

## 微观相场模拟 B2-FeAl 金属间化合物有序畴界的形成和迁移

伍 林, 陈 铮, 庄厚川, 黄勇兵, 杨 涛

(西北工业大学 凝固技术国家重点实验室, 西安 710072)

**摘 要:** 基于微观相场动力学理论, 建立 B2 型金属间化合物的沉淀动力学方程, 研究 Fe-Al 合金时效处理时 B2-FeAl 有序畴界的形成和迁移。结果表明: B2-FeAl 金属间化合物有序畴的形核孕育期随时效温度的升高而延长, 随 Al 含量的增加而缩短; 有序畴的长程序参数随时效温度的升高而降低, 随 Al 含量的增加而先增大后减小; 有序畴界始终向其曲率中心运动, 且在曲率较大的地方其运动速率较大; 有序畴界的迁移遵循  $R^m(t)-R^m(0)=kt$  ( $m \approx 2$ ),  $m$  受合金成分和时效温度的影响很小, 但  $k$  的绝对值随着 Al 含量的降低而减小, 随时效温度的升高而增大。  
**关键词:** 微观相场; B2-FeAl 金属间化合物; 形核孕育期; 长程序参数; 有序畴界

中图分类号: TG111.5

文献标志码: A

## Microscopic phase-field simulation of formation and motion of ordered domain boundaries in B2-FeAl intermetallic compound

WU Lin, CHEN Zheng, ZHUANG Hou-chuan, HUANG Yong-bing, YANG Tao

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

**Abstract:** The precipitation kinetics function of B2 type intermetallic compound was established based on the microscopic phase-field kinetics theory, and it was used to investigate the formation and the motion of B2-FeAl ordered domain boundaries during aging of Fe-Al alloy. The results demonstrate that the nucleation incubation period of B2-FeAl ordered domains becomes longer with the increase of aging temperature, and it becomes shorter with the increase of Al content. The long-range order parameter of ordered domains decreases with the growth of aging temperature, and it first increases then decreases with the increase of Al content. The ordered domain boundaries move to their own centre of curvature all the time, and they move faster at where the curvature of ordered domain boundary is bigger. The rule  $R^m(t)-R^m(0)=kt$  ( $m \approx 2$ ) is obeyed when the ordered domain boundaries migrate, the value of  $m$  is affected very slightly by aging temperature and alloy composition, but the absolute value of  $k$  decreases with the decrease of Al content, increases with the increase of aging temperature.

**Key words:** microscopic phase-field; B2-FeAl intermetallics compound; nucleation incubation period; long-range order parameter; ordered domain boundary

B2 结构金属间化合物 FeAl 具有很多优异的性能, 如低密度、良好的抗氧化性和耐腐蚀性能以及成本低廉等, 这些特性使其有望成为新型的高温结构材料<sup>[1]</sup>。但由于其室温脆性的限制, FeAl 的实际应用受到制约。近年来对 Fe-Al 金属间化合物的研究主要集中在抗氧化性、抗腐蚀性、断裂脆性等实验研究方

面<sup>[2-7]</sup>, 而合金的有序度、原子缺陷以及晶体中的界面形成、结构及其迁移对材料的性能也有重要影响<sup>[8]</sup>, 因此, 研究 Fe-Al 金属间化合物的原子有序化、有序畴界的形成及其迁移行为具有重要意义。目前, 国际上对 Fe-Al 合金中的缺陷研究多集中于位错、空位及反位缺陷等<sup>[9-12]</sup>, 对有序畴界的研究甚少。

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(51075335, 51174168, 10902086, 51274167); 西北工业大学基础研究基金资助项目(NPU-FFR-JC20120222)

收稿日期: 2011-12-22; 修订日期: 2012-09-23

通信作者: 陈 铮, 教授, 博士; 电话: 029-88460502; E-mail: chenzh@nwpu.edu.cn

由于合金的有序化行为在纳米尺度内进行, 晶体内界面尺度也很小, 所以用实验方法研究合金有序化和界面的结构及行为时, 要求设备具有极高的分辨率, 而且实验手段只能对界面进行静态观察, 难以探明原子和界面的动态行为。计算机模拟则解决了这一问题, 可以从原子尺度清楚地研究上述各种现象。KHACHATURYAN<sup>[13]</sup>基于微观扩散方程创建了微观相场模型, PODURI 和 CHEN<sup>[14-16]</sup>将其成功应用于二元和三元面心立方金属间化合物的微结构演化。CHEN<sup>[17]</sup>认为微观相场法在研究微结构及其演化方面具有独特优势, 张明义等<sup>[18-19]</sup>利用微观相场法成功地研究了  $N_{75}Al_xV_{25-x}$  合金中的同相及异相有序畴界面的结构及其迁移特征; 张静等<sup>[20]</sup>探明了  $Ni_{75}Al_{5.3}V_{19.7}$  合金  $L1_2$  结构和  $D0_{22}$  结构中的反位缺陷及第三组元的择优占位规律; 苗树芳等<sup>[21]</sup>指出:  $Ni_{80}Al_{13}Cr_7$  合金通过两次原位转变来完成  $L1_0$  结构向  $L1_2$  结构转化。

目前, 微观相场法主要集中应用于面心立方结构的金属间化合物, 在体心立方结构中的应用还未见报导。本文作者基于微观扩散理论, 建立了 B2 结构中的沉淀动力学方程, 将微观相场模型推广到 B2 结构, 用于研究 Fe-Al 合金时效析出 B2-FeAl 金属间化合物有序畴的形成及有序畴界的迁移过程。

## 1 理论模型

### 1.1 体心立方晶格的微观相场动力学模型

微观相场模型采用离散格点形式的 Cahn-Hilliard 扩散方程, 如式(1)所示。该方程用溶质原子某一时刻  $t$  占据晶格的某一位置  $\mathbf{r}$  的几率  $P(\mathbf{r}, t)$  来描述原子的占位, 从而反应沉淀相形貌。  $P(\mathbf{r}, t)$  与热力学驱动力  $\frac{\partial F}{\partial P(\mathbf{r}, t)}$  之间呈如下线性关系<sup>[13]</sup>:

$$\frac{dP(\mathbf{r}, t)}{dt} = \frac{C_0(1-C_0)}{k_B T} \sum_{\mathbf{r}'} L(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \frac{\partial F}{\partial P(\mathbf{r}', t)} \quad (1)$$

式中:  $\mathbf{r}$ 、 $\mathbf{r}'$  分别为原子在时刻  $t$ 、 $t'$  所占晶格位置的向量;  $T$  为热力学温度;  $k_B$  为 Boltzmann 常数;  $C_0$  为溶质的摩尔分数;  $\sum_{\mathbf{r}'}$  表示对晶体中所有晶格位置

求和;  $L(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$  是与单位时间内由格点  $\mathbf{r}$  跃迁至  $\mathbf{r}'$  的几率有关的常数;  $F$  为系统的总自由能。在平均场近似下

$$F = 1/2 \sum_{\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{r}'} W(\mathbf{r}-\mathbf{r}') P(\mathbf{r}) P(\mathbf{r}') + k_B T \sum_{\mathbf{r}} [P(\mathbf{r}) \ln P(\mathbf{r}) + (1-P(\mathbf{r})) \ln(1-P(\mathbf{r}))] \quad (2)$$

式中:  $W(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$  为原子间有效作用能, 由下式给出:

$$W(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = W_{AA}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') + W_{BB}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') - 2W_{AB}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \quad (3)$$

式(1)为确定方程, 不能描述形核等热起伏的过程, 需在等式右端添加一随机起伏项

$$\xi(\mathbf{r}, t) = p_f \sqrt{2k_B T L(\mathbf{r}) \Delta t} \mu(\mathbf{r}, t) \quad (4)$$

式中:  $\mu(\mathbf{r}, t)$  为满足均值为 0、标准差为 1.0 的正态分布的随机数;  $\Delta t$  为时间步长;  $p_f$  是保持数值稳定的修正因子。将加入随机起伏项后的式(1)进行傅里叶变换, 得

$$\frac{d\tilde{P}(\mathbf{k}, t)}{dt} = \frac{C_0(1-C_0)}{k_B T} \tilde{L}(\mathbf{k}) \left\{ \frac{\partial F}{\partial P(\mathbf{r}, t)} \right\}_{\mathbf{k}} + \xi(\mathbf{k}, t) \quad (5)$$

由式(2)、(3)和(5)可得

$$\frac{d\tilde{P}(\mathbf{k}, t)}{dt} = \frac{C_0(1-C_0)}{k_B T} \tilde{L}(\mathbf{k}) \left\{ \tilde{V}(\mathbf{k}) \tilde{P}(\mathbf{k}, t) + k_B T \left[ \ln \left( \frac{P(\mathbf{r}, t)}{1-P(\mathbf{r}, t)} \right) \right]_{\mathbf{k}} \right\} + \xi(\mathbf{k}, t) \quad (6)$$

式中:  $\tilde{L}(\mathbf{k})$  和  $\tilde{V}(\mathbf{k})$  分别是  $L(\mathbf{k})$  和  $W(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$  的傅里叶变换。

$$\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z) = \frac{2\pi}{a} (h, k, l) = 2\pi(h\mathbf{a}_1^* + k\mathbf{a}_2^* + l\mathbf{a}_3^*) \quad (7)$$

式中:  $(h, k, l)$  是  $(x, y, z)$  的倒易空间坐标。对于体心立方晶格

$$\tilde{L}(\mathbf{k}) = 8L_1 [\cos(\pi h) \cdot \cos(\pi k) \cdot \cos(\pi l) - 1] \quad (8)$$

$$\tilde{V}(\mathbf{k}) = 8w_1 \cdot \cos(\pi h) \cdot \cos(\pi k) \cdot \cos(\pi l) + 2w_2 \cdot \cos(2\pi h) \cdot \cos(2\pi k) \cdot \cos(2\pi l) + 4w_3 [\cos(2\pi h) \cdot \cos(2\pi k) + \cos(2\pi k) \cdot \cos(2\pi l) + \cos(2\pi h) \cdot \cos(2\pi l)] \quad (9)$$

式中:  $w_1$ 、 $w_2$ 、 $w_3$  分别为 Fe、Al 原子间的第一、第二和第三近邻的原子间作用势,  $L_1$  是与最近邻晶格间跃迁几率成比例的常数。

### 1.2 体心立方晶格的二维投影

图 1 是 B2-FeAl 有序结构及其在 [001] 方向上的二维投影示意图。在二维投影中, 建立新的坐标系, 如图 1(b) 所示。由晶格结构及其几何关系可知

$$\mathbf{b}_1 = \frac{1}{2}(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2), \quad \mathbf{b}_2 = \frac{1}{2}(\mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_1), \quad \mathbf{b}_1、\mathbf{b}_2 \text{ 的倒易坐标}$$

矢量  $\mathbf{b}_1^* = \mathbf{a}_1^* + \mathbf{a}_2^*$ ,  $\mathbf{b}_2^* = \mathbf{a}_2^* - \mathbf{a}_1^*$ 。于是, 在此新坐标系下, 任一倒易矢量可表示为

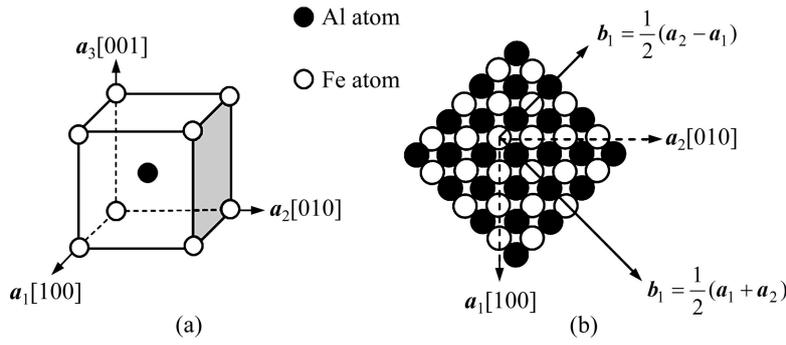


图 1 B2-FeAl 有序结构示意图及其在[001]方向的投影

Fig. 1 Structure of B2-FeAl ordered structure (a) and its projecti on on [001] orientation (b)

$$k' = 2\pi(h'b_1^* + k'b_2^*) = 2\pi[(h' - k')a_1^* + (h' + k')a_2^*] \quad (10)$$

对比式(7)和式(10), 用 $(h'-k', h'+k', 0)$ 替换式(8)和(9)中的 $(h, k, l)$ 可得

$$\begin{aligned} \tilde{V}(k') = & 8w_1 \cdot \cos[\pi(h' + k')] \cdot \cos[\pi(h' - k')] + \\ & 2w_2 \{ \cos[2\pi(h' + k')] + \cos[2\pi(h' - k')] + 1 \} + \\ & 4w_3 \{ \cos[2\pi(h' + k')] \cdot \cos[2\pi(h' - k')] + \\ & \cos[2\pi(h' - k')] + \cos[2\pi(h' + k')] \} \end{aligned} \quad (11)$$

$$\tilde{L}(k') = 8L_1 \{ \cos[\pi(h' + k')] \cdot \cos[\pi(h' - k')] - 1 \} \quad (12)$$

将式(11)和式(12)代入式(6)中, 即得体心立方晶格在二维投影下的动力学方程。

## 2 结果与分析

本研究选取 Al 含量(摩尔分数)分别为 24%、30%、34%、40%、45%和 50%的 Fe-Al 合金为研究对象, 模拟温度在 704~1 004 K 范围内。根据文献[22]中计算得到的 Fe-Al 相图, 此温度范围内的以上 Fe-Al 合金均处于 B2 型 FeAl 区域。

### 2.1 B2-FeAl 有序畴形貌演化

#### 2.1.1 温度对有序畴形成过程的影响

图 2 所示为 Fe-24%Al 合金的过饱和固溶体在不同温度下时效形成有序畴的形貌演化图。模拟采用  $128 \times 128$  格点, 在各个方向均应用周期性边界条件, 用不同颜色代表不同原子占位几率, 颜色越接近红色, 代表 Al 占据该位置几率越高, 越接近蓝色, 代表 Al 原子占据该位置的几率越低。Fe-Al 合金时效析出 B2-24%FeAl 有序畴的过程包括 3 个阶段: 成分聚集形核—长大—粗化。模拟的初始阶段, 给系统加上一

定步数的热噪声项, 使系统发生一定的成分起伏, 促进形核, 待形核稳定后, 去除热噪声项, 系统自动发生后续反应。时效的初始状态为完全无序的 Fe-24%Al 合金的过饱和固溶体。在  $T=704$  K 时效时, 当  $t=15\ 000$  步时, 系统中开始出现成分起伏, 原子开始簇聚, 形成微小的有序区域, 即 B2-FeAl 有序畴核心; 随着时效时间的延长, 这些核心有的长大, 有的消失, 在  $t=30\ 000$  步左右, 长大的有序畴相互碰撞接触, 畴内原子位相不同的畴之间便形成有序畴界, 每一块有序畴都被封闭的有序畴界包围; 当  $t=45\ 000$  步左右, 有序畴的长大过程结束, 开始粗化, 粗化的过程即有序畴界的迁移过程。由于有序畴界属于一种系统缺陷, 蕴藏界面能, 所以为了继续降低系统能量以使系统趋于稳定, 有序畴界将不断减少, 早期形成的弯曲的有序畴界变得越来越平滑, 封闭的有序畴界将越来越接近规则的“圆”; 这些“圆”不断收缩, 最终将消失。在不同温度下时效时, 有序畴的形成及有序畴界的迁移大体相同, 但形成的有序畴界的厚度是有差异的。通过对比图 2 中 704、804 和 904 K 下形成的有序畴界厚度发现, 温度较高时, 形成的有序畴界较厚(3~4 个 B2-FeAl 晶格常数), 温度较低时, 形成的有序畴界较窄(2~3 个 B2-FeAl 晶格常数), 这与 KRZANOWSKI 和 ALLEN<sup>[23]</sup>通过实验观测 Fe-25%Al(摩尔分数)合金中的有序畴界得到的数据相当。模拟所得图像与 ALLEN 和 CAHN<sup>[24]</sup>的实验观测以及 CHEN<sup>[25]</sup>利用“近似主方程模型”模拟的结果十分相似。

图 3 所示 Fe-24%Al 合金在不同温度下时效形成的有序畴的长程序参数(Long-range order parameter, LRO)随时间的变化曲线, 现以  $T=704$  K 所得曲线进行说明。由图 3 可见, 有序畴初始阶段长程序参数为零, 此阶段即为成分的簇聚及有序畴形核的孕育期;  $t=15\ 000$  时, 长程序参数开始急剧增大, 对应合金的有序畴的长大阶段; 在  $t=45\ 000$  步时, 有序畴的长大结

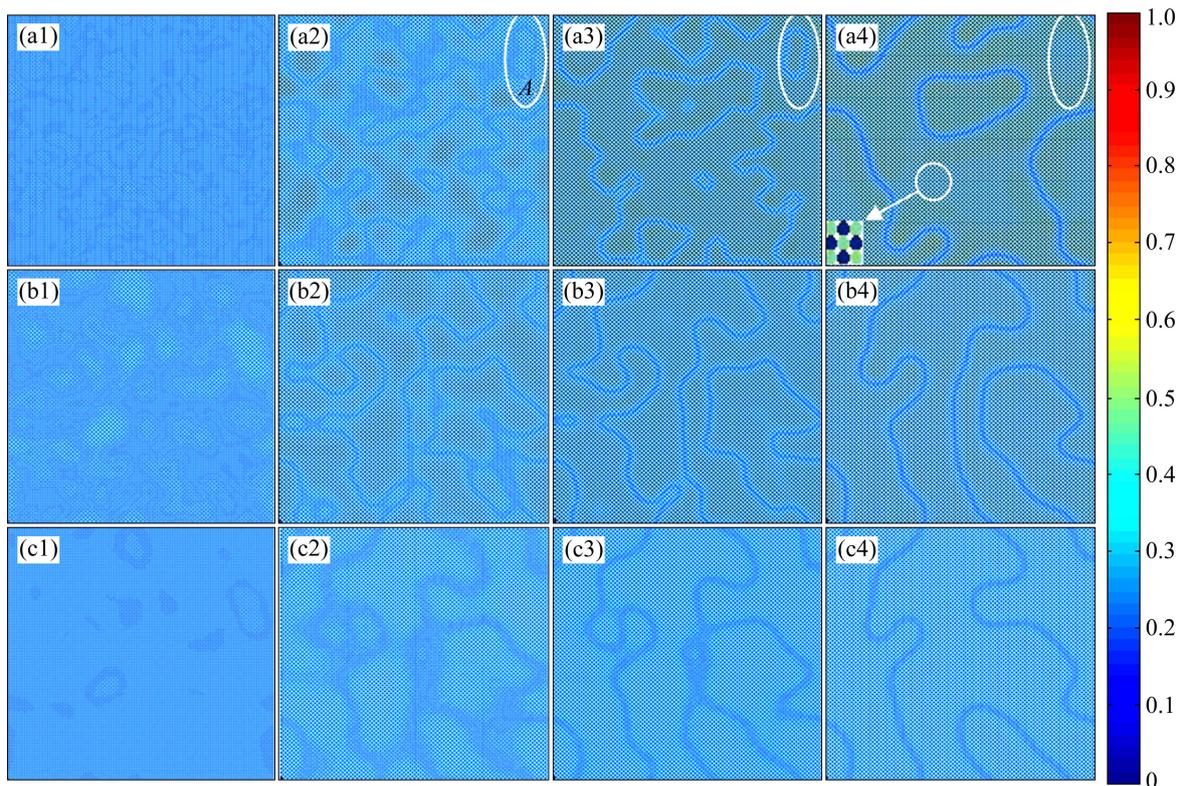


图2 Fe-24%Al合金在704、804和904 K下时效析出B2-FeAl有序畴的形貌演化图

Fig. 2 Morphology evolution of Fe-24%Al alloy during aging and precipitating B2-FeAl ordered domain at 704 (a), 804 (b) and 904 K (c): (a1)–(a4) Correspond to  $t=15\ 000, 30\ 000, 45\ 000, 300\ 000$ ; (b1)–(b4) Correspond to  $t=40\ 000, 65\ 000, 100\ 000, 300\ 000$ ; (c1)–(c4) Correspond to  $t=60\ 000, 140\ 000, 170\ 000, 300\ 000$  (The color code means the occupation probability of Al atoms.)

束并开始粗化，有序畴的长程序参数基本达到平衡值并保持这一值基本不变。对比不同温度下得到的3条曲线可以发现(见图3)，随着时效温度升高，有序畴的

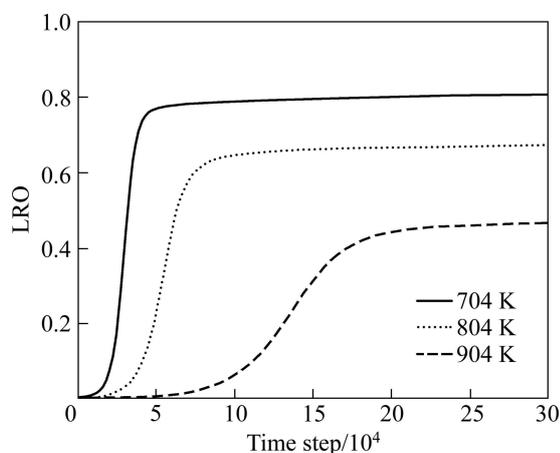


图3 Fe-24%Al合金在不同温度下时效析出B2-FeAl有序畴的长程序参数随时效时间的变化

Fig. 3 Long-range order parameter (LRO) as function of aging time during Fe-24%Al alloy aging and precipitating B2-FeAl ordered domain at different temperatures

形核所需要时间越来越长，最终形成有序畴的长程序参数越来越低。这是因为随着时效温度的升高，有序畴形核所需要的过冷度越来越低，因而形核时间越来越长。虽然B2-FeAl从室温到高温甚至熔点都保持有序结构，但真正的有序度仍然是温度的函数<sup>[8, 26]</sup>，所以随着温度的升高，越来越多的原子会离开自身的亚晶格成为反位置原子，从而导致B2-FeAl有序畴的有序度会随着温度的升高而降低<sup>[8, 27]</sup>，即B2-FeAl有序畴的长程序参数随着时效温度的升高而降低。

#### 2.1.2 合金成分对有序畴形成过程的影响

为了研究Fe-Al合金的成分对有序畴的形成及其有序度的影响，本研究模拟了Fe-30%Al、Fe-34%Al、Fe-45%Al、Fe-50%Al等成分的合金在704~1 004 K范围内的原子占位演化，其过程与Fe-24%Al合金的原子演化过程类似，也包括有序畴的形核、长大和粗化过程，不同的是Al含量越大，Fe、Al原子在各自的亚晶格上的占位几率也越高，在有序畴形貌演化图像上则反映为Fe、Al原子的占位更加分明。图4所示为Fe-45%Al合金的原子演化图像，红色格点代表Al原子在此格点占位几率较高，蓝色格点代表Fe原子在此

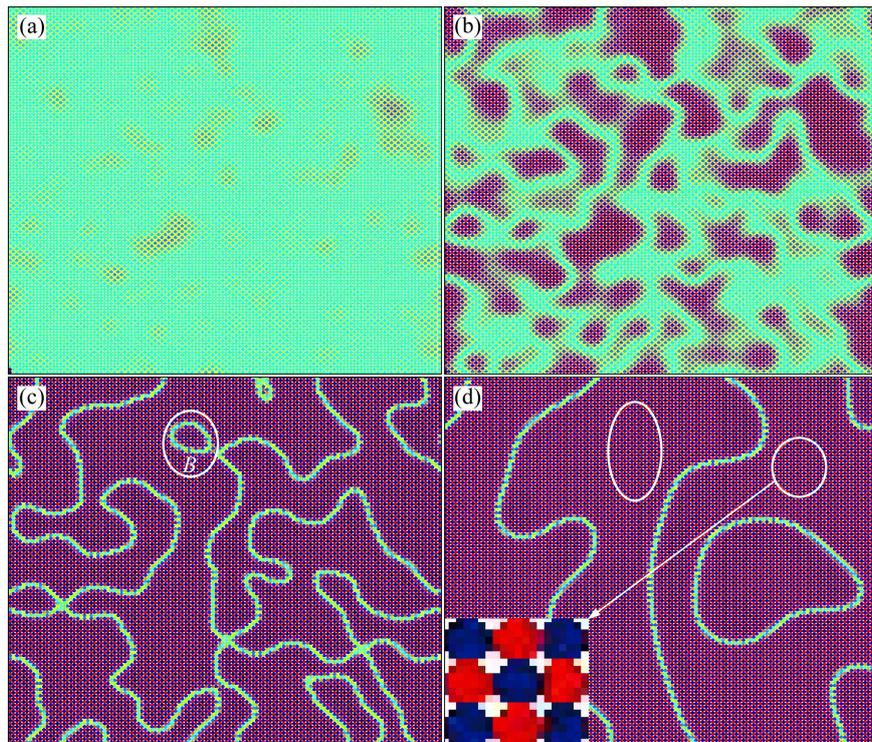


图 4 Fe-45% Al 合金在 804 K 下时效析出 B2-FeAl 有序畴的形貌演化图

Fig. 4 Morphology evolution of Fe-45%Al alloy during aging and precipitating B2-FeAl ordered domain at 804 K: (a)–(d) Correspond to  $t=15\,000, 20\,000, 35\,000, 300\,000$

处占位几率较高。由图 4 可见, 在  $t=15\,000$  时, 系统中开始有 B2-FeAl 核心形成; 当时效进行至  $t=20\,000$  时, 有序畴开始形成; 之后, 有序畴开始迁移并不断减少, 封闭的有序畴不断收缩, 如图 4(c)和(d)所示。

图 5 所示为不同成分 Fe-Al 合金在 804 K 下时效

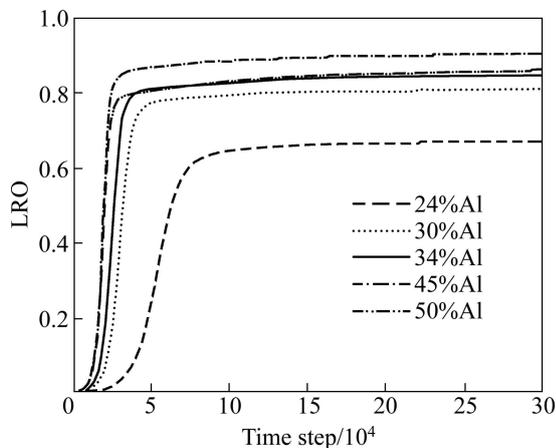


图 5 不同 Al 含量的 Fe-Al 合金在 804 K 下时效析出 B2-FeAl 有序畴的长程序参数随时效时间的变化

Fig. 5 Long-range order parameter as function of aging time during aging and precipitating B2-FeAl ordered domain in Fe-Al alloy at different Al contents

处理形成 B2-FeAl 有序畴的长程序参数随时效时间的变化曲线。如图 5 所示, 不同成分的 Fe-Al 合金形成的有序畴的长程序参数都经历了初始为零、迅速增长和达到最大并趋于平缓 3 个过程, 对应有畴的形核、长大和粗化过程。随着 Al 含量的增加, B2-FeAl 有序畴的形核孕育期会缩短, Al 含量约为 45% 时达到最短, 此后随 Al 含量的增加, 有序畴形核孕育期的长短变化甚微。B2-FeAl 的长程序参数随着 Al 含量的增加而增大, 在 Al 含量为 45% 左右达到最大, 当 Al 含量继续增大至 50% 的过程中, 有序畴的长程序参数的值有所减小。这是由于随着 Al 元素的增加, Fe 和 Al 元素的比例越来越接近 1:1, 更加容易形成 B2-FeAl 金属间化合物, 且形成的 B2-FeAl 有序畴也更稳定, 其长程序参数的值也更大。当 Al 含量达到 45% 时, 有序畴的长程序参数达到最大; 当 Al 含量继续增大时, B2-FeAl 有序畴中的反位缺陷开始增多<sup>[12]</sup>, 从而使其长程序参数有所减小。

## 2.2 有序畴界的迁移

Fe-Al 合金在相图中单相 B2-FeAl 区域时效时, 形核后开始长大, 形成微小的 B2-FeAl 有序畴, 长大的有序畴相互接触碰撞, 形成界面, 这种界面称为有

有序畴界。有序畴界可以由位错终止,也可通过有序畴界自身的迁移运动而消失,如图2中A和图4中B所示。

为了更加详细地研究 Fe-Al 合金时效过程形成的 B2-FeAl 有序畴界的迁移,图6选取了 Fe-50%Al 合金在 804 K 时效形成的一个封闭有序畴界放大进行观察。由图6可见,初始不规则的有序畴界先通过各处的有序畴界的迁移,变成一个较为规则的椭圆状封闭的有序畴界。在这个过程中(见图6(a)),A处的有序畴界向外侧移动,B处向内侧移动,C处向内侧移动,D处向外侧移动,E处向内侧移动。它们的移动都是朝着其曲率中心进行,而移动的速率与其曲率大小紧密相关,曲率大的C和E处移动最快,A和B处次之,D处最小。当 $t=70\,000$ 步左右时,一个基本规则的椭圆形封闭有序畴界形成,可以发现A、B通过迁移调整,使此处原本扭曲的有序畴界变得圆滑,且A和D处的曲率中心转向了内侧。此后,A、B和D3处由于曲率很小,迁移速率很慢,但C和E处的曲率一直较大,因此,C和E一直向着“椭圆”中心移动。这样相当于“椭圆”的短轴基本保持不变,长轴快速缩短,在 $t=110\,000$ 步左右,封闭的有序畴界变为了较为规则的“圆”。此后,各处的曲率基本相当,各处都向着“圆心”迁移,最终,“圆”将不断收缩,直至消失。

图7所示为取图4中B区域的封闭有序畴界包围的有序畴的平均半径随时间的变化,取该有序畴界的形成时刻为初始时刻 $t=0$ ,有序畴的半径为 $R$ ,有序畴的投影面积 $S=\pi R^2$ ,用下式对模拟得到的数据进行拟合:

$$R^m(t)-R^m(0)=kt \quad (13)$$

式中: $m$ 是待确定的指数; $R(t)$ 是经过时间步数 $t$ 后有序畴的半径; $R(0)$ 是初始时刻有序畴的半径; $k$ 是比例系数,与有序畴移动速率成正比; $t$ 是时间步数。

如图7中虚线所示,在 $m=2.17$ 时拟合效果最好。ALLEN和CAHN<sup>[24]</sup>用微观理论解释了有序畴的粗化以及畴界的运动,指出 $m=2$ ,如图7中实线所示。可见,本研究模拟结果与理论结果吻合较好,尤其是在有序畴半径减小的前期,两线几乎重合,只在后期有较小的差别,造成这一差距的原因,包括模拟所选格点数<sup>[28]</sup>、计算过程中有序畴边界值的确定、所选有序畴界的规则程度(接近标准圆的程度)等。

表1所列 $T=804\text{ K}$ 时不同成分下用式(13)拟合得到的 $m$ 和 $k$ 值。Al含量为50%时得到的 $m$ 值较其他成分下的 $m$ 值略大,但受成分的影响甚微,这与WANG和CHEN<sup>[28]</sup>采用点近似下的微观主方程模型所得结论一致。 $k$ 的绝对值随着Fe-Al合金中Al含量

表1 不同Al含量的Fe-Al合金在804 K下得到式(13)的 $m$ 值和 $k$ 值

Table 1 Values for  $m$  and  $k$  of Eqn. (13) for Fe-Al alloy at 804K and different Al contents

$x(\text{Al})/\%$	$m$	$k$
50	2.17	$-3.69 \times 10^{-5}$
45	2.17	$-3.54 \times 10^{-5}$
40	2.10	$-2.73 \times 10^{-5}$
34	2.13	$-2.63 \times 10^{-5}$
30	2.06	$-2.48 \times 10^{-5}$
24	2.01	$-2.28 \times 10^{-5}$

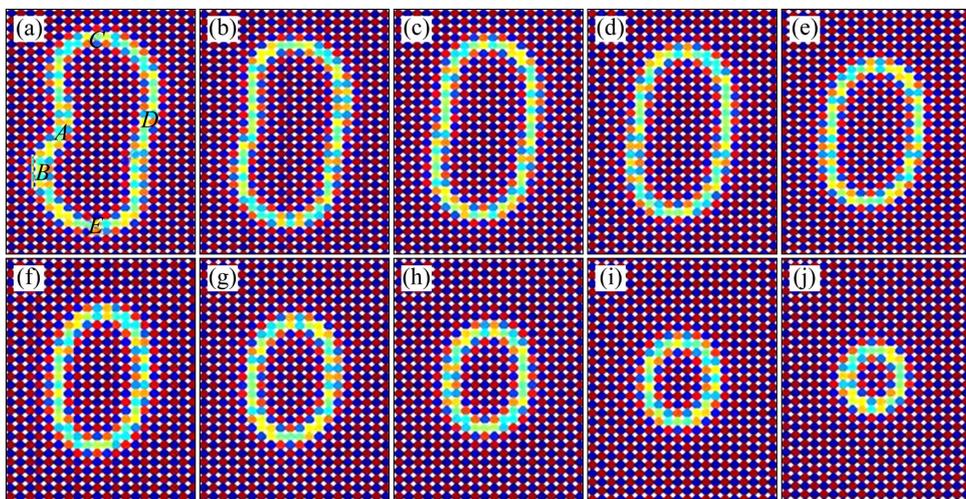


图6 Fe-50%Al合金在804 K时效形成的封闭有序畴界随时效时间的演化

Fig. 6 Morphology evolution of circular ordered domain boundary in Fe-50%Al alloy with aging time during aging at 804 K: (a)-(j) Correspond to  $t=30\,000, 40\,000, 50\,000, 60\,000, 70\,000, 80\,000, 90\,000, 100\,000, 110\,000, 120\,000$

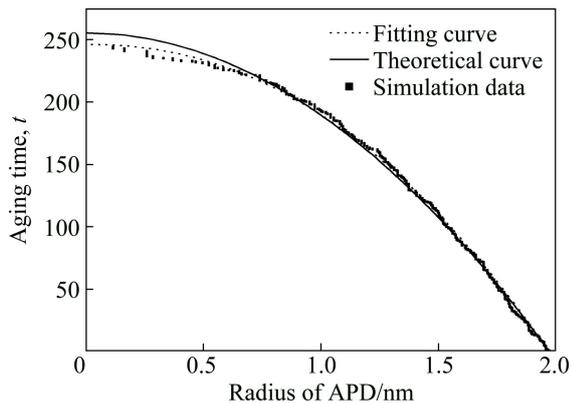


图 7 B2-FeAl 有序畴半径与时效时间的关系

Fig. 7 Relationship between radius of B2-FeAl ordered domain and aging time

的降低而减小,这是因为随着 Al 含量的降低,B2-FeAl 有序畴界的厚度增加,而原子的扩散与界面厚度呈反比,所以原子的扩散减慢,从而使有序畴界的移动速率降低。

通过对比表 2 中同一成分的 Fe-Al 合金在不同温度下时效得到的  $m$  和  $k$  的值,可以发现温度对  $m$  的影响也很小,而  $k$  的绝对值随温度的升高一直增大,这是由于随着温度的升高,系统扩散加快,原子的迁移速率增大,从而使 B2-FeAl 有序畴界的迁移速率加快。

表 2 Fe-50%Al 合金在不同温度时效得到式(13)中的  $m$  和  $k$  值

Table 2 Values for  $m$  and  $k$  of Eqn. (13) for Fe-50%Al alloy aging at different temperatures

Temperature/K	$m$	$k$
704	2.13	$-3.64 \times 10^{-5}$
804	2.17	$-3.69 \times 10^{-5}$
904	2.16	$-3.83 \times 10^{-5}$
1 004	2.08	$-4.89 \times 10^{-5}$

### 3 结论

1) B2-FeAl 金属间化合物有序畴的形核孕育期随时效温度的升高而延长,随 Al 含量的增大而缩短。

2) B2-FeAl 金属间化合物有序畴的长程序参数随时效温度的升高而降低,随 Al 含量的增加先增大后减小。

3) B2-FeAl 金属间化合物中有序畴界始终向着各

处的曲率中心迁移,且曲率较大的地方迁移速率较快,通过这种方式使扭曲的有序畴界变得圆滑,并向着使有序畴成为圆形而迁移。

4) B2-FeAl 金属间化合物中有序畴界的迁移遵循  $R^m(t) - R^m(0) = kt (m \approx 2)$ ,  $m$  受合金成分和时效温度的影响很小,即可认为有序畴的大小与时效时间呈线性关系。 $k$  的绝对值随时效温度的升高而增大,随 Al 含量的降低而减小。

### REFERENCES

- [1] HARAGUCHI T, YOSHIMI K, YOO M H, KATO H, HANADA S, INOUE A. Vacancy clustering and relaxation behavior in rapidly solidified B2 FeAl ribbons[J]. Acta Mater, 2005, 53(13): 3751-3764.
- [2] FUKS D, STRUTZ A, KIV A. Influence of alloying on the thermodynamic stability of FeAl B2 phase[J]. Intermetallics, 2006, 14(10/11): 1245-1251.
- [3] EKMEKCILER E, POLAT A, USTA M. Hard boride coating on iron aluminide (FeAl)[J]. Surf Coat Tech, 2008, 22(24): 6011-6015.
- [4] BARNOUSH A, DAKE J, KHERADMAND N, VEHOFF H. Examination of hydrogen embrittlement in FeAl by means of in situ electrochemical micropillar compression and nanoindentation techniques[J]. Intermetallics, 2010, 18(7): 1385-1389.
- [5] MA Xing-wei, JIN Zhu-ji, YAN Shi, XU Jiu-jun. Effect of  $\text{La}_2\text{O}_3$  on microstructure and high-temperature wear property of hot-press sintering FeAl intermetallic compound[J]. J Rare Earth, 2009, 27(6): 1031-1036.
- [6] SHEN P Z, HE Y H, GAO H Y, ZOU J, XU N P, JIANG Y, HUANG B Y, LIU C T. Development of a new graded-porosity FeAl alloy by elemental reactive synthesis[J]. Desalination, 2009, 249: 29-33.
- [7] GAO Hai-yan, HE Yue-hui, SHEN Pei-zhi, ZOU Jin, XU Nan-ping, JIANG Yao, HUANG Bai-yun, LIU C T. Porous FeAl intermetallics fabricated by elemental powder reactive synthesis[J]. Intermetallics, 2009, 17(12): 1041-1046.
- [8] LANG H, ROHRHOFER K, ROSENKRANZ P. Long-range ordering in B2 FeAl: A resistometric study[J]. Intermetallics, 2002, 10(3): 283-292.
- [9] 邓文, 熊良钺, 王淑荷, 郭建亭, 龙期威. Fe-Al 系金属间化合物中的微观缺陷和电子密度[J]. 金属学报, 2002, 38(5): 453-457.
- [10] DENG Wen, XIONG Liang-yue, WANG Shu-he, GUO Jian-ting, LONG Qi-wei. Microdefects and electron densities in Fe-Al intermetallic compounds[J]. Acta Metallurgica Sinica, 2002, 38(5): 453-457.
- [10] 孙蔚, 吴杰, 韩福生. Fe-Al 合金中与 Al 反位置原子弛豫有关的内耗峰[J]. 金属学报, 2007, 43(3): 311-314.

- SUN Wei, WU Jie, HAN Fu-sheng. The Internal friction peak correlated to the relaxation of Al antisite atoms in Fe-Al alloy[J]. *Acta Metallurgica Sinica*, 2007, 43(3): 311–314.
- [11] STRAHI A, GOLOVINA S B, GOLOVIN I S, NEUHAUSER H. On dislocation-related internal friction in Fe-22-31at.%Al[J]. *J Alloys Compd*, 2004, 378(1/2): 268–273.
- [12] BIBORSKI A, ZOSIAK L, KOZUBSKI R, SOT R, PIERRON-BOHNES V. Semi-grand canonical Monte-Carlo simulation of ternary bcc lattice-gas decomposition: Vacancy formation correlated with B2 atomic ordering in A-B intermetallics[J]. *Intermetallics*, 2010, 18(12): 2343–2352.
- [13] KHACHATURYAN A G. Theory of structural transformation in solids[M]. New York: Wiley, 1983: 139–135.
- [14] PODURI R, CHEN L Q. Computer simulation of the kinetics of order-disorder and phase separation during precipitation of  $\delta'(Al_3Li)$  in Al-Li alloys[J]. *Acta Mater*, 1997, 45(1): 245–255.
- [15] PODURI R, CHEN L Q. Computer simulation of morphological evolution and coarsening kinetics of  $\delta'(Al_3Li)$  precipitates in Al-Li alloys[J]. *Acta Mater*, 1998, 46(11): 3915–3928.
- [16] PODURI R, CHEN L Q. Computer simulation of atomic ordering and compositional clustering in the pseudobinary  $Ni_3Al-Ni_3V$  system[J]. *Acta Mater*, 1998, 46(5): 1719–1729.
- [17] CHEN L Q. Phase-field models for microstructure evolution[J]. *Annu Rev Mater Res*, 2002, 32: 113–140.
- [18] 张明义, 王永欣, 陈 铮, 张 静, 赵 彦, 甄辉辉. Ni-Al-V 合金 L1<sub>2</sub> 相间有序畴界面的微观相场模拟[J]. *金属学报*, 2007, 43(10): 1101–1106.
- ZHANG Ming-yi, WANG Yong-xin, CHEN Zheng, ZHANG Jing, ZHAO Yan, ZHEN Hui-hui. Simulation of ordered domain interfaces formed between L1<sub>2</sub> phases in Ni-Al-V alloy using microscopic phase-field model[J]. *Acta Metallurgica Sinica*, 2007, 43(10): 1101–1106.
- [19] 张明义, 王永欣, 陈 铮, 董卫平, 来庆波, 张利鹏. Ni-Al-V 合金 D0<sub>22</sub> 相间有序畴界面的微观相场模拟[J]. *稀有金属材料与工程*, 2009, 38(6): 962–966.
- ZHANG Ming-yi, WANG Yong-xin, CHEN Zheng, DONG Wei-ping, LAI Qing-bo, ZHANG Li-peng. Simulation of ordered domain interfaces formed between D0<sub>22</sub> phases in Ni-Al-V alloy using microscopic phase-field model[J]. *Rare Metal Materials and Engineering*, 2009, 38(6): 962–966.
- [20] 张 静, 陈 铮, 王永欣, 卢艳丽, 霍进良, 甄辉辉, 赵 彦. 微观相场法模拟 Ni<sub>75</sub>Al<sub>5.3</sub>V<sub>19.7</sub> 中 L1<sub>2</sub> 和 D0<sub>22</sub> 结构反位缺陷的演化[J]. *物理学报*, 2009, 58(1): 631–637.
- ZHANG Jing, CHEN Zheng, WANG Yong-xin, LU Yan-li, HUO Jin-liang, ZHEN Hui-hui, ZHAO Yan. Microscopic phase field simulation for the evolution of antisite defect of L1<sub>2</sub> structure and D0<sub>22</sub> structure in Ni<sub>75</sub>Al<sub>5.3</sub>V<sub>19.7</sub> alloy[J]. *Acta Physica Sinica*, 2009, 58(1): 631–637.
- [21] 苗树芳, 陈 铮, 王永欣, 徐 聪, 马 锐, 张明义. L1<sub>0</sub> 相和 L1<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 in situ transformation of L1<sub>0</sub> phase and L1<sub>2</sub> phase structure[J]. *Acta Metallurgica Sinica*, 2009, 45(5): 630–634.
- [22] ALONSO P R, GARAGANO P H, BOZZANO P B. Combined ab initio and experimental study of A2+L21 coherent equilibria in the Fe-Al-X (X=Ti, Nb, V) systems[J]. *Intermetallics*, 2011, 19(8): 1157–1167.
- [23] KRZANOWSKI J E, ALLEN S M. Segregation to static and migrating diffuse antiphase boundaries[J]. *Surf Sci*, 1984, 144(1): 153–175.
- [24] ALLEN S M, CAHN J W. A microscopic theory for antiphase boundary motion and its application to antiphase domain coarsening[J]. *Acta Metallurgica*, 1979, 27(6): 1085–1095.
- [25] CHEN L Q. Kinetics of ordering and spinodal decomposition in the pair approximation[J]. *Physical Review B*, 1998, 58(9): 5266–5274.
- [26] LIUBICH V, DORFMAN S, FUKS D, MEHRER H. Thermodynamic factor evaluated from diffuse X-ray scattering[J]. *Mater Trans JIM*, 1999, 40(2): 132–136.
- [27] PFEILER W, SPRUSIL B. Atomic ordering in alloys: Stable states and kinetics[J]. *Mater Sci Eng A*, 2002, 324(1/2): 34–42.
- [28] WANG Q, CHEN L Q. Solute segregation and antiphase boundary motion in a B2 single phase[J]. *Acta Mater*, 1999, 47(13): 3695–3703.

(编辑 何学锋)