

# 三维相场法模拟弹性能作用下 Ni 基合金 $\gamma'$ 相颗粒的粗化动力学

周广钊, 王永欣, 陈 铮

(西北工业大学 凝固技术国家重点实验室, 陕西 西安 710072)

**摘要:** 基于三维相场模型, 研究了弹性能对  $\gamma'$  相颗粒形貌、取向和多颗粒合并行为的影响, 以及沉淀相体积分数对  $\gamma'$  相颗粒数目、平均尺寸和尺寸分布的影响。结果表明: 弹性能作用下  $\gamma'$  颗粒形貌为立方体形或者长方体形, 且沿  $\langle 100 \rangle$  弹性软方向分布。弹性能对同相多颗粒合并行为的影响主要取决于与颗粒分布、尺寸及畴界间距等有关的弹性交互作用。随着沉淀相体积分数的增加, 颗粒数目先增加至最大值后减少, 颗粒平均尺寸逐渐增加。

**关键词:** 三维相场法; 粗化动力学; 弹性能; Ni 基合金

**中图分类号:** TG146.1<sup>+</sup>5

**文献标识码:** A

**文章编号:** 1002-185X(2014)04-0916-06

镍基高温合金作为目前先进航空发动机和工业燃气涡轮叶片等热端部件的主要用材之一而备受关注。其典型的显微组织为弥散分布的有序面心立方金属间化合物  $\gamma'$  相及无序面心立方基体  $\gamma$  相, 其中  $\gamma'$  相为主要强化相<sup>[1]</sup>, 强化程度取决于颗粒的体积分数、组织形态、尺寸及空间分布<sup>[2-4]</sup>。相变过程中, 沉淀相从基体中析出。析出的沉淀相与基体呈共格关系, 两者晶格参数的差异导致点阵错配, 产生弹性场, 其与周围沉淀相颗粒形成的弹性场叠加, 产生弹性交互作用, 对沉淀相颗粒的尺寸、形态、取向、空间相关性 & 特殊的粗化行为有显著影响, 从而在一定程度上影响合金的许多重要性质, 如机械强度、韧性、抗蠕变和抗磨损等性能。因此, 研究弹性能作用下镍基合金  $\gamma'$  相颗粒的粗化动力学, 对深入理解沉淀相变机理及通过显微组织来控制材料性能等具有重要意义。

对镍基合金  $\gamma'$  相颗粒的相场法研究, 已有学者在二维尺度展开了工作<sup>[2,5-18]</sup>, 但对弹性能作用下三维尺度的模拟缺少系统和深入的研究。因此, 本工作将采用三维相场模型系统地研究弹性能作用下镍基合金  $\gamma'$  相颗粒的粗化动力学, 并分析弹性能对多颗粒合并行为及沉淀相体积分数对  $\gamma'$  相粗化动力学的影响, 以期更好地理解镍基合金  $\gamma'$  相的粗化动力学。

## 1 相场模型

### 1.1 模型的建立

相场方法作为一种强大的计算模拟方法已广泛应用于模拟和预测材料介观形态及微观结构的演化<sup>[19]</sup>, 模型中采用一系列在界面处连续变化的保守及非保守场变量来描述材料的微观结构, 并通过求解场变量的控制方程组——Cahn-Hilliard 或 (和) Allen-Cahn (Ginzburg-Landau) 动力学方程组得到材料微观结构在时空间的演化。本文采用基体为无序面心立方 (fcc) 结构、析出相为有序 L1<sub>2</sub> 结构的二元相场模型。模型中定义保守场变量  $c(\mathbf{r}, t)$  为成分场变量来描述成分分布, 其在基体和析出相内部取值分别为 0.115 和 0.235, 在晶界处介于两者之间并连续变化。定义非保守场变量  $\eta_1(\mathbf{r}, t)$ 、 $\eta_2(\mathbf{r}, t)$  及  $\eta_3(\mathbf{r}, t)$  为结构场变量来描述 fcc  $\rightarrow$  L1<sub>2</sub> 有序化转变, 其在基体内部取值为 0; 在沉淀相内部取值为 1 或者 -1, 且  $(\eta_1, \eta_2, \eta_3)$  为 (1, 1, 1) 或 (-1, 1, -1)、(-1, 1, 1) 或 (1, -1, -1)、(1, -1, 1) 或 (-1, 1, -1) 以及 (1, 1, -1) 或 (-1, -1, 1) 处分别表示沉淀相的 4 种变体; 在晶界处取值介于两侧数值之间并连续变化。

基于扩散界面理论和连续场理论, 系统的化学自由能  $F_{\text{ch}}$  可以表述为:

$$F_{\text{ch}} = \int_V \left( f(c, \eta_i) + \frac{\alpha}{2} (\nabla c)^2 + \sum_{i=1}^3 \frac{\beta}{2} (\nabla \eta_i)^2 \right) dV \quad (1)$$

式中,  $f$  为体积自由能密度,  $\nabla c$  及  $\nabla \eta_i$  分别为成分场变量及结构场变量梯度,  $\alpha$  及  $\beta$  为对应的梯度能系数。基于 fcc  $\rightarrow$  L1<sub>2</sub> 有序转变的对称性要求, 体积自由能密度可用四阶 Landau 多项式来近似<sup>[2,6-7,20-21]</sup>:

收稿日期: 2013-04-11

基金项目: 国家自然科学基金 (51075335, 51174168, 10902086); 西北工业大学基础研究基金 (NPU-JC201005)

作者简介: 周广钊, 男, 1987 年生, 硕士生, 西北工业大学材料学院, 陕西 西安 710072, 电话: 029-88486023, E-mail: gzzhou2008@163.com

$$f(c, \eta_1, \eta_2, \eta_3) = \frac{1}{2} A_1 (c - c_1)^2 + \frac{A_2}{6} (c_2 - c) (\eta_1^2 + \eta_2^2 + \eta_3^2) + \frac{A_3}{3} (\eta_1 \eta_2 \eta_3) + \frac{A_4}{24} (\eta_1^4 + \eta_2^4 + \eta_3^4) + \frac{A_5}{24} (\eta_1^2 \eta_2^2 + \eta_2^2 \eta_3^2 + \eta_1^2 \eta_3^2) \quad (2)$$

式中,  $A_i$  为与温度有关的函数,  $c_1$  及  $c_2$  为接近基体及沉淀相的平衡成分。

基于 Khachaturyan 弹性理论<sup>[22]</sup>, 系统弹性能函数  $E_{el}$  可表述为:

$$E_{el} = \frac{1}{2} \int_{\mathbf{k}} B(\mathbf{n}) [\tilde{c}(\mathbf{k})]^2 \frac{d^3 \mathbf{k}}{(2\pi)^3} \quad (3)$$

式中,  $\mathbf{k}$  为倒易空间矢量,  $\mathbf{n} = \mathbf{k}/|\mathbf{k}|$ ;  $\tilde{c}(\mathbf{k})$  为成分场变量  $c(\mathbf{r})$  的傅里叶转变;  $B(\mathbf{n})$  为:

$$B(\mathbf{n}) = (C_{11} + 2C_{12}) \varepsilon_0^2 \left[ 3 - \frac{C_{11} + C_{12}}{C_{11}} \times \frac{1 + 2\xi (n_1^2 n_2^2 + n_2^2 n_3^2 + n_1^2 n_3^2) + 3\xi^2 n_1^2 n_2^2 n_3^2}{1 + \xi \left( 1 + \frac{C_{12}}{C_{11}} \right) (n_1^2 n_2^2 + n_2^2 n_3^2 + n_1^2 n_3^2) + \xi^2 \left( 1 + 2 \frac{C_{12}}{C_{11}} + \frac{C_{44}}{C_{12}} \right) n_1^2 n_2^2 n_3^2} \right] \quad (4)$$

式中,  $C_{ij}$  为立方晶格的弹性常数,  $\varepsilon_0 = da/(ad\bar{c})$ ,  $\xi = (C_{11} - C_{12} - 2C_{44})/C_{44}$ 。

系统微观结构的演化可由 Cahn-Hilliard 及 Allen-Cahn 动力学方程组来描述<sup>[23]</sup>:

$$\begin{cases} \frac{\partial c(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = M \nabla^2 \frac{\delta F}{\delta c(\mathbf{r}, t)} + \psi(\mathbf{r}, t) \\ \frac{\partial \eta_i(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -L \frac{\delta F}{\delta \eta_i(\mathbf{r}, t)} + \zeta_i(\mathbf{r}, t); \quad i = 1, 2, 3 \end{cases} \quad (5)$$

式中,  $M$  和  $L$  为与晶界迁移及原子扩散有关的动力学系数,  $F = F_{ch} + E_{el}$  为系统的总自由能,  $\psi(\mathbf{r}, t)$  及  $\zeta_i(\mathbf{r}, t)$  为系统噪声项。

### 1.2 计算条件

采用半隐式 Fourier 谱方法数值求解动力学方程组(5)<sup>[24,25]</sup>, 可得到不同时间步下微观结构的演化。模型中参数的取值见表 1。表 1 中体积自由能系数  $A_i$  为式(2)中  $\eta_i$  为 1 或 -1 时拟合 1000 K 下 Ni-Ni<sub>3</sub>Al 相图所得到的数值,  $C_{ij}$  为 1000 K 下  $\gamma'$  相的弹性常数<sup>[26]</sup>。

## 2 结果与讨论

### 2.1 颗粒形貌及合并

有序化转变过程中,  $\gamma'$  相与  $\gamma$  相之间存在晶格参数的差异, 产生点阵错配, 引起弹性应变, 在单个颗粒周围产生弹性应变场, 从而对颗粒形貌产生重要影响。为研究系统弹性能对颗粒形貌的影响, 基体中引入半径为  $32 \Delta x$  的球形  $\gamma'$  相颗粒。仅在界面能作用下, 颗粒形貌无变化, 如图 1a 所示; 考虑弹性能时, 颗粒形貌变化为立方体形, 且其取向为  $\langle 100 \rangle$  弹性软方向, 如

表 1 模拟中所选取的参数  
Table 1 Parameters used in the simulation

Parameters	Value
Bulk free energy coefficients ( $A_1, A_2, A_3, A_4, A_5/3.35 \times 10^7 \text{ J m}^{-3}$ )	277.78, 66.67, -21.21, 22.14, 22.14
Constants close to equilibrium compositions ( $c_1, c_2$ )	0.1123, 0.2211
The gradient energy coefficient for composition parameter ( $\alpha/\text{J m}^{-1}$ )	0
The gradient energy coefficient for structural parameters ( $\beta/\text{J m}^{-1}$ )	$4 \times 10^{-11}$
Elastic constants ( $C_{11}, C_{12}, C_{44}/\text{GPa}$ )	209, 149, 96
Lattice misfit ( $\varepsilon_0$ )	0.01
Precipitate volume fractions ( $f$ )	0.1, 0.2, 0.35, 0.5, 0.9
Space step ( $\Delta x$ )	1.0
Time step ( $\Delta t$ )	0.1
System size ( $S \times S \times S$ )	$128 \times 128 \times 128$

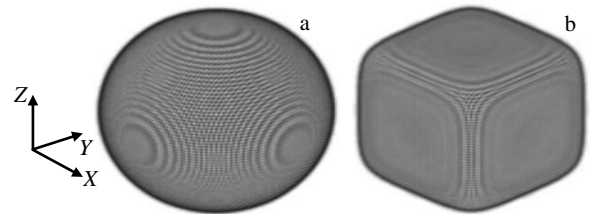


图 1 界面能及界面能和弹性能作用下球形  $\gamma'$  相颗粒形貌演化结果

Fig.1 Morphology evolution results of spherical  $\gamma'$  precipitate under the interfacial energy (a) and the interfacial and elastic energy (b)

图 1b 所示。以上表明, 对于无外界相邻颗粒束缚或者束缚较小的颗粒而言, 在不考虑弹性能时, 颗粒具有等方向性或者具有较弱的空间取向, 颗粒形貌为球形或者椭球形; 考虑弹性能后, 颗粒具有明显的空间取向(沿  $\langle 100 \rangle$  弹性软方向分布), 颗粒形貌为立方体形或者长方体形。

多颗粒系统中, 单个颗粒形成的弹性应变场与周围颗粒形成的弹性应变场叠加, 产生弹性交互作用, 对颗粒合并行为产生显著影响。相变过程中, 同相相邻颗粒合并; 反相相邻颗粒相互接触形成反相畴界。图 2 为沿 Y 轴分布的、大小为  $50 \Delta x$  和  $40 \Delta x$  的两同相相邻  $\gamma'$  立方体颗粒的合并过程。其中图 2a、2d 和 2e 为在模拟区域 Z 轴方向中点处的 XY 平面截图, 图 2b 及 2c 为在 Y 轴方向畴界中点处的 XZ 平面截图; 图 2a 为颗粒的初始分布, 其余为不同时间下的合并过程。立方体颗粒首先在近邻畴界顶点处产生浓度起伏, 其次近邻畴界的棱上产生浓度起伏并向畴界及内部扩展, 如图 2b 所示; 随着时间的增加, 先期浓度起伏处发生合并, 浓度起伏向内部延伸, 由于畴界间距较小,

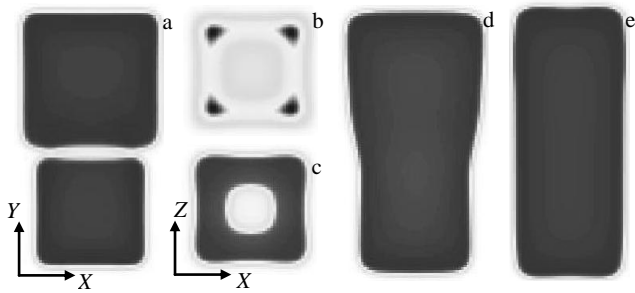


图 2 两个同相立方体颗粒的合并过程

Fig.2 Coalescence process of two in-phase cubic particles: (a, d, e) are morphologies on the section X-Y at the initial stage, 500 and 5000 steps, respectively, (b) and (c) are morphologies on the section X-Z of middle domain distance at 100 and 200 steps, respectively

且扩展速度在 X、Z 方向上相等，故颗粒的形貌如图 2c 所示；随着时间的进一步增加，两颗粒完全合并，如图 2d 所示，且在弹性能作用下，颗粒界面变为平直，颗粒形貌变为长方体形，如图 2e 所示。

图 3 为对称分布的、大小为  $45\Delta x$  的 8 个同相  $\gamma'$  立方体颗粒在不同畴界间距下的合并过程。其中图 3a 为颗粒的初始分布；图 3b~3h 为在模拟区域 Z 轴方向畴界中点处的 XY 平面截图，且图 3b、3c、3d 为  $4\Delta x$  畴界间距下的合并过程，其余为  $10\Delta x$  畴界间距下的合并过程；图 3b 中 A、B、C 3 点分表表示畴界的近邻、次近邻及外部点。畴界间距为  $4\Delta x$  时，畴界外部点首先产生浓度起伏，其次是次近邻点，最后为同颗

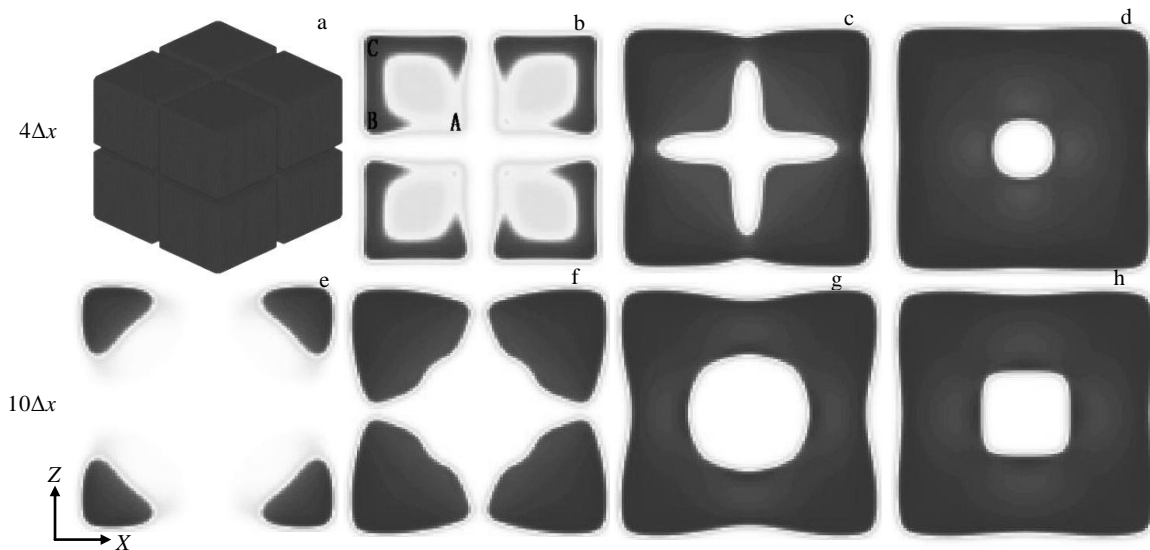


图 3 8 个同相立方体颗粒在不同畴界间距下的合并过程

Fig.3 Coalescence process of eight in-phase cubic particles with different domain distances and (b~h) are morphologies on the section X-Z of middle domain distance at different steps: (a) initial stage, (b) 100 step, (c) 300 step, (d) 1000 step, (e) 2000 step, (f) 3000 step, (g) 4000 step, and (h) 5000 step

粒外部点及次近邻点所在的棱，浓度起伏处产生合并，其形貌如图 3b 所示；随着时间的增加，浓度起伏向颗粒内部扩张，近邻点附近产生浓度起伏，相邻颗粒次近邻点之间也产生浓度起伏，浓度起伏处合并，其形貌如图 3c 所示；随着时间的进一步增加，相邻颗粒近邻点与次近邻点所在的棱与棱之间的区域发生合并，此时未合并区域形貌为圆形，如图 3d 所示，最后畴界处完全合并。畴界间距增大到  $10\Delta x$  时，合并过程发生明显变化。畴界外部点首先合并(如图 3e 所示)，并向同颗粒次近邻及近邻点扩展(如图 3f 所示)，合并进行至颗粒次近邻点处后，相邻颗粒次近邻点处发生合并(如图 3g 所示)，此时未合并区域为圆形，随着时间的增加，合并继续进行，未合并区域由圆形变成方形(如图 3h 所示)，最后畴界处完全合并。

### 2.2 粗化动力学

图 4 为沉淀相体积分数为 20% 的 Ni 基合金时效过程中  $\gamma'$  相的形貌演化。其中蓝色相、绿色相、橙色相及褐色相分别表示  $\gamma'$  相的 4 种变体，无色相表示基体  $\gamma$  相，以下  $\gamma'$  相的形貌演化图注释与图 4 相同。时效初期，噪声项及系统所提供的相变驱动力大于  $\gamma'$  相的形核能垒，系统内产生浓度起伏，形成核胚并成为核心。噪声项去除后，在系统界面能及弹性能的作用下，沉淀相颗粒长大，由于此时界面能处于主导地位，颗粒多为球形或者椭球形(如图 4a 所示)。随着时效时间的增加，沉淀相颗粒数目从 6550(图 4a)减少至 510(图 4d)，颗粒进一步长大、粗化，颗粒形貌变为立方体形或者长方体形，并且沿 [100]、[010] 或者 [001] 弹性软方向分布。

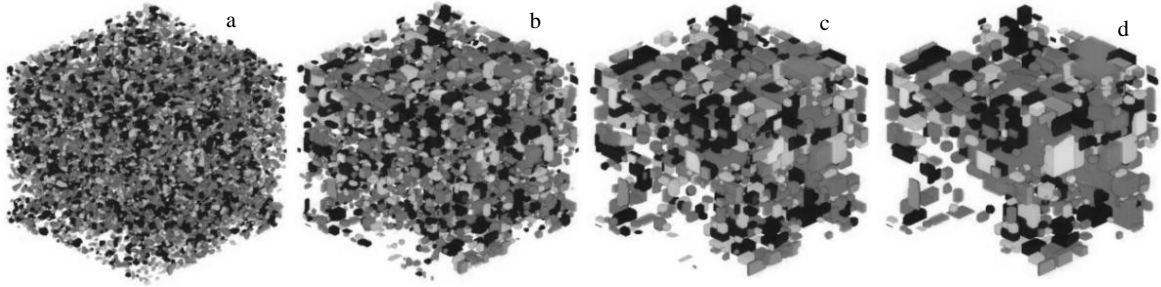


图 4 沉淀相体积分数为 20% 的 Ni 基合金时效过程中  $\gamma'$  相的形貌演化

Fig.4 Morphology evolution of  $\gamma'$  particles during the aging process in Ni base alloys of 20% precipitate volume fraction: (a) 200 step, (b) 1000 step, (c) 5000 step, and (d) 20 000 step

图 5 为沉淀相体积分数为 20% 的 Ni 基合金中  $\gamma'$  相颗粒数目及体积分数随时间的变化曲线。从图 5 可以看出，时效初期系统内产生大量的  $\gamma'$  相核心；随着时效时间的增加，沉淀相颗粒数目先锐减接着趋于平缓最后达到稳定，沉淀相颗粒的体积分数先缓慢增加后趋于稳定，颗粒尺寸增加并趋于平衡。时效过程中， $\gamma'$  相的四种变体随机析出并长大，颗粒数目接近，颗粒的体积分数相差不大。

分别对沉淀相体积分数为 10%、35%、50% 及 90% 的 Ni 基合金时效过程进行了模拟，得到的  $\gamma'$  相形貌演化结果如图 6 所示。随着沉淀相体积分数的增加，颗粒平均尺寸增大，颗粒间距减小，受到相邻颗粒的束缚变强，颗粒形貌发生变化，甚至会出现异常长大，如图 6d 中 A 颗粒所示。

图 7 为沉淀相体积分数不同的 Ni 基合金  $\gamma'$  相颗粒数目及平均尺寸随时间的变化曲线。从图 7 可以看出，随着时效时间的增加，颗粒数目先急剧减少接着趋于平缓最后达到稳定；颗粒长大、粗化，其尺寸先增加接着增速变缓最后达到稳定。时效后期，随着沉淀相体积分数的增加，颗粒数目先增加及至达到最大值后减少；颗粒平均尺寸逐渐增加，且沉淀相体积分数较小时增幅较小，体积分数较大时增幅较大。

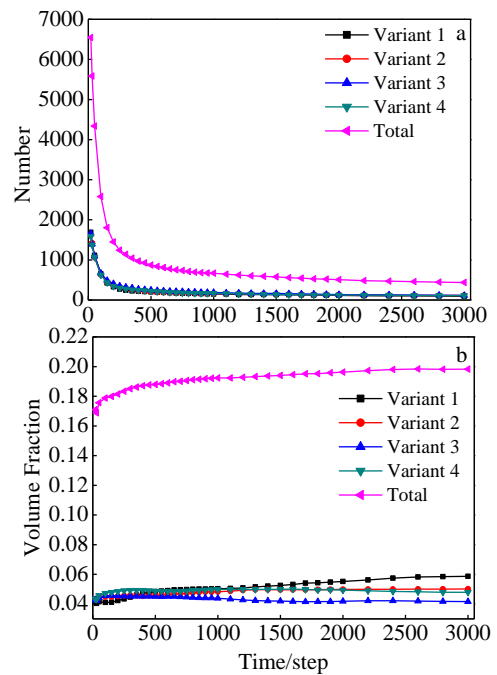


图 5 沉淀相体积分数为 20% 的 Ni 基合金中  $\gamma'$  相颗粒数目及体积分数随时间的变化

Fig.5 Changes of numbers (a) and volume fractions (b) of  $\gamma'$  precipitate particles with time in Ni base alloys of 20% precipitate fraction

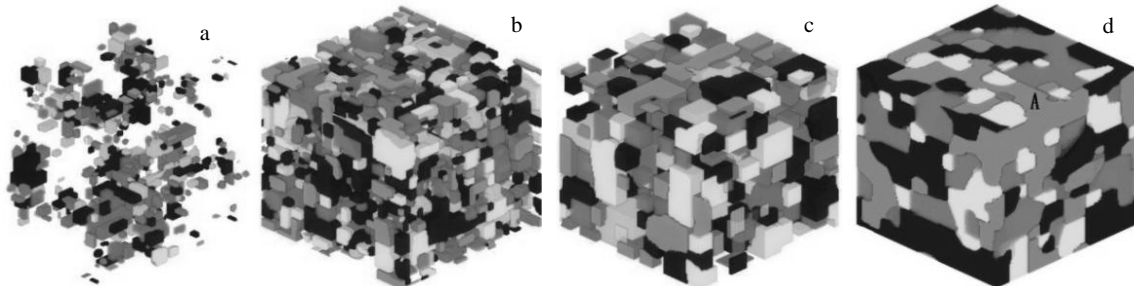


图 6 不同沉淀相体积分数下的 Ni 基合金时效后期  $\gamma'$  相的形貌

Fig.6 Morphologies of  $\gamma'$  precipitates at the late stage of aging in Ni base alloys with different precipitate fractions: (a)  $f=10\%$ , (b)  $f=35\%$ , (c)  $f=50\%$ , and (d)  $f=90\%$

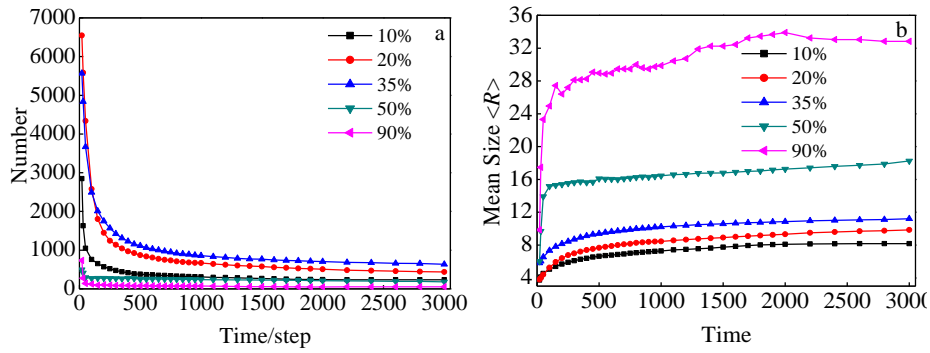


图 7  $\gamma'$ 相颗粒数目及平均尺寸随时间的变化

Fig.7 Changes of numbers (a) and mean sizes (b) of  $\gamma'$  precipitate particles with time

沉淀相体积分数不仅影响颗粒的平均尺寸，而且影响颗粒的尺寸分布。图 8 给出了不同沉淀相体积分数下 Ni 基合金  $\gamma'$  相颗粒的尺寸分布。其中横轴为颗粒的相对尺寸 ( $R$  为颗粒尺寸,  $\langle R \rangle$  为颗粒平均尺寸), 纵轴为颗粒的分布频率。从图中可以看出, 沉淀相体积分数小于 50% 时, 频率最大时的颗粒尺寸接近平均尺寸; 相对尺寸处于 0.8 至 1.2 之间的颗粒频率较大, 且

随体积分数的增加变化不大, 颗粒尺寸分布较均匀。大于 50% 时, 频率最大时的颗粒尺寸较平均尺寸小, 且随体积分数的增加频率最大时的颗粒尺寸减小; 相对尺寸处于 0.8 至 1.2 之间的颗粒频率较小, 且随体积分数的增加变化较大, 颗粒尺寸分布不均匀, 处于两极的颗粒频率增加, 颗粒尺寸两极化增大, 颗粒易于产生异常长大(如图 6d 所示)。

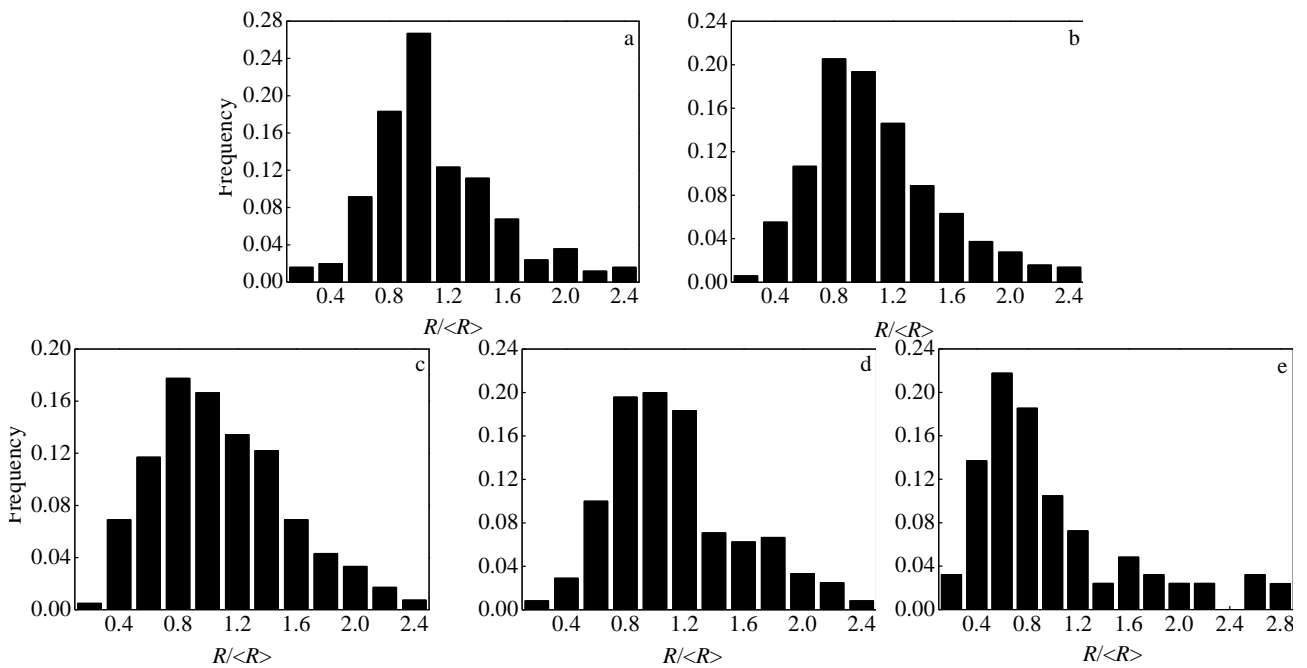


图 8 不同沉淀相体积分数下 Ni 基合金  $\gamma'$  相颗粒的尺寸分布

Fig.8 Size distributions of  $\gamma'$  precipitate particles in Ni base alloys with precipitate volume fraction of 10% (a), 20% (b), 35% (c), 50% (d), and 90% (e)

### 3 结 论

1) 弹性能对  $\gamma'$  相颗粒形貌及取向有显著影响。对无外界相邻颗粒束缚或束缚较小的沉淀相颗粒而言, 仅在界面能作用下, 颗粒形貌为球形或椭球形, 无明

显空间取向; 考虑弹性能后, 颗粒形貌为立方体形或者长方体形, 具有明显空间取向, 颗粒沿  $\langle 100 \rangle$  弹性软方向分布。

2) 弹性能对同相多颗粒合并行为的影响主要取决于与颗粒分布、尺寸及畴界间距等有关的弹性交互

作用。弹性能通过影响同相多颗粒的合并行为, 从而影响 $\gamma'$ 相颗粒的粗化动力学。

3) 沉淀相体积分数对 $\gamma'$ 相颗粒数目、平均尺寸及尺寸分布有显著影响。随着沉淀相体积分数的增加, 颗粒数目先增加至最大值后减少; 颗粒平均尺寸逐渐增加, 且体积分数较小时增幅较小, 颗粒尺寸分布均匀, 体积分数较大时增幅较大, 颗粒尺寸分布不均匀。

#### 参考文献 References

- [1] Li Chenggong(李成功), Fu Hengzhi(傅恒志), Yu Qiao(于翹). *Aerospace Materials*(航空航天材料)[M]. Beijing: National Defence Industrial Press, 2002
- [2] Vaithyanathan V, Chen L Q. *Acta Mater*[J], 2002, 50(16): 4061
- [3] Zhu J Z, Wang T, Ardell A J *et al. Acta Mater*[J], 2004, 52(9): 2837
- [4] Baldan A. *J Mater Sci*[J], 2002, 37(11): 2379
- [5] Wang Y, Khachaturyan A G. *Acta Metall Mater*[J], 1995, 43(5): 1837
- [6] Li D Y, Chen L Q. *Scr Mater*[J], 1997, 37(1): 1271
- [7] Wang Y, Banerjee D, Su C C *et al. Acta Mater*[J], 1998, 46(9): 2983
- [8] Li D Y, Chen L Q. *Acta Mater*[J], 1999, 47(1): 247
- [9] Banerjee D, Banerjee R, Wang Y. *Sci Mater*[J], 1999, 41(9): 1023
- [10] Wen Y H, Simmons J P, Shen C *et al. Acta Mater*[J], 2003, 51(4): 1123
- [11] Boisse J, Lecoq N, Patte R *et al. Acta Mater*[J], 2007, 55(18): 6151
- [12] Wang J C, Osawa M, Yokokawa T *et al. Comp Mater Sci*[J], 2007, 39(4): 871
- [13] Wang T, Sheng G, Liu Z K *et al. Acta Mater*[J], 2008, 56(19): 5544
- [14] Wen H Y, Simmons J P, Woodward C. *Modelling Simul Mater Sci Eng*[J], 2010, 18(5): 055 002
- [15] Wang Xiaopeng(王晓鹏), Wang Yongxin(王永欣), Tang Hongkui(唐洪奎) *et al. Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2012, 41(2): 246
- [16] Lu Yanli(卢艳丽), Chen Zheng(陈铮), Wang Yongxin(王永欣) *et al. Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2012, 41(7): 1216
- [17] Zhuang Houchuan(庄厚川), Chen Zheng(陈铮), Wang Yongxin(王永欣) *et al. Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2012, 41(11): 1960
- [18] Wang Yongxin(王永欣), Chang Xiuli(常秀丽), Chen Zheng(陈铮) *et al. Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2012, 41(12): 2100
- [19] Chen L Q *Annu. Rev Mater Res*[J], 2002, 32(1): 113
- [20] Lai Z W. *Phys Rev B*[J], 1990, 41(13): 9239
- [21] Braun R J, Cahn J W, Mcfadden G B *et al. Phil Trans Soc Lond A*[J], 1997, 355: 1787
- [22] Khachaturyan A G. *Theory of Structural Transformations in Solids*[M]. New York: John Wiley & Sons, 1983
- [23] Elder K. *Comp in Phys*[J], 1993, 7(1): 27
- [24] Chen L Q, Shen J. *Comput Phys Commun*[J], 1998, 108(2-3): 147
- [25] Zhu J Z, Chen L Q, Shen J *et al. Phys Rev E*[J], 1999, 60(4): 3565
- [26] Prikhodko S V, Carnes J D, Isaak D G *et al. Scr Mater*[J], 1998, 38(1): 67

## Three-Dimensional Phase-Field Method Simulation of Coarsening Kinetics of $\gamma'$ Particles under Elastic Energy in Ni Base Alloys

Zhou Guangzhao, Wang Yongxin, Chen Zhen

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

**Abstract:** The effect of the elastic energy on the morphology and orientation of  $\gamma'$  particles and the coalescence behavior of multi-particle were studied based on the three-dimensional phase-field method, and the influence of precipitate volume fraction on the number, average size and size distribution of  $\gamma'$  particles were also studied. The results show that the  $\gamma'$  particle is cubic under elastic energy, aligned along the  $\langle 100 \rangle$  elastic soft directions. The effect of the elastic energy on the coalescence behavior of multi-particle mainly depends on the elastic interaction which is related to the particles' distribution, size and the distance of domain boundary. With the increase of precipitate volume fraction, the number of  $\gamma'$  particles first increases to the maximum and then reduces; meanwhile the average size increases gradually.

**Key words:** three-dimensional phase-field method; coarsening kinetics; elastic energy; Ni base alloy

Corresponding author: Zhou Guangzhao, Candidate for Master, Department of Materials Science and Engineering, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, P. R. China, Tel: 0086-29-88486023, E-mail: gzzhou2008@163.com