

微观相场法研究镍基合金相变时的成分演化及界面定向迁移机制

杨 坤^{1,2}, 李 鹤¹, 霍春勇¹, 吉玲康¹, 马秋荣¹, 张明义², 陈 铮²

(1. 石油管工程技术研究院, 陕西 西安 710077)

(2. 西北工业大学, 陕西 西安 710072)

摘 要: 基于耦合外应力场下的微观相场模型, 研究了 $\text{Ni}_{75}\text{Al}_{7.5}\text{V}_{17.5}$ 三元合金相变过程中相分解、生长过程中合金成分演化及应力作用下相间界面的定向迁移规律。研究表明: 早期 DO_{22} 相长大所需的 V 来自于在 L_{12} 相间有序畴界面处, 而后期则来自于其内部, 且早期 DO_{22} 相长大的速度高于后期的长大速度; 时效过程有 5 种异相间界面形成, 而 A 类界面的迁移为相迁移的主要类型; 相变初期 A、B 类界面较少, 合金形貌变化不大, 随着相变的进行, A 类界面数量增加, 相的生长及分解过程加剧, 导致后期 A 类界面减少、B 类界面增多, 合金体系达到平衡状态; 在压应力作用下, A 类界面沿应力方向迁移, 促进了 DO_{22} 相在此方向上的生长, 导致合金“筏状”组织的形成。

关键词: 定向迁移; 筏化; 微观相场; 镍基高温合金

中图分类号: TG132.3⁺2; TG 146.1⁺5

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2016)12-3238-07

镍基高温合金以其优异的高温性能被广泛地应用于航空工业等领域。合金主强化相 γ' (L_{12} 结构) 在应力作用下会沿某一方向发生定向生长, 形成具有高蠕变性能的“筏状”组织结构^[1-6]。外应力会改变合金内部的错配应力分布, 促使合金元素发生定向扩散, 形成扩散通道^[7,8]。与此同时, 合金元素也会在某一方向上发生富集与贫化, 促使相间界面发生定向迁移, 导致有序相在这一方向上的生长或分解, 产生筏化。

相变过程中, 应力会改变合金元素在空间上的扩散行为, 影响沉淀相的析出和生长, 进而制约相间界面的迁移, 因此应力是研究合金界面定向迁移的关键因素之一^[9,10]。W. F. Hosford 等^[11]发现, 在外加应力作用下产生应力位向效应(即沉淀相的各向异性析出); J. W. Cahn 等^[12]计算了共格界面条件下的最小能量, 即最小共格微观界面错配应力, 定量研究了弹性能对均匀弹性体系的影响; Chang 和 Allen 以及 Nabarro^[13,14] 等人采用线弹性理论分别对单个 γ' 相颗粒在无限大基体中的弹性能进行了解析计算, R. A. Johnson^[15] 等进一步研究了非均匀弹性体系, 深入到纳观应力场。

Ni-Al-V 镍基三元合金的生长演化过程是合金沉淀相与母相 (γ'/γ , θ/γ)、沉淀相与沉淀相之间 (γ'/θ) 的界面迁移过程。而在外应力作用下, 由于合金元素

的定向扩散, 界面的迁移也会与应力之间呈现一定的规律性。而在整个演化过程中, 合金体系处于一个高浓度梯度非线性的状态, 且伴随有原子簇聚、元素扩散、形核生长及分解、有序-无序转变等一系列复杂过程, 传统的实验手段较难对其进行研究和分析。

微观相场动力学是利用原子在晶格上的跃迁几率 $x(r, t)$ (即原子在格点 r 和时刻 t 的占位几率) 作为变量, 研究相的微结构信息 (原子配位、组织结构、原子浓度、占位等), 计算的尺度达到原子级, 并可获得不同时刻的系统信息, 进而描述整个过程, 包括原子簇聚、有序化、界面的迁移及相的生长粗化, 可对相变过程进行有效地分析和研究, 并对实验过程进行一定程度的理论指导, 具有原理上的优势^[16-19]。本研究即用微观相场法研究 Ni-Al-V 三元合金相变时的成分演化及界面定向迁移机制。

1 原理和方法

1.1 微观相场动力学方程

微观相场方程以原子占据晶格位置的几率为场变量来描述原子组态的几率和相形貌, 是 Cahn-Hilliard 扩散方程的微观离散格点形式, 由 Khachaturyan 创建, L. Q. Chen 等人做了发展^[20,21]。

收稿日期: 2015-12-24

基金项目: 国家自然科学基金(51404294); 中国博士后科学基金(2014M562449); 陕西省自然科学基金基础研究计划(2011JQ6017)

作者简介: 杨 坤, 男, 1985 年生, 博士, 石油管工程技术研究院, 陕西 西安 710077, 电话: 029-81887823, E-mail: yangkunlo@126.com

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

上式为微观 Langevin 方程, $L_{\alpha\beta}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ 是与单位时间内 α, β 原子在格点位置 \mathbf{r} 和 \mathbf{r}' 上的交换几率有关的常数, $\alpha, \beta=A, B$ 或 C, F 为体系的总自由能, $\xi(\mathbf{r}, t)$ 为随机热噪声项, k_B 为波尔兹曼常数, t 为时间步数, T 为温度。 $P_A(\mathbf{r}, t), P_B(\mathbf{r}, t), P_C(\mathbf{r}, t)$ 分别代表 A、B 和 C 原子在 t 时刻、占据格点位置 \mathbf{r} 的几率, $P_C(\mathbf{r}, t) = 1 - P_A(\mathbf{r}, t) - P_B(\mathbf{r}, t)$ 。

在平均场理论下有:

$$F = \frac{1}{2} \sum_{\vec{r}} \sum_{\vec{r}'} W(\vec{r}-\vec{r}') P(\vec{r}) P(\vec{r}') + K_B T \sum_{\vec{r}} \left[\frac{P(\vec{r}) \ln P(\vec{r})}{P(\vec{r})} + (1-P(\vec{r})) \ln(1-P(\vec{r})) \right] \quad (2)$$

$$W_{\alpha\beta}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = W_{\alpha\beta}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')_{ch} + W_{\alpha\beta}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')_{el} \quad (3)$$

$W_{\alpha\beta}(\vec{r}-\vec{r}')$ 为原子间有效作用能, 其傅里叶空间下的表达式为 $V(\vec{k})$, $W(\mathbf{r}-\mathbf{r}')_{el}$ 为弹性交互作用能, 其傅里叶空间下的表达式为 $B(\vec{e})$, $W(\mathbf{r}-\mathbf{r}')_{ch}$ 为化学交互作用能, 其傅里叶空间下的表达式为 $V(\vec{k})_{ch}$ 。

$$V(\vec{k}) = V(\vec{k})_{ch} + B(\vec{e}) \quad (4)$$

无外应力时, 弹性应变能主要由合金本身的错配所引起:

$$B = - \frac{4(c_{11} + 2c_{12})^2}{c_{11}(c_{11} + c_{12} + 2c_{44})} \varepsilon_0^2 \Delta \quad (5)$$

B 是表征弹性性质和晶格错配的应力参数: $\Delta = c_{11} - c_{12} - 2c_{44}$ 是弹性各向异性常数, $c_{11} - c_{12} - 2c_{44}$ 是模型体系基本的弹性常数, 计算中使用文献[22-25]的数值。 $\Delta < 0$, 则 $B > 0$ 。

1.2 外力作用引起的弹性能

自由状态下外力引起的弹性能为

$$E_p = \int_{a_0}^{a_0 + \Delta a} \left(\frac{A}{a^2} - \frac{Aa_0^2}{a^4} \right) da \quad (6)$$

A 为常数, a_0 为外力为 0 时原子的平均间距, a 为原子间距, 且 $a = a_0 + \Delta a$, Δa 为外应力引起的形变量, 且

$$\Delta a = \sigma a_0 / E \quad (7)$$

E 为弹性模量, 将式(7)代入式(6), 可得

$$E_p = \frac{2A}{3a_0} + \frac{AE}{a_0(E + \sigma)} + \frac{A}{3a_0} \left(\frac{E}{E + \sigma} \right)^3 \quad (8)$$

在傅里叶空间下有

$$E_p(\vec{e}) = \frac{2A}{3a_0} + \frac{AE_{<100>}}{a_0(E_{<100>} + \sigma'_x)} + \frac{A}{3a_0} \left(\frac{AE_{<100>}}{E_{<100>} + \sigma'_x} \right)^3 + \frac{2A}{3a_0} + \frac{AE_{<001>}}{a_0(E_{<001>} + \sigma'_y)} + \frac{A}{3a_0} \left(\frac{AE_{<001>}}{E_{<001>} + \sigma'_y} \right)^3 \quad (9)$$

$E_{<100>}$ 和 $E_{<001>}$ 是[100]和[001]上的弹性模量, 且

$$V(\vec{k})_{cl} = B(\vec{e}) + E_p(\vec{e}) \quad (10)$$

则将错配及外应力引起的弹性应变能引入体系自由能表达式。

对微观 Langevin 方程、自由能表达式进行傅里叶变换, 并将自由能项代入微观 Langevin 方程, 对其进行 Euler 法求解, 可得到不同时刻原子的占位几率, 进而获得原子图像及其他数据。

2 模拟结果及讨论

2.1 无应力时沉淀相的生长、分解及合金元素的分配

图 1 为 $Ni_{75}Al_{17.5}V_{17.5}$ 合金在无外力作用时相变过程的微结构演化。从图中可以看出, 相变初期, $L1_2$ 相首先从无序基体中析出, 然后, 伴随着 $L1_2$ 相的长大及其 $L1_2$ 相间有序畴界的形成, DO_{22} 相在有序畴界处出现并生长。随着时间的延长, $L1_2$ 的体积分数逐渐降低而 DO_{22} 的体积分数逐渐升高 (如图 2 所示), 部分 $L1_2$ 转变为 DO_{22} 。 $L1_2$ 相体积减少时, 伴随有相的分解, 并排出 Ni 和 Al 原子, 而 DO_{22} 相的长大则需要 Ni 和 V 原子。文献[20]表明, $L1_2$ 相中的 Ni 原子含量稍高于 DO_{22} 相中的 Ni 含量, 且 $L1_2$ 相中第 3 组元 V 的原子分数则接近于 10%。因此, 从 $L1_2$ 相中排出 Ni 足以满足 DO_{22} 相长大所需要的 Ni, 而 DO_{22} 相长大所需的部分 V 则可由减少的 $L1_2$ 相提供。

在图 3 $L1_2$ 到 DO_{22} 相变中 $L1_2$ 相内合金元素的成分演化中, 随着相变过程的进行, $L1_2$ 相内的 Ni 和 Al 浓度不断升高, 而 V 则不断降低。且在相变早期, $L1_2$ 相中 V 浓度高于 Al 的浓度, 而在后期, Al 浓度高于 V 的浓度。V 浓度的降低表明, 相变后期 DO_{22} 相长大所需的 V 从 $L1_2$ 相内扩散出来, 而由 $L1_2$ 相分解而排至有序畴界处的 Al 和 Ni 则向相邻的 $L1_2$ 相内扩散。

从图 4 $L1_2$ 到 DO_{22} 相变中 $L1_2$ 相内元素成分与 DO_{22} 相体积分数的关系中可以看出, DO_{22} 相的粗化过程可以分为 2 个阶段。在 DO_{22} 相长大早期, 其体积分数从基本为 0 快速增加到 0.35 左右, 而这个阶段, $L1_2$ 相内的成分基本不变。由于 $L1_2$ 相体积减少不能为 DO_{22} 相的长大提供足够的 V, 因此, 在相变早期, DO_{22} 相长大所需的 V 主要有两个来源: 一是 $L1_2$ 相间有序畴界处偏聚的 V, 二是 $L1_2$ 相体积减少所排出的部分 V。在 DO_{22} 相长大后期, DO_{22} 相体积分数从 0.35 左右缓慢地增长到 0.48 左右, 且在这个过程中, 还伴随着 $L1_2$ 相内 Ni 和 Al 浓度的升高和 V 浓度的降低。

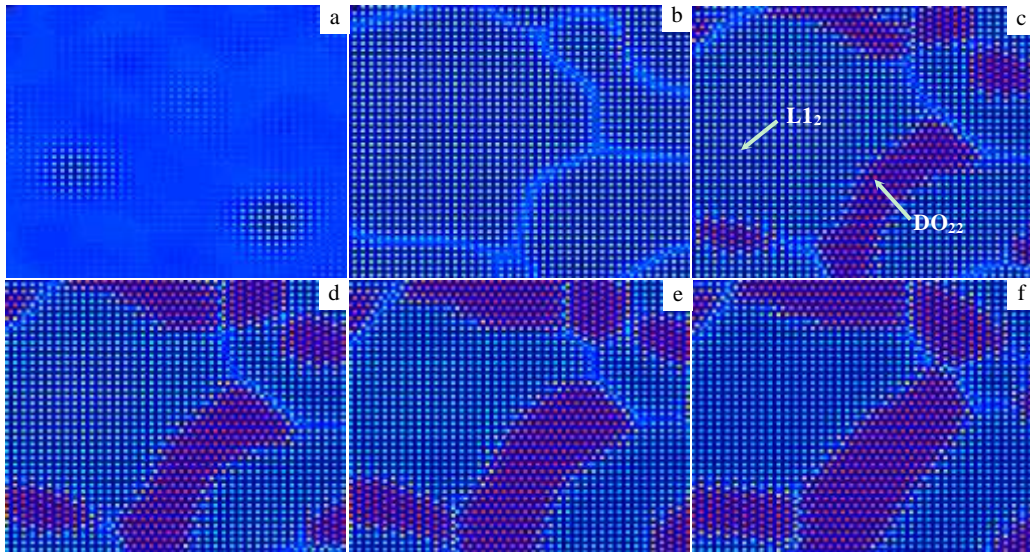


图 1 Ni₇₅Al_{7.5}V_{17.5} 合金在 1085 K 下合金沉淀过程演化

Fig.1 Evolution of precipitation for Ni₇₅Al_{7.5}V_{17.5} at T=1085 K for different timestep: (a) $t=8.0 \times 10^3$, (b) $t=2.0 \times 10^4$, (c) $t=7.0 \times 10^4$, (d) $t=1.0 \times 10^5$, (e) $t=2.0 \times 10^5$, and (f) $t=4.0 \times 10^5$

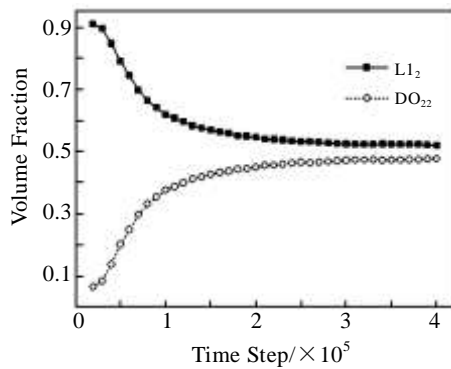


图 2 Ni₇₅Al_{7.5}V_{17.5} 合金在 1085 K 下沉淀过程中 L₁₂ 和 DO₂₂ 相体积分数演化

Fig.2 Evolution of volume fraction for L₁₂ and DO₂₂ during precipitation of Ni₇₅Al_{7.5}V_{17.5} at T=1085 K

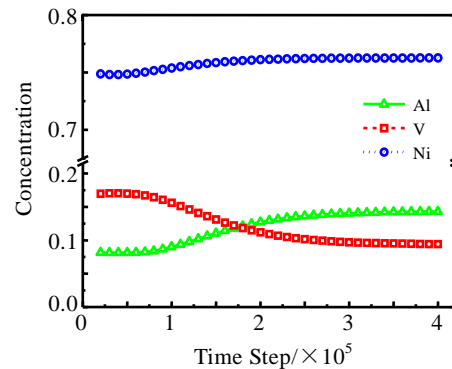


图 3 L₁₂ 到 DO₂₂ 相变过程中在 L₁₂ 相内合金元素的成分演化
Fig.3 Evolution of chemical composition in L₁₂ when L₁₂ changes into DO₂₂

这表明，在 DO₂₂ 相长大后期，DO₂₂ 相的长大所需的 V 主要由 L₁₂ 相体积减少所排出的 V 和 L₁₂ 相内 V 浓度的降低来提供。因此 DO₂₂ 相长大后期受 L₁₂ 相内合金成分的演化所制约。

从图 3 和图 4 还可以看出，早期 DO₂₂ 相长大的速度远大于后期 DO₂₂ 相长大的速度。从以上分析也可知，早期 DO₂₂ 相长大所需的部分 V 来自于在 L₁₂ 相间有序畴界面处，而后期 DO₂₂ 相长大所需的部分 V 来自于在 L₁₂ 相内部，即在早期 V 通过在界面扩散来满足 DO₂₂ 长大之需，而后期 V 通过体扩散满足 DO₂₂ 长大

之需，而界面扩散的速度远大于体扩散的速度，因此，早期 DO₂₂ 相长大的速度远大于后期 DO₂₂ 相长大的速度。

2.2 应力作用下界面的定向迁移

当应力作用时，合金有序相的沉淀顺序并没有改变，L₁₂ 相先从无有序基体中沉淀出。从图 5 压应力作用下合金沉淀过程的组织演化可以看出， $t=2 \times 10^4$ 时，DO₂₂ 相从 L₁₂ 相的相间有序畴界面处析出，并在生长过程中与 L₁₂ 相形成多种界面结构。随着沉淀过程的进行，一些界面未发生迁移，而某些界面则发生迁移，促进了相的生长和粗化。 $t=1.05 \times 10^6$ 时，界面的迁移过程结束，组织形貌基本稳定，两相在 [100] 上发生定向生长，形成了较为显著的“筏状”组织结构。

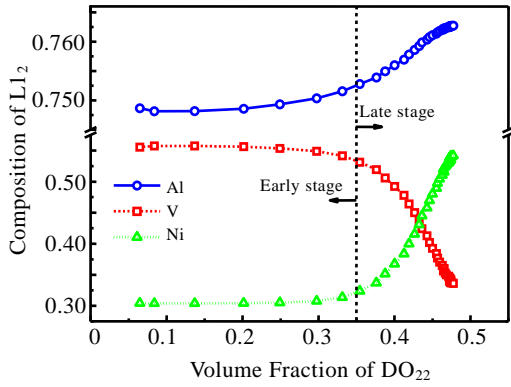


图 4 L1₂ 到 DO₂₂ 相转变过程中在 L1₂ 相内合金元素的成分与 DO₂₂ 相体积分数的关系

Fig.4 Relation between chemical composition in L1₂ and volume fraction for DO₂₂ when L1₂ changes into DO₂₂

图 6 为 $t=1.0 \times 10^5$ 时, Ni₇₅Al_{7.5}V_{17.5} 合金的原子图像。从图中可以看出, 此时出现了 A~E 5 种异相界面 (L1₂/DO₂₂) 结构。图 7 为图 6 中 A~E 5 种界面的示意图。其中红色代表 V 原子, 蓝色代表 Al 原子, 白色代表 Ni 原子。结合图 5 可以发现, 相变早期, L1₂ 首先沉淀, 并大量占据格点位置, A、B 类界面数量较少, 合金形貌变化较小。随着 DO₂₂ 相的大量析出, A 类界面的数量增多, 相界面迁移过程加速。而随着时效过程的继续进行, A 类界面的数量开始减少。 $t=1.05 \times 10^6$ 时, A 类界面数量大大减少, B 类界面的数量增加, 合金达到平衡状态。在界面迁移的过程中, A 类界面的迁移性较强, 而 B 类界面的迁移性则较弱。在应力的作用下, 部分 A 类界面在 [100] 方向上发生定向迁移, 从而导致 DO₂₂ 相在这一方向上的定向生长及 L1₂ 相在这一方向上的定向分解。B 类

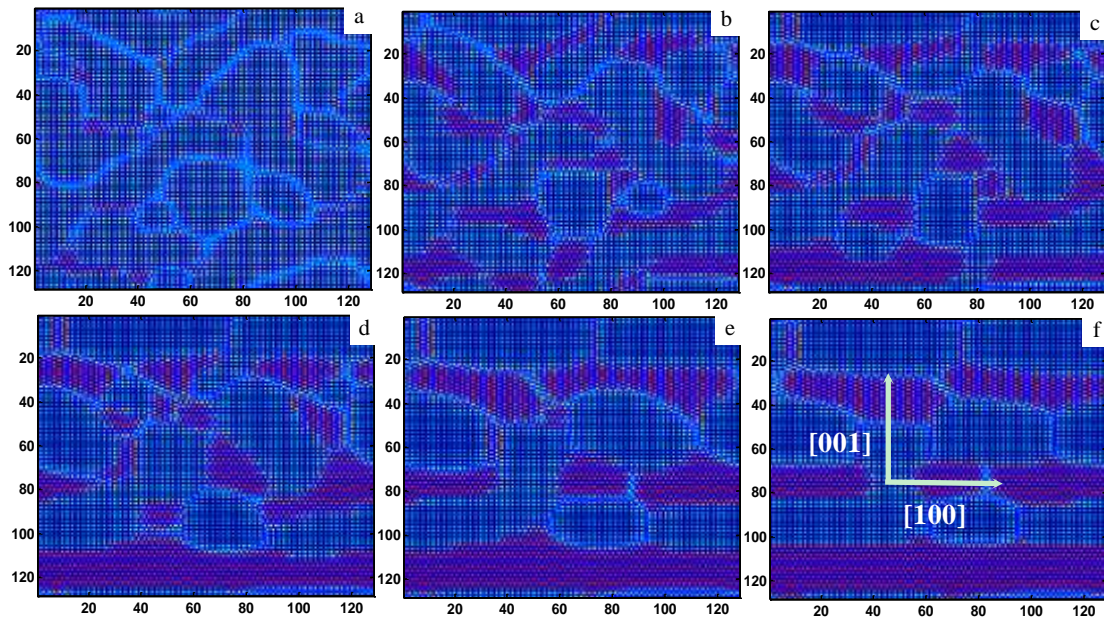


图 5 在 [100] 方向上压应力作用下 Ni₇₅Al_{7.5}V_{17.5} 合金沉淀过程的组织演化

Fig.5 Evolution of precipitation for Ni₇₅Al_{7.5}V_{17.5} when compressive stress exists in [100]: (a) $t = 2.0 \times 10^4$; (b) $t = 7.0 \times 10^4$; (c) $t = 4.0 \times 10^5$; (d) $t = 6.0 \times 10^5$; (e) 8.0×10^5 ; (f) $t = 1.05 \times 10^6$ ($\sigma = 150 \text{ MPa}$, $T = 1085 \text{ K}$)

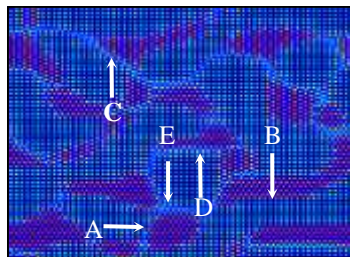


图 6 $t=1.0 \times 10^5$ 时, L1₂ 到 DO₂₂ 相面的 5 种界面结构

Fig.6 Structures of five types of interface between L1₂ and DO₂₂ when $t=1.0 \times 10^5$

界面在 [100] 方向上生长, 将 L1₂ 相与 DO₂₂ 相分隔开来, 合金的形貌演化达到稳定状态, 形成较为显著的“筏状”组织结构。在初期, 由于大量 L1₂ 存在, A 类界面数量非常少(多为同相间界面, 而 A 类界面为异相间界面), 相界面迁移过程较为缓慢。随着 DO₂₂ 的析出, A 类界面数量增多, L1₂ 相的分解为 DO₂₂ 相长大提供了 V, 且扩散方式为界面扩散, 因而 DO₂₂ 相的生长速度较快, 异相界面的迁移速度加快。在相变后期, B 类界面数量增多, L1₂ 相的分解速度降低, 且 V 元素的扩散方式转变为体扩散, 导致 A 类界面的迁移

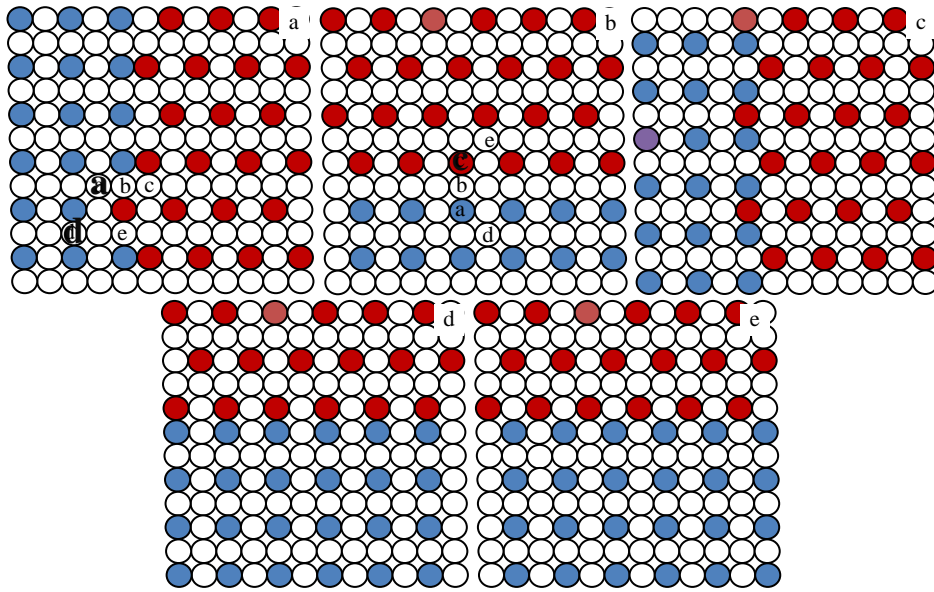


图 7 A~E 5 种异相间界面结构的原子排列示意图，其中红色代表 V 原子，白色代表 Ni 原子，蓝色代表 Al 原子

Fig.7 Schematic atomic arrangement of five types of interface between $L1_2$ and DO_{22} : (a) A interface, (b) B interface, (c) C interface, (d) D interface, and (e) E interface (V is shown as red, Ni is shown as white, and Al is shown as blue)

速度降低， DO_{22} 相的生长减缓，合金达到平衡状态。

在图 7 中，对于 A 类界面(图 7a)，a 位置初始为 Ni 原子，b、d 位置为 Al 原子，c 位置为 V 原子。图 8 为图 7 中 A 类相界晶格位置上原子的占位几率随时间的演化曲线。由图 8 可知，随着沉淀过程的进行，a 位置的 Ni 原子的占位逐渐下降、V 原子的占位逐渐上升，而 Al 原子一直保持较低的占位；b 位置上 Al、V 的占位逐渐下降，而 Ni 的占位逐渐上升，且初期时 Al 占位高于 V 占位，而后期 Al 占位则略低于 V；d 位置上 Al 原子的占位逐渐下降、V 原子的占位逐渐上升，且 Ni 始终保持一定的占位 (0.15 左右)。a

位置上 Ni 原子与 V 原子发生了交换，而 b 位置上的 Al 原子与 Ni 原子发生了交换，且在此过程中 b 位置 V 原子占位降低。可以看出，b 位置上的 V 扩散至 a 位，而 a 位置上的 Ni 扩散至 b 位置。d 位置上 Al 与 V 发生交换，促使整个界面推移，导致 DO_{22} 相的生长及 $L1_2$ 相的分解。

A 类界面迁移时，a 位上 Ni 与 V、b 位上的 Al 与 Ni、d 位上的 Al 与 V 发生交换。B 类界面处的原子配位环境与 A 类界面处有较大的区别，若 B 类界面需要迁移时，a 位上 Al 与 V、c 位上的 Ni 与 V 须发生交换，但缺少扩散至 a、c 位置上的 V，因而界面的

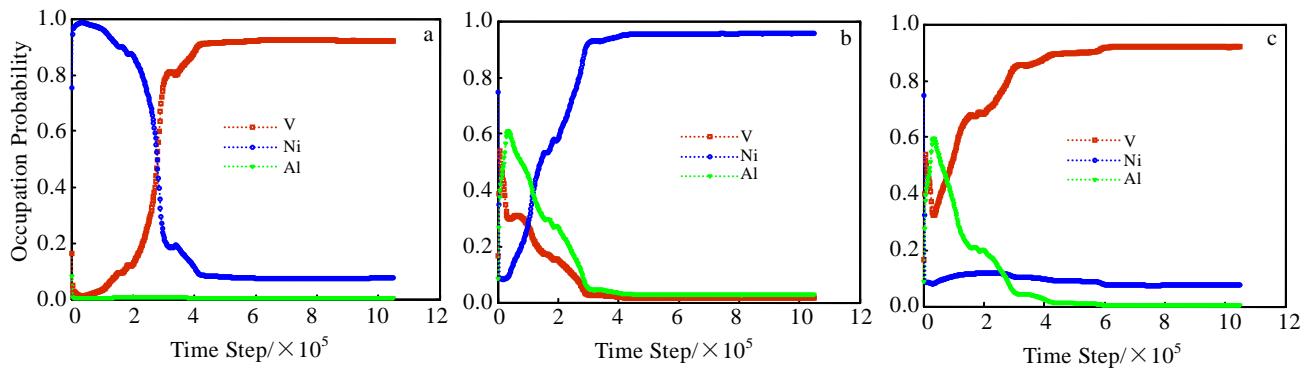


图 8 图 7 中 A 类相界晶格位置上原子的占位几率随时间的演化曲线

Fig.8 Evolution of occupation probabilities of atoms for the interface of A in Fig.7: (a) probabilities in position a, (b) in position b, and (c) in position d

迁移具有较大的势垒, 较难发生迁移。

应力会影响合金原子的扩散行为。由于合金为负错配合金, 相变时压应力会诱发 Al 原子在平行于应力方向上发生定向扩散, 形成扩散通道, 而 Al 原子在垂直于压应力方向 ([001]方向上) 的扩散行为受到抑制, 导致 A 类界面在此方向上的迁移受阻。因此 A 类界面主要在 [100] 方向上发生迁移, 导致 DO₂₂ 在这一方向上的生长。

3 结 论

1) Ni-Al-V 合金沉淀过程中 L₁₂ 较早析出, 早期 DO₂₂ 相长大所需的 V 来自于在 L₁₂ 相间有序畴界处, 而后期则来自于在 L₁₂ 相内部。早期 DO₂₂ 相长大的速度远大于后期 DO₂₂ 相长大的速度。

2) 时效过程中出现了 5 种异相间界面, 其中 A 类界面的迁移为相间迁移的主要类型。A 类界面迁移时, a 位上 Ni 与 V、b 位上的 Al 与 Ni、d 位上的 Al 与 V 发生交换, 从而导致 DO₂₂ 相的生长及 L₁₂ 的分解。

3) 相变初期, A、B 类界面较少, 合金形貌变化不大; 随着沉淀过程的进行, A 类界面数量增加, 有序相的生长及分解过程加剧; 在相变后期, A 类界面数量减少, B 类界面数量增多, 合金达到平衡状态。

4) 应力作用下合金有序相的沉淀顺序未发生改变。在压应力作用下, A 类界面在垂直于应力方向上的迁移受阻, 促使 DO₂₂ 相在沿应力方向上的生长, 从而导致合金“筏状”组织的形成。

参考文献 References

- [1] Fratzl P, Penrose O, Lebowitz J. *Journal of Statistical Physics*[J], 1999, 95: 1429
- [2] Stallybrass C, Schneider A, Sauthoff G. *Intermetallics*[J], 2005, 13: 1263
- [3] Nabarro F R N. *Metall Mater Trans A*[J], 1996, 27: 513
- [4] Tetsu I, Daisuke K, Masahiko H *et al. Acta Mater*[J], 2003, 51: 4033
- [5] Socrate S, Parks D M. *Acta Metall* [J], 1993, 41: 2185
- [6] Takao Murakumo, Toshiharu Kobayashi, Yutaka Koizumi *et al. Acta Materialia*[J], 2004, 52: 3737
- [7] Cabet E, Pasturel A, Ducastelle F. *Physical Review Letter*[J], 1996, 76: 3140
- [8] Tomihisa K, Kanenoand Y. *Intermetallics*[J], 2004, 12: 317
- [9] Han G M, Yu J J, Sun Y L *et al. Materials Science and Engineering A*[J], 2010, 527: 5383
- [10] Xia P C, Yu J J, Sun X F *et al. Journal of Alloys and Compounds*[J], 2007, 443: 125
- [11] Hosford W F, Agrawal S P. *Metall Trans*[J], 1975, 6: 487
- [12] Cahn J W, Hilliard J E. *Chem Phys*[J]. 1958, 28: 258
- [13] Chang J C, Allen S M. *J Mater Res*[J], 1991, 6: 1843
- [14] Nabarro F R N, Cress C M, Kotschy P. *Acta Mater*[J], 1996, 44: 3189
- [15] Johnson R A, Brown J R. *Journal of Materials Research*[J], 1992, 12: 3213
- [16] Wang Y, Khachaturyan A G. *Acta Metall Mater*[J], 1995, 43:1837
- [17] Zhao Yuhong(赵宇宏), Chen Zheng(陈 铮), Liu Bing(刘兵). *Chinese Journal of Rare Metals*(稀有金属)[J], 2003, 27: 119
- [18] Lu Yanli(卢艳丽), Chen Zheng(陈 铮), Zhong Hanwen(钟汉文) *et al. Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2009, 38(11):1890
- [19] Yang Tao(杨 涛), Chen Zheng(陈 铮), Zhang Jing(张 静) *et al. Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2013, 42(9): 1773
- [20] Khachaturyan A G. *Theory of Structural Transformation in Solids*[M]. New York: Wiley, 1983:129
- [21] Chen L Q, Khachaturyan A G. *Scripta Metallurgica Materialia*[J], 1991, 25: 61
- [22] Prikhodko S V, Carnes J D, Saak D G *et al. Scr Mater*[J], 1997, 38: 67
- [23] Miyazaki T, Imamura M, Kozati T. *Mater Sci Eng* [J], 1982, 54: 9
- [24] Singh J B, Sundararaman M, Banerjee S *et al. Acta Mater*[J], 2005, 53: 1135
- [25] Zapolsky H, Pareige C, Marteau L *et al. Calphad*[J], 2001, 25: 125

Microscopic Phase-Field Study for the Evolution of Chemical Composition and Mechanisms of Directional Interface Migration during Phase Transformation for Nickel Based Alloy

Yang Kun^{1,2}, Li He¹, Huo Chunyong¹, Ji Linggang¹, Ma Qiurong¹, Zhang Mingyi², Chen Zheng²

(1. Tubular Goods Research Institute of CNPC, Xi'an 710077, China)

(2. Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China)

Abstract: Evolution of chemical composition during phase decomposition and growth and the mechanisms of the directional interface migration under exterior load for Ni₇₅Al_{7.5}V_{17.5} alloy were investigated, which was based on a microscopic phase-field method. The results show that the growth of DO₂₂ requires in the early stage comes from the ordering domain among L1₂, while it comes from the interior of L1₂ in the later stage, and the growth speed for DO₂₂ in the early stage is faster than that in the later stage. They form five types of interfaces, and A-type is the main type for interface migration. It has a few A and B type interfaces in the early stage, and morphology changes little. With the rise of the A-type interface number, the growth and decomposition for phases accelerate, the number of A-type interface declines and the number of B-type interface increases, and the alloy reaches balance finally. A-type interface migrates along the stress direction under compressive stress; as a result, DO₂₂ grows along this direction, and a rafting structure of the alloy forms.

Key words: directional migration; rafting; microscopic phase-field; nickel based superalloy

Corresponding author: Yang Kun, Ph. D, Tubular Goods Research Institute of CNPC, Xi'an 710077, P. R. China, Tel: 0086-29-81887823,

E-mail: yangkunlo@126.com