microscopic phase-field simulation for formation of pre-precipitation phase in Ni<sub>75</sub>Al<sub>25-x</sub>Mn<sub>x</sub> alloy

ZHUO Chang-yan, WANG Yong-xin, CHEN Zheng, WANG Xiao-peng

(State Key Laboratory of Solidification Processing, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China)

**Abstract:** The microscopic phase-field model was used to simulate the formation of pre-precipitation phase in Ni<sub>75</sub>Al<sub>25-x</sub>Mn<sub>x</sub> alloy. The results of the microscopic morphology evolution of alloys, the volume fraction curves, order parameter curves and occupation probability show that L1<sub>0</sub> phase precipitates from the Ni<sub>75</sub>Al<sub>25-x</sub>Mn<sub>x</sub> alloy first and then transforms into L1<sub>2</sub> phase inside of L1<sub>0</sub> phase in the following time. With the increase of Al concentration, the nucleation incubation periods of L1<sub>0</sub> and L1<sub>2</sub> phases and structure transformation time obviously become shorter. The ordering of Al and Mn atoms takes place in (001) and (002) planes simultaneously. As followed, the atom order degree begins to decrease in (002) planes and the structure is changed. Al atoms preferentially occupy the  $\beta$  site and Mn atoms preferentially occupy the  $\alpha_{II}$  site. Finally, the L1<sub>0</sub> pseudobinary structure precipitates in the alloy system.

**Key words:** Ni<sub>75</sub>Mn<sub>x</sub>Al<sub>25-x</sub> alloy; microscopic phase-field; order parameter; L1<sub>0</sub> pre-precipitation phase

合金的沉淀过程处于高度非平衡、非线性状态, Ni<sub>75</sub>Al<sub>25-x</sub>Fe<sub>x</sub> 合金沉淀过程中存在过渡相 L1<sub>0</sub> 相, 最终形成伪二元结构<sup>[1]</sup>。Ni<sub>80</sub>Al<sub>13</sub>Cr<sub>7</sub> 合金发生由 L1<sub>0</sub> 向 L1<sub>2</sub> 的结构转变<sup>[2]</sup>。这类过渡沉淀相会影响稳定沉淀相的形核长大、组织形貌等, 使材料的综合性能发生改变, 因此, 对早期沉淀相形成和转变的研究在优化合金性能方面有重要的意义<sup>[3-5]</sup>。

Ni-Mn-Al 具有铁磁性, 是一种强磁性非铁合金(Heusler alloys)<sup>[6]</sup>。Ni-Mn-Al 具有特殊的功能, 成为人

们关注的焦点<sup>[7-9]</sup>。VIJAY 等<sup>[10]</sup>在利用 X 射线衍射透射电镜等方法对 Ni-Mn-Al 晶粒生长过程和结构性质进行研究时发现, 该合金的饱和磁性强度随退火温度的升高而增大。在温度为 723 K 时退火, 合金中析出了 L1<sub>2</sub> 结构, 且在室温下合金中的马氏体发生了结构转变。2011 年, SAURABH 等<sup>[11]</sup>在研究 Ni-Mn-Al 合金时发现, 随着 Mn 浓度的降低, Ni 原子逐渐占据 Mn 原子的位置, 导致马氏体的转变温度提高, 这也有助于提高合金中的价电子浓度。差示扫描量热法

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(51075335, 10902086, 50875217); 西北工业大学基础研究基金(NPU-FFR-JC201005)

收稿日期: 2011-04-08; 修订日期: 2011-07-22

通信作者: 王永欣, 副教授, 博士; 电话: 029-88460502; E-mail: wangyx818@126.com

(DSC)与 X 射线衍射法(XRD)研究表明, 该合金在高温下的奥氏体为 B<sub>2</sub> 结构, 并呈现半导体特性, 而在低温下则为 L1<sub>0</sub> 结构。KAINUMA 等<sup>[12]</sup>研究了 Ni-Mn-Al 系统中的平衡相以及 B<sub>2</sub> 相的稳定性, 得出了合金在 850、1 000 和 1 100 ℃ 3 个温度下的等温截面图。GOMAN'KOV 等<sup>[13-14]</sup>描述了 Ni<sub>3</sub>X-Ni<sub>3</sub>Mn 伪二元系统, 研究了微晶合金中 Ni<sub>3</sub>Al-Ni<sub>3</sub>Mn、Ni<sub>3</sub>Si-Ni<sub>3</sub>Mn 以及 Ni<sub>3</sub>Ti-Ni<sub>3</sub>Mn 伪二元系统的结构多相性等。GLEZER 等<sup>[15]</sup>通过中子衍射发现, 在 Ni<sub>3</sub>(Mn<sub>1-x</sub>V<sub>x</sub>)合金从熔融态以 10<sup>6</sup> °C/s 速率的淬火过程中, 当 L1<sub>2</sub> 结构形成以后出现长程有序增加的反常现象。

对 Ni-Mn-Al 合金的研究已有许多报道, 但大多集中在实验方面, 而且早期沉淀相转化较快, 实验不易捕捉, 因此, 本文作者以计算机模拟为手段, 探讨 Al 浓度高于 10%(质量分数)的情况下早期沉淀相的析出过程、有序-无序转变以及有序结构的尺寸变化。

## 1 理论模型

本模拟采用的微观相场模型中的三元体系微观扩散方程由 Khachaturyan 提出, 以原子占据晶格位置的概率为场变量来描述原子的组态和相变, PODURI 和 CHEN<sup>[16]</sup>对此模型进行了修订。此模型可模拟原子尺度上的合金有序化和相变等过程。对于三元合金系统, 有:

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

式中: (P<sub>A</sub>(r, t)、P<sub>B</sub>(r, t)和 P<sub>C</sub>(r, t))分别表示原子 A、B 和 C 的占位几率。因此, 每个格点上只有 2 个独立方程。但微观扩散方程为一确定方程, 不能描述形核过程, 因此, 在式(1)中添加一个随机项 ξ(k, t), 使之转变为随机方程, 即微观 Langevin 方程<sup>[14]</sup>:

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

式中: L<sub>αβ</sub>(r-r')为与单位时间内一对 α 和 β 原子在格点位置 r 和 r'上的交换几率有关的常数, α、β=A、B、C; F 为体系的总自由能; k<sub>B</sub> 为 Boltzmann 常数, 方程最终在 Fourier 空间进行求解, 随机项 ξ(k, t)的产生遵

循涨落-耗散理论, 其 Fourier 空间表达式为

$$\xi(k, t) = p_f \sqrt{2k_B T L(k) \Delta t} \mu(r, t) \quad (3)$$

式中: μ(r, t)为服从标准正态分布的随机数; Δt 为无量纲化时间; p<sub>f</sub> 为保持数值稳定的修正因子; L(k)为与交换几率有关的常数。在平均场近似下 F 的表达式为

$$F = -\frac{1}{2} \sum_r \sum_{r'} [V_{AB}(r-r') P_A(r) P_B(r') + V_{BC}(r-r') P_B(r) P_C(r') + V_{AC}(r-r') P_A(r) P_C(r')] + k_B T \sum_r [P_A(r) \ln(P_A(r)) + P_B(r) \ln(P_B(r)) + P_C(r) \ln(P_C(r))] \quad (4)$$

式中: V<sub>AB</sub>(r-r')为原子间有效作用能。为了更准确地描述自由能, 采用四近邻原子间相互作用势近似描述原子间的相互作用能。为了研究形核机制、预析出相向稳定相转变等问题, 引入面长程序参数来表征在特定面内的原子分布情况。其表达式为

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

式中: η(i, j)表示有序相内某特定面内(i, j)处的有序度; P(i, j)为特定面内原子在其正位的占位几率; C(i, j)为原子在特定面内的平均浓度。根据该计算方法, 只要在有序相的某个面发生异类原子交错出现, 就能反映该面内的有序度。

## 2 结果与讨论

模拟 Ni<sub>75</sub>Mn<sub>x</sub>Al<sub>25-x</sub> 合金 1 123 K 等温时效时预析出相的形成过程。采用 128×128 格点, 在每个方向均应用周期性边界条件, 初始状态均为无序过饱和固溶体; 用模拟时间步数 t 代表真实时间, 模拟图像以不同灰度值表示溶质原子在格点处占位几率的大小, 黑色为 0, 白色为 1, 中间值呈过渡灰色; 模拟中所出现的有序相结构示意图及相应的模拟图像如图 1 所示。

### 2.1 Ni<sub>75</sub>Mn<sub>x</sub>Al<sub>25-x</sub> 合金沉淀过程的原子演化

不同浓度合金沉淀的结构演化图基本相同, 不同的是有序相的析出时间、数量和体积分数。因此, 仅对一种浓度的合金进行原子演化图分析, 如图 2 所示。

图 2(a)呈现一片黑色, 表明此时合金仍处于无序

状态, 没有原子簇聚或有序相的析出。随着时间的延长, 无序基体中开始随机出现有序相沉淀, 此时的有序相颜色较暗, 为非化学计量比沉淀相。沉淀相继续析出, 基体中的 L1<sub>0</sub> 结构增多, 无序区域逐渐变小且

灰度进一步增加, 逐渐向化学计量比 L1<sub>0</sub> 结构转变。当时间步  $t=5\ 200$  时, 沉淀基本形成结构明晰的化学计量比有序相, 如图 2(b)所示。图 2(b)中圆圈部分的放大图如图 2(e)所示。可以看出, 与图 1(b)中 L1<sub>0</sub>序

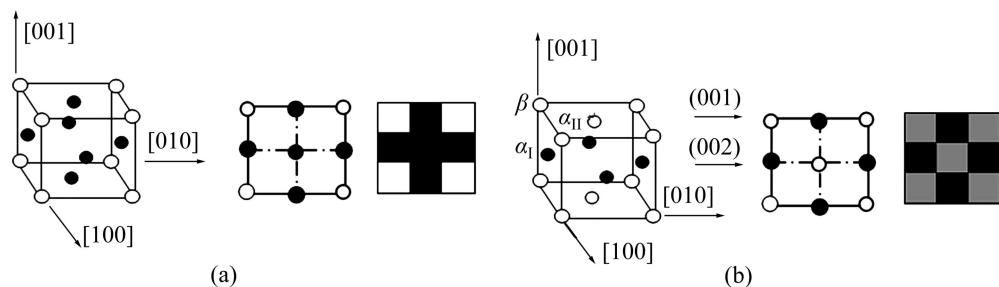


图 1 有序相结构及其在[001]方向的投影和模拟中对应相示意图

**Fig. 1** Schematic diagrams of structure, projection on [001] orientation and corresponding ordered phase in simulation: (a) L1<sub>2</sub> phase; (b) L1<sub>0</sub> phase

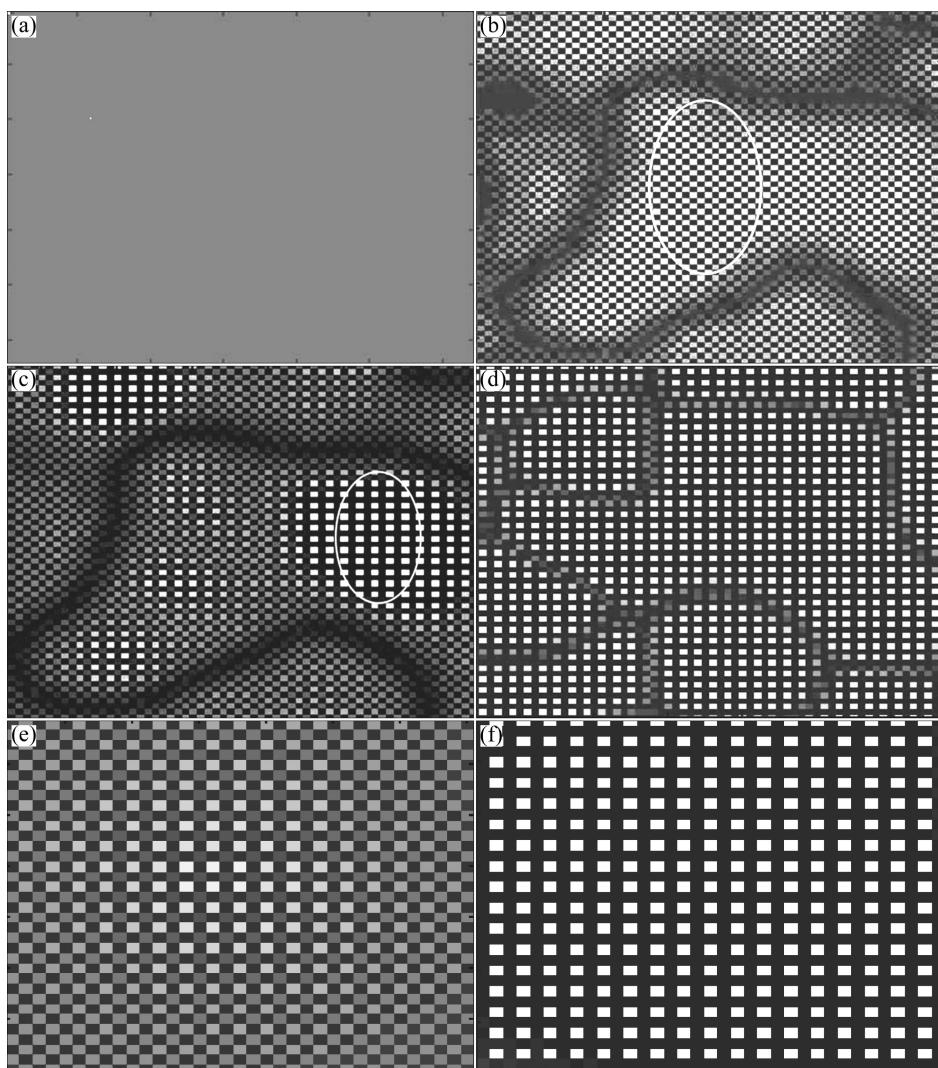


图 2 1123 K 下 Ni<sub>75</sub>Mn<sub>11.5</sub>Al<sub>13.5</sub> 合金沉淀过程的微观组织演化

**Fig. 2** Microstructure evolution of Ni<sub>75</sub>Mn<sub>11.5</sub>Al<sub>13.5</sub> alloy at 1123 K: (a)  $t=1\ 500$ ; (b)  $t=5\ 200$ ; (c)  $t=6\ 650$ ; (d)  $t=9\ 000$ ; (e) Enlargement of circled part in Fig. 2(b); (f) Enlargement of circled part in Fig. 2(c)

结构的二位投影相同, 由此可以确定无序基体中首先析出 L1<sub>0</sub> 结构。当  $t=6\,650$  时, L1<sub>0</sub> 结构内部开始出现不同结构, 表明 L1<sub>0</sub> 结构发生转变(见图 2(c)), 圆圈部分就是发生结构转变的另一种结构, 为方便比较, 将圆圈部分放大(见图 2(f)), 可以看出, 与图 1(a)中 L1<sub>2</sub> 有序结构的二位投影相同, 即 L1<sub>0</sub> 结构向 L1<sub>2</sub> 结构转变。当  $t=9\,000$  时, 转变基本完成, 形成边界明晰的 L1<sub>2</sub> 有序畴, 如图 2(d)所示。

从整个早期沉淀过程来看, 首先从基体中析出 L1<sub>0</sub> 结构, 然后在 L1<sub>0</sub> 结构的内部发生结构转变, 最终形成 L1<sub>2</sub> 稳定结构。

## 2.2 不同浓度合金早期沉淀过程的体积分数变化

在合金的早期沉淀过程中, 为了明确合金浓度对早期沉淀相数量的影响, 对沉淀相析出的体积分数进行研究。图 3 所示为 Al 的质量分数分别为 13.5%、14.5%、15.5% 和 16.5% 时沉淀相的体积分数变化。

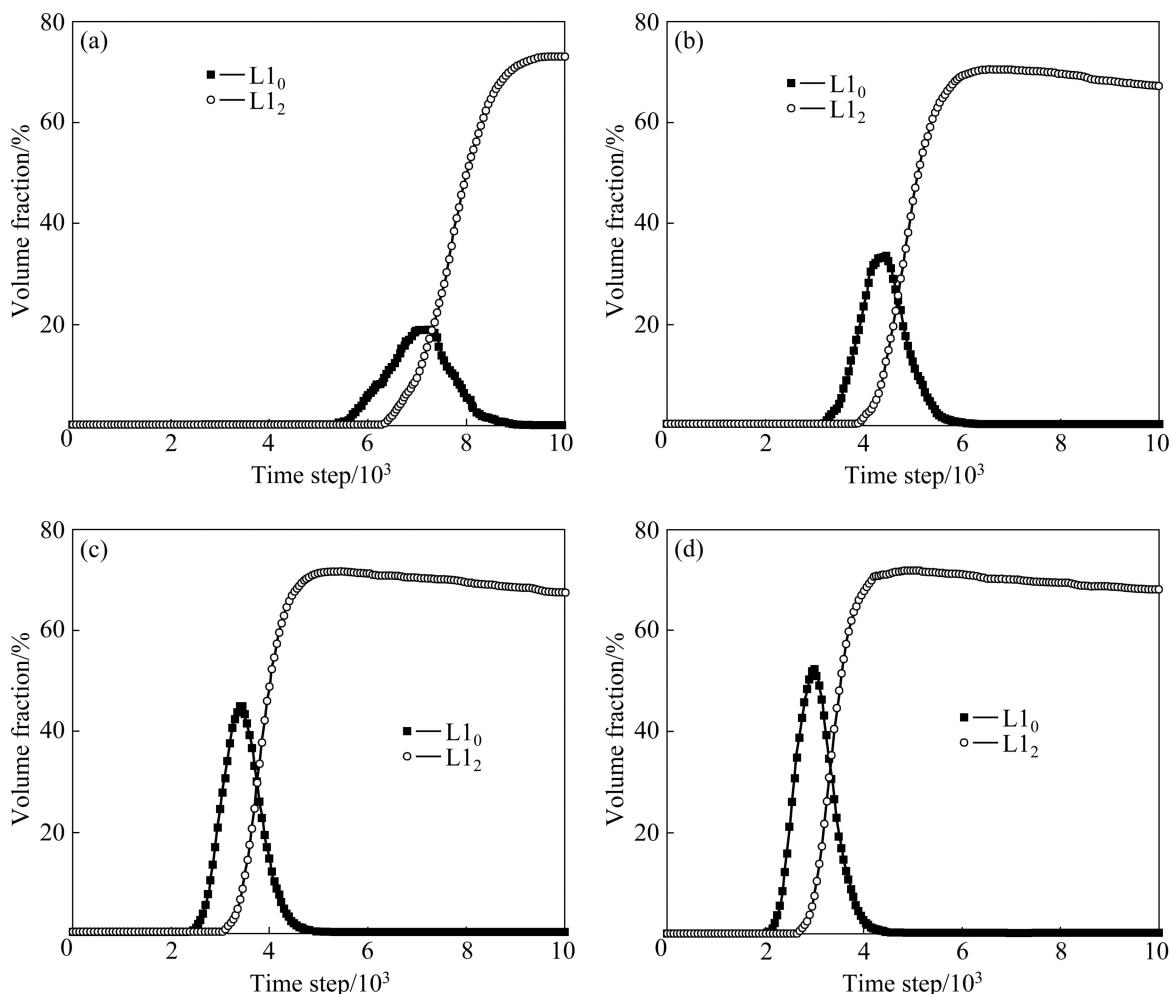


图 3 Ni<sub>75</sub>Mn<sub>x</sub>Al<sub>25-x</sub> 合金体系中 L1<sub>0</sub> 和 L1<sub>2</sub> 结构体积分数随时间的变化

**Fig. 3** Variation of volume fraction of L1<sub>0</sub> and L1<sub>2</sub> with time in Ni<sub>75</sub>Mn<sub>x</sub>Al<sub>25-x</sub> alloy system: (a)  $w(\text{Al})=13.5\%$ ; (b)  $w(\text{Al})=14.5\%$ ; (c)  $w(\text{Al})=15.5\%$ ; (d)  $w(\text{Al})=16.5\%$

当  $w(\text{Al})=13.5\%$  时(见图 3(a)), L1<sub>0</sub> 结构在  $t=5\,500$  开始从基体中析出, 随着时间的延长, L1<sub>0</sub> 结构逐渐明晰且析出速度变快。大约在  $t=6\,300$  时 L1<sub>2</sub> 结构首先在 L1<sub>0</sub> 结构内部析出。当 L1<sub>0</sub> 结构的体积分数达到 19% 时, 曲线出现拐点; 之后, L1<sub>0</sub> 结构的体积分数开始下降, 而 L1<sub>2</sub> 结构继续增多, 曲线的斜率增大, 这表明, 此时 L1<sub>0</sub> 结构加速向 L1<sub>2</sub> 结构转化。当  $t=8\,800$  时, L1<sub>0</sub> 结构的体积分数趋近于 0, 即 L1<sub>0</sub> 结构向 L1<sub>2</sub> 结构的转化完成。

当  $w(\text{Al})=14.5\%$  时(见图 3(b)), L1<sub>0</sub> 结构大约在  $t=3\,200$  析出, 这比  $w(\text{Al})=13.5\%$  时析出的时间要早。随后的沉淀相析出趋势与  $w(\text{Al})=13.5\%$  时的析出趋势相似, L1<sub>0</sub> 结构的体积分数迅速增大, 此时, L1<sub>2</sub> 结构也开始析出。由图 3(b)可以看出, 两结构的析出速度大致相同。当 L1<sub>0</sub> 结构的体积分数增大到 33% 时, 曲线出现拐点, 随后下降, L1<sub>0</sub> 结构最终消失, L1<sub>2</sub> 结构则继续增多, 最后达到平衡。

当  $w(\text{Al})=15.5\%$  时(见图 3(c)),  $\text{L}1_0$  结构的析出时间大约为  $t=2400$ , 析出时间比前两种情况下的提前, 但是, 随后的析出趋势相似。当  $t=3400$  时  $\text{L}1_0$  结构的体积分数达到最大值(44.8%), 然后, 曲线出现拐点,  $\text{L}1_0$  结构的体积分数开始下降。相应的  $\text{L}1_2$  结构的析出时间也有所缩短, 这表明孕育期进一步缩短, 且  $\text{L}1_0$  结构的最大体积分数也增大。

当  $w(\text{Al})=16.5\%$  时(见图 3(d)),  $\text{L}1_0$  结构的析出时间大约为  $t=2100$ , 在  $t=3000$  时其体积分数达到最大值, 然后, 开始下降。 $\text{L}1_2$  结构的析出时间大约为  $t=2700$ , 与前两种情况相似, 析出时间提前, 其后增长趋势相同。纵观整个沉淀过程,  $\text{L}1_0$  和  $\text{L}1_2$  结构的析出时间随 Al 浓度的增大而缩短, 表明 Al 浓度能够影响沉淀相的孕育期, 过渡相  $\text{L}1_0$  结构的体积分数也随着 Al 浓度的增大而增大,  $\text{L}1_0$  结构体积分数曲线出现拐点时间也随之提前, 最终  $\text{L}1_0$  结构全部转化为  $\text{L}1_2$  结构。 $\text{L}1_2$  结构在几种 Al 浓度下的增长趋势相似。

### 2.3 合金早期沉淀相的晶面有序化过程

在合金的沉淀过程中发生有序-无序转化, 这种变化不仅体现在体积分数上, 而且体现在晶面间原子有序排列上, 为此, 引入晶面序参数对有序相结构进行研究。

图 4 和 5 所示分别是 Al 的质量分数为 13.5%、14.5%、15.5% 和 16.5% 时沉淀相的成分序参数和长程序参数的量化图。浓度曲线反映晶面上某原子平均浓度的变化, 长程序参数反映该原子在晶面上的有序化状况。

如图 4(a)所示, 在  $t=2000$  之前, 两个面的成分序参数曲线重合, 即该时间段内(001)和(002)面上的浓度处于初始值, 而长程序参数几乎为 0(见图 5(a)), 表明此阶段基体处于无序状态。随着时间的延长, 两个面的长程序参数开始增大, 即(001)和(002)面内原子有序排列状况发生变化, 而在  $t=5500$  步之前成分序参数仍没有变化, 表明此阶段为等成分有序化阶段。在  $\approx$

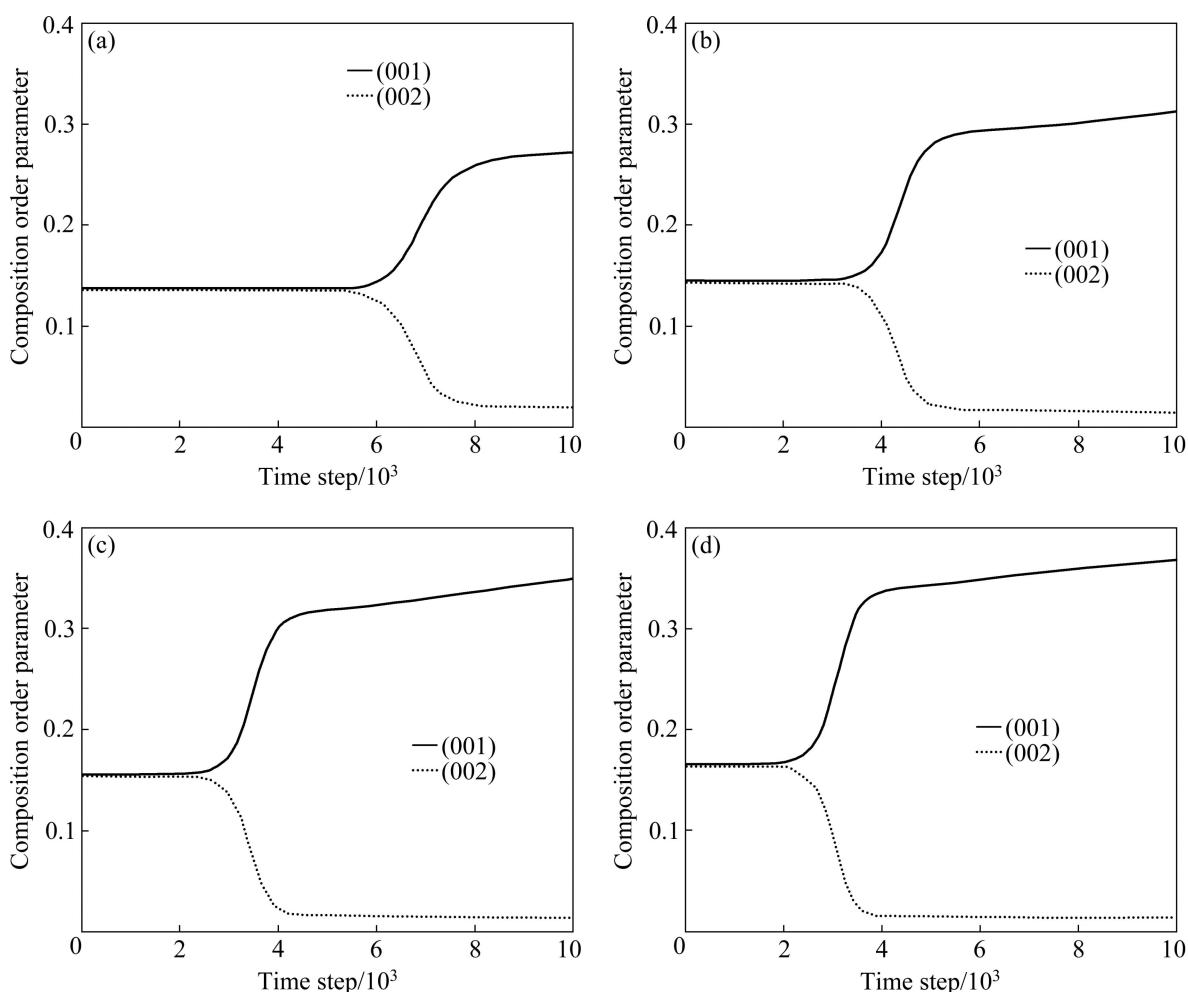


图 4  $\text{Ni}_{75}\text{Mn}_x\text{Al}_{25-x}$  合金中(001)和(002)面的成分序参数的变化

**Fig. 4** Temporal evolution of composition order parameter in (001) and (002) planes of  $\text{Ni}_{75}\text{Mn}_x\text{Al}_{25-x}$  alloy: (a)  $w(\text{Al})=13.5\%$ ; (b)  $w(\text{Al})=14.5\%$ ; (c)  $w(\text{Al})=15.5\%$ ; (d)  $w(\text{Al})=16.5\%$

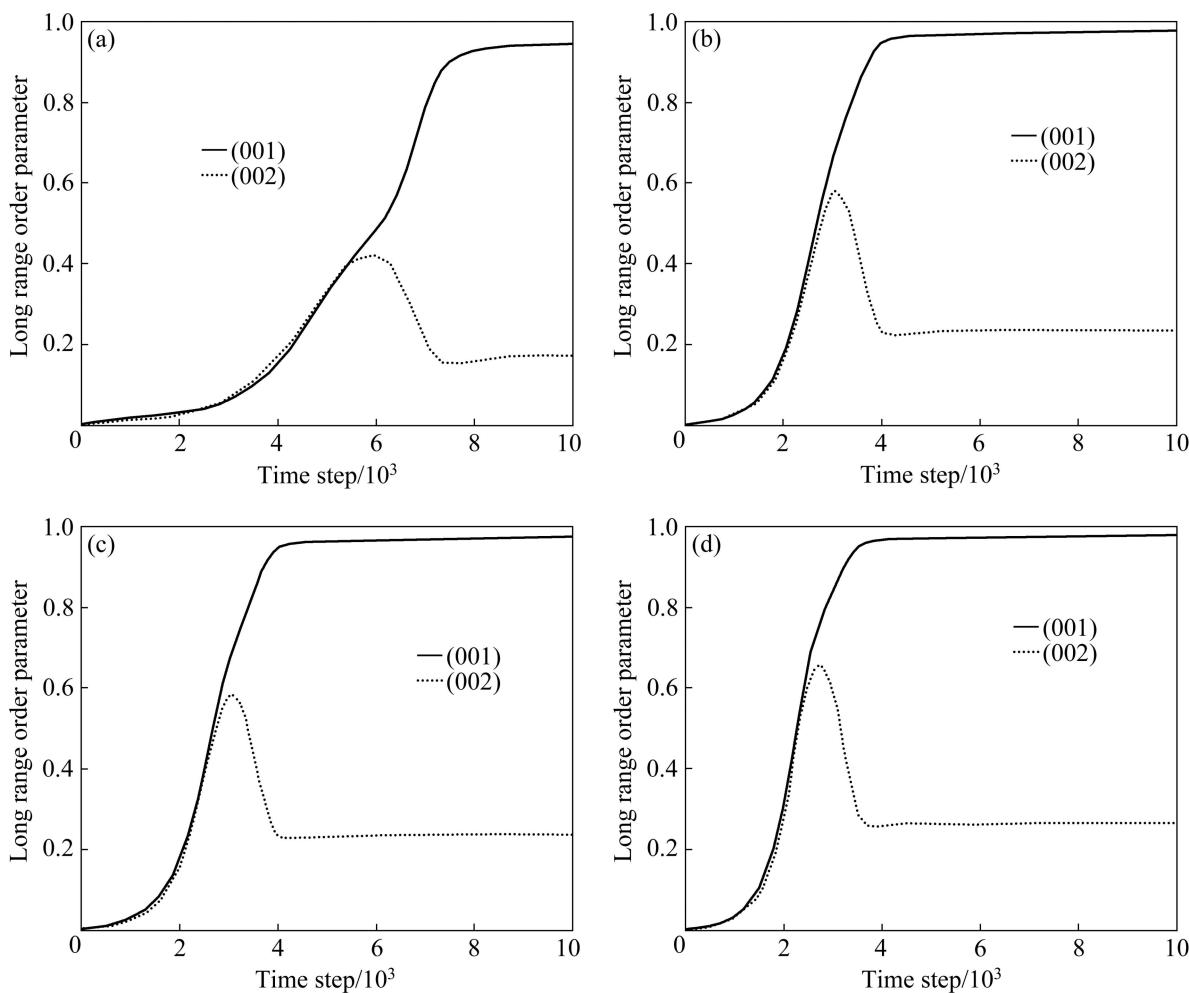


图 5 Ni<sub>75</sub>Mn<sub>x</sub>Al<sub>25-x</sub> 合金(001)和(002)晶面的长程序参数变化

**Fig. 5** Temporal evolution of long range order parameter in (001) and (002) planes of Ni<sub>75</sub>Mn<sub>x</sub>Al<sub>25-x</sub> alloy: (a)  $w(\text{Al})=13.5\%$ ; (b)  $w(\text{Al})=14.5\%$ ; (c)  $w(\text{Al})=15.5\%$ ; (d)  $w(\text{Al})=16.5\%$

6 000 时, 图 5(a)中长程序参数出现拐点, (002)面的长程序参数开始下降, 此时发生由 L<sub>1</sub><sub>0</sub> 结构向 L<sub>1</sub><sub>2</sub> 结构的转变, 这也与图 3(a)相对应。

当  $w(\text{Al})=14.5\%$  时(见图 4(b)), 在  $t=3 500$  处(001)面的成分序参数开始增大, 而(002)面的成分序参数开始下降, 即两晶面内原子排列在(001)面上富集, 在(002)面上贫化, 该曲线出现分离的时间较当  $w(\text{Al})=13.5\%$  时有所提前。当 Al 浓度增大时, 等成分有序化阶段缩短, 即浓度增大, 孕育期缩短。(001)面上的长程序参数变化速率增大(见图 5(b)), (002)面则紧随其后, 但是曲线的拐点出现的时间提前, 即提前发生结构转变。

当 Al 浓度继续增大时, 等成分有序化阶段继续缩短(见图 4(c)和(d)), L<sub>1</sub><sub>0</sub> 结构析出加快。(001)面长程序参数变化趋势与前述相同(见图 5(c)和(d)), 始终处于增大状态, 直至达到平衡。从成分序参数曲线可以

看出, 原子倾向于在(001)面有序排列; 而由长程序参数曲线可知, 随 Al 浓度的增大, (002)面的长程序参数出现拐点的时间逐次提前, 且拐点值也依次变大, 这表明 L<sub>1</sub><sub>0</sub> 结构的析出数量变大, 析出时间变短, 析出速度加快。

#### 2.4 合金早期沉淀过程占位几率的变化

为了进一步了解析出有序相的结构特征, 对相内不同位置处原子占位几率随浓度的变化进行研究。

取  $\alpha_1$ 、 $\alpha_{II}$  和  $\beta$  3 个位置的占位几率为研究对象, 其位置标注于图 1(b)中。在沉淀早期不同合金中 Al 原子在  $\alpha_1$  位均呈一段平衡状态, 如图 6(a)所示, 随着时间的延长, Al 原子在  $\alpha_1$  位的占位几率开始下降, 此时开始析出 L<sub>1</sub><sub>0</sub> 相, 且 Al 浓度增大时曲线开始下降的时间提前, 这表明增大 Al 浓度可以缩短 L<sub>1</sub><sub>0</sub> 相的孕育期。最后,  $\alpha_1$  位 Al 原子的占位几率处于 0.01 的平衡

状态。不同浓度下  $\alpha_{\text{II}}$  位的 Al 原子占位几率都趋于先增大后下降状态, Al 原子在此位置的占位几率有波动。 $\beta$  位的 Al 原子占位几率都趋于增大, 然后达到平衡状态, 表明 Al 原子倾向于占据  $\beta$  位。

Mn 原子在  $\alpha_{\text{I}}$  位的占位几率处于动态平衡状态,

仅有微小的波动, 如图 7(a)所示, 其平衡值保持在 0.10 左右。随着时间的延长, 在不同 Al 浓度下, Mn 原子在  $\alpha_{\text{II}}$  位的占位几率都增大, 如图 7(b)所示, 而在  $\beta$  位的占位几率则下降, 如图 7(c)所示, 这说明 Mn 原子倾向于挤占  $\alpha_{\text{II}}$  位。

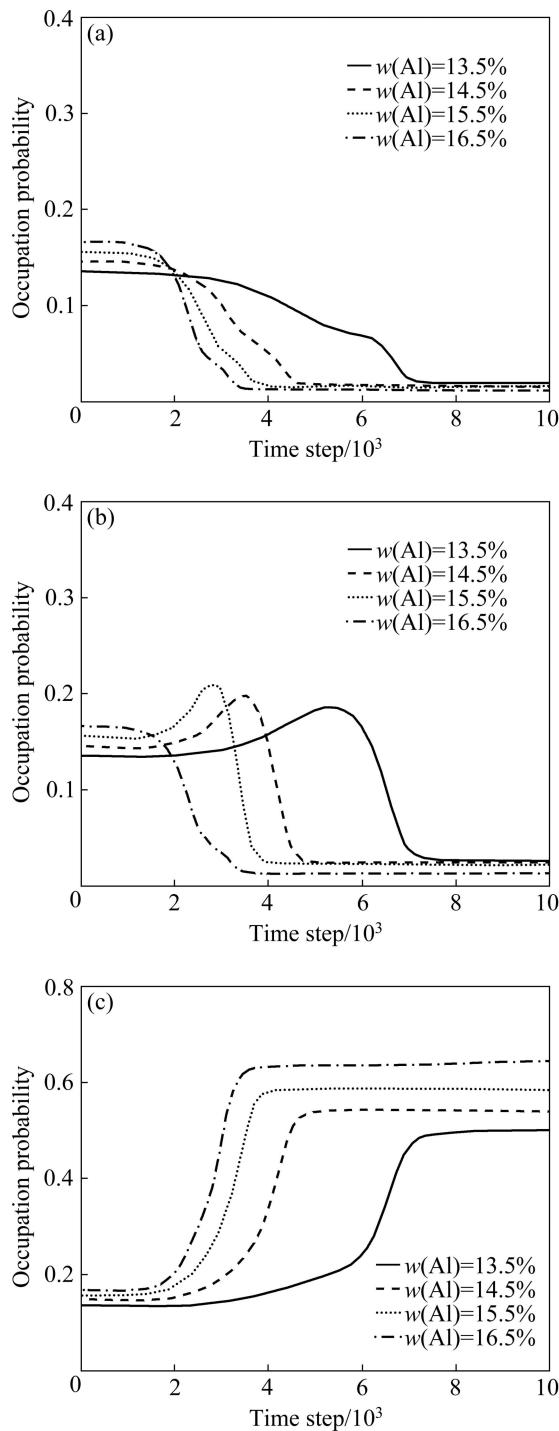


图 6  $\text{Ni}_{75}\text{Mn}_x\text{Al}_{25-x}$  合金中 Al 原子在  $\alpha_{\text{I}}$ 、 $\alpha_{\text{II}}$  和  $\beta$  处占位几率的变化

**Fig. 6** Occupation probability evolution of Al atom in  $\text{Ni}_{75}\text{Mn}_x\text{Al}_{25-x}$  alloy: (a)  $\alpha_{\text{I}}$  site; (b)  $\alpha_{\text{II}}$  site; (c)  $\beta$  site

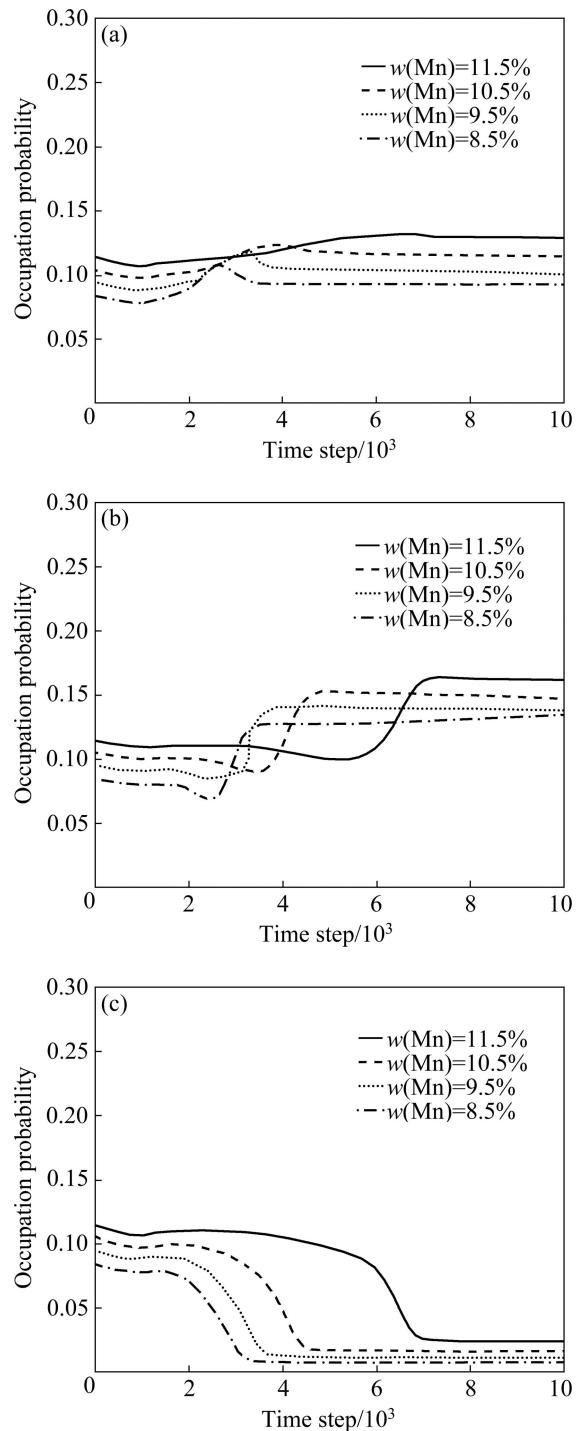


图 7  $\text{Ni}_{75}\text{Mn}_x\text{Al}_{25-x}$  合金中 Mn 原子在  $\alpha_{\text{I}}$ 、 $\alpha_{\text{II}}$  和  $\beta$  处占位几率的变化

**Fig. 7** Occupation probability evolution of Mn atom in  $\text{Ni}_{75}\text{Mn}_x\text{Al}_{25-x}$  alloy: (a)  $\alpha_{\text{I}}$  site; (b)  $\alpha_{\text{II}}$  site; (c)  $\beta$  site

### 3 结论

- 1) 合金沉淀序列为先析出 L<sub>1</sub><sub>0</sub> 相, 然后析出 L<sub>1</sub><sub>2</sub> 相, L<sub>1</sub><sub>2</sub> 相首先在 L<sub>1</sub><sub>0</sub> 相的内部析出。
- 2) 合金中 Al 原子的浓度影响 L<sub>1</sub><sub>0</sub> 相的析出数量, Al 原子浓度增大, L<sub>1</sub><sub>0</sub> 相的体积分数增大, 且析出时间缩短, L<sub>1</sub><sub>0</sub> 和 L<sub>1</sub><sub>2</sub> 相的成核孕育期缩短。
- 3) 沉淀过程首先经过等成分有序化阶段, 此阶段随 Al 原子浓度的增大而缩短。Al 和 Mn 原子在(001) 和(002)面几乎同时发生有序排列, 但随后在(002)面发生贫化, 即析出相发生结构转变。
- 4)  $\alpha_1$  和  $\alpha_{II}$  位的 Al 原子占位几率较低, 而  $\beta$  位的较高, Al 原子优先占据  $\beta$  位, Mn 原子挤占  $\alpha_{II}$  位的 Ni 原子。

### REFERENCES

- [1] 梁敏洁, 陈 钧, 王永欣, 褚 忠. 温度对 Ni-Al-Fe 合金早期沉淀过程的影响[J]. 稀有金属材料与工程, 2007, 36(10): 797–1801.  
LIANG Min-jie, CHEN Zheng, WANG Yong-xin, CHU Zhong. The temperature influence on early precipitation process of Ni-Al-Fe alloy[J]. Rare Metal Materials and Engineering, 2007, 36(10): 797–1801.
- [2] 苗树芳, 陈 钧, 王永欣, 徐 聰, 马 锐, 张明义. L<sub>1</sub><sub>0</sub> 相和 L<sub>1</sub><sub>2</sub> 相结构原位转变的微观相场法模拟[J]. 金属学报, 2009, 45(5): 630–634.  
MIAO Shu-fang, CHEN Zheng, WANG Yong-xin, XU Cong, MA Rui, ZHANG Ming-yi. Microscopic phase-field method simulation for the transformation in situ of L<sub>1</sub><sub>0</sub> phase and L<sub>1</sub><sub>2</sub> phase structure[J]. Acta Metallurgica Sinica, 2009, 45(5): 630–634.
- [3] SIROTA E B, HERHOLD A B. Transient phase-induced nucleation[J]. Science, 1999, 283: 529–532.
- [4] NI J, GU B L. Transient ordered states during relaxation from a quenched disordered state to an equilibrium disordered state[J]. Phys Rev Lett, 1997, 79(20): 3922–3925.
- [5] REINHARD L, TURCHI P E A. Transient ordered states in phase-separating alloys[J]. Phys Rev Lett, 1994, 72(1): 120–123.
- [6] BUSGEN T, FEYDT J, HASSDORF R, THIENHAUS S, MOSKE M. Ab initio calculation of structure and lattice dynamics in Ni-Al-Mn shape memory alloys[J]. Phys Rev B, 2004, 70: 014111.
- [7] GOMAN'KOV V I, KOVALEV A I, VAJNASHREIN D L, ZHIGALINA O M, TRET'YAKOVA S M, YKIN L E, CHEVYCHELOV V S. Atomic ordering in microcrystal-line alloys of the Ni<sub>3</sub>Mn-Ni<sub>3</sub>Al system[J]. Phys Metals and Metallogr, 2004, 98: 92–97.
- [8] GOMAN'KOV V I, FEDOTOV V G, GEZALYAN A D, TRET'YAKOVA B N, SUMIN V V, CHEVYCHELOV V S. Atomic ordering in Ni<sub>3</sub>Mn-Ni<sub>3</sub>Ti and Ni<sub>3</sub>Mn-Ni<sub>3</sub>V alloys[J]. Izv Ross Akad Nauk Met, 1993, 4(8): 200–204.
- [9] GOMAN'KOV V I, GEZALYAN A D B N, TRET'YAKOVA B N. Structural and magnetic states upon concentration transition Ni<sub>3</sub>Mn-Ni<sub>3</sub>V[J]. Fiz Met Metalloved, 1990, 10: 80–84.
- [10] VIJAY K S, SAURABH K S, RATNAMALA C, GOVIND G, SHIVPRASAD S M, NIGAM A K. Structural and magnetic phenomena in Ni<sub>53</sub>Mn<sub>25</sub>Al<sub>22</sub> thin film prepared by RF magnetron sputtering[J]. Appl Phys, 2009, 95: 114101.
- [11] SAURABH K S, VIJAY K S, LAJOS K, VLADIMIR V, KHOBAYLO V, RYOUSHIKE K, MAKOTO N, RATNAMALA C. Systematic study of structural, transport, and magnetic properties of Ni<sub>52+x</sub>Mn<sub>26-x</sub>Al<sub>22</sub> (1≤x≤5) melt-spun ribbons[J]. Journal of Applied Physics, 2011, 109: 083915.
- [12] KAINUMA R, ISE M, ISHIKAWA K, OHNUMA L, ISHIDA K. Phase equilibria and stability of the B<sub>2</sub> phase in the Ni-Mn-Al and Co-Mn-Al systems[J]. Alloys Compd, 1998, 269: 173–180.
- [13] GOMAN'KOV V I, TRET'YAKOVA S M, FEDOTOV V G, CHEVYCHELOV V A. Processes of atomic ordering in microcrystalline ternary alloys based on Ni<sub>3</sub>Mn[J]. Metal Science and Heat Treatment, 1995, 37: 6–8.
- [14] GOMAN'KOV V I, KOVALEV A I, VAINSSTEIN D L, ZHIGALINA O M, TRET'YAKOVA S M, FYKIN L E. Fine crystalline structure of microcrystalline alloys[J]. Doklady Physics, 2004, 49(5): 285–288.
- [15] GLEZER A M, GOMAN'KOV V I, BLINOVA E N. Abnormal behavior of the atomic order parameter during quenching of the Ni<sub>3</sub>(Mn, V) alloys from the liquid state[J]. Russian Physics Journal, 2006, 49(1): 1–4.
- [16] PODURI R, CHENL Q. Computer simulation of atomic ordering and compositional clustering in the pseudobinary Ni<sub>3</sub>Al-Ni<sub>3</sub>V system[J]. Acta Material, 1998, 46(5): 1719–1729.

(编辑 陈卫萍)