

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

董卫平¹, 王琳琳¹, 王晓明¹, 陈 铮²

(1. 浙江师范大学, 浙江 金华 321004)

(2. 西北工业大学 凝固技术国家重点实验室, 陕西 西安 710072)

摘 要: 采用微观相场法, 利用 Khachaturyan 所给原子间相互作用势与长程序参数关系方程, 计算出 $\text{Ni}_{0.75}\text{Al}_x\text{V}_{0.25-x}$ 合金 L_{10} 、 L_{12} 和 DO_{22} 相第一近邻原子间相互作用势, 并用计算的原子间相互作用势模拟了 $\text{Ni}_{0.75}\text{Al}_x\text{V}_{0.25-x}$ 合金沉淀过程以及最终形貌。计算结果表明, L_{10} 、 L_{12} 和 DO_{22} 相第一近邻原子间相互作用势随温度增大而增大, 随浓度增大而增大, 且计算得到的随温度和浓度变化的原子间相互作用势与之前的实验值符合较好。计算的原子间相互作用势的模拟结果能依次得到预析出相 L_{10} 、稳定相 L_{12} 和第二相 DO_{22} , 且合金沉淀形貌与实验结果吻合。相场法反演原子间相互作用势, 拓宽了相场法在合金设计中的应用范围。

关键词: 微观相场法; 原子间相互作用势; $\text{Ni}_{0.75}\text{Al}_x\text{V}_{0.25-x}$ 合金; 反演; 沉淀相

中图分类号: TG111.5

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2018)01-0201-06

任何一种材料的宏观性能均由其微观组织决定, 因此, 对微观组织的研究近年成为了材料科学与工程领域的热点之一。而有时很难用实验方法清晰地研究微观组织的动态形貌变化和有序化沉淀过程, 此时可以用模拟方法尤其是基于原子级的模拟方法, 包括相场法等^[1-3]。其中微观相场动力学模型是一种新型计算材料学方法^[4]。该模型以原子占据晶格位置的几率为场变量来描述微结构变化, 故在计算尺度达到原子级, 并且可获得不同时刻的动态系统信息。可描述所有的扩散过程, 包括原子簇聚、有序化、预析出相、两相竞争、界面的迁移和沉淀相的粗化等^[5-7]。用其研究合金的动态沉淀过程有很大的优越性。

原子间相互作用势是计算机模拟的基本变量之一, 其准确性对模拟结果的影响是至关重要的。故原子间相互作用势模型的建立变得尤为重要。此前学者们利用第一性原理^[8,9]、原子嵌入法^[10]等来计算原子间相互作用势的很多^[11-13], 而利用相场法来计算原子间相互作用势的很少。且现有的其他原子间相互作用势计算方法和模型所计算的原子间相互作用势是不随温度和原子浓度变化的。而本研究所用微观相场法反演计算原子间相互作用势模型是利用 Khachaturyan 所给原子间相互作用势与长程序参数关系方程得出, 此模

型反演出的原子间相互作用势随温度和原子浓度变化而变化^[14-17]。此模型应用于二元 L_{12} 相: 如 Al_3Li , Ni_3Al , 以及三元的 L_{12} 相和 DO_{22} 相: 如, Ni-Al-Fe , Ni-Al-V , Ni-Al-Cr , 已经得到了一些满意的结果^[14-17]。而三元 Ni-Al-V 合金时效过程中, 无序固溶体中除了有 $\text{L}_{12}(\text{Ni}_3\text{Al})$ 有序相析出外, 存在富含铬的 $\text{DO}_{22}(\text{Ni}_3\text{V})$ 有序相, 同时还存在 $\text{L}_{10}(\text{Ni}(\text{Al,V}))$ 预析出相^[18]。在 L_{10} 相、 L_{12} 相和 DO_{22} 相均存在的金属化合物中由于各相的原子间相互作用和形核机制的不同, 其析出时间不同。最先析出且不稳定瞬间转变为其他稳定相的称为预析出相, 先析出的稳定相称为第一相, 后析出的稳定相称为第二相, 同时由于 L_{12} 相和 DO_{22} 相界面上的点阵失配较小, 且原子排列相似, 最终二者可以通过共格界面共存。本研究就是在此基础上将推导所得随温度和浓度变化的原子间相互作用势模型用于计算 Ni-Al-V 合金中 L_{10} 相、 L_{12} 和 DO_{22} 相的原子间相互作用势, 同时将反演的原子间相互作用势代入微观相场中模拟合金动态沉淀过程, 并与实验结果进行对比, 从而验证用微观相场法反演计算的原子间相互作用势的准确性, 这对正确进行模拟合金设计有重要意义。

1 原子间相互作用势模型

收稿日期: 2017-01-10

基金项目: 国家自然科学基金 (51501165); 浙江省自然科学基金一般项目 (LY15E020006, LY17E010002)

作者简介: 董卫平, 女, 1984 年生, 博士, 讲师, 浙江师范大学工学院先进材料成形技术研究所, 浙江 金华 321004, E-mail: dwp@zjnu.cn

微观相场方程基于 Onsager 和 Ginzburg-Landau 理论^[19-22], 通过晶格位置 \vec{r} 在 t 时刻的占位几率 $P(\vec{r}, t)$ 来描述原子组态和沉淀相形貌, 其变化率与自由能对原子占位几率的变分成正比。对于三元系统, 占位几率公式为 $P_A(\vec{r}, t) + P_B(\vec{r}, t) + P_C(\vec{r}, t) = 1$, 其中 A、B 和 C 表示 3 种不同合金元素, 其动力学方程为:

$$\begin{cases} \frac{dP_A(\vec{r}, t)}{dt} = \frac{1}{k_B T} \sum_{\vec{r}'} [L_{AA}(\vec{r} - \vec{r}') \frac{\partial F}{\partial P_A(\vec{r}', t)} + L_{AB}(\vec{r} - \vec{r}') \frac{\partial F}{\partial P_B(\vec{r}', t)}] + \zeta_1(\vec{r}, t) \\ \frac{dP_B(\vec{r}, t)}{dt} = \frac{1}{k_B T} \sum_{\vec{r}'} [L_{BB}(\vec{r} - \vec{r}') \frac{\partial F}{\partial P_B(\vec{r}', t)} + L_{AB}(\vec{r} - \vec{r}') \frac{\partial F}{\partial P_A(\vec{r}', t)}] + \zeta_2(\vec{r}, t) \end{cases} \quad (1)$$

式中, F 为自由能, 与原子间相互作用势有关; k_B 为 Boltzmann 常数; $\zeta(r, t)$ 为热起伏项, 服从高斯分布; $L(r - r')$ 表示晶格扩散的唯象常数。关于微观相场法的更详细的公式和过程, 可以参考文献[19-22]。

本研究第一近邻原子间相互作用势求值方程基于上述微观相场动力学方程, 最早是由 Khachaturyan 创建^[19]。基于该方程, Khachaturyan 进一步得出溶质原子占位几率和原子间相互作用势之间关系的方程:

$$c + \sum_{s=1}^{t-1} \eta_s E_s(r) = \left[\exp\left(\frac{-\mu + V(0)c + \sum_{s=1}^{t-1} V(k_s) \eta_s E_s(r)}{k_B T}\right) + 1 \right]^{-1} \quad (2)$$

其中, c 为溶质原子的浓度, η_s 是长程序参数, $E_s(r)$ 是与晶格对称性有关的函数, μ 是原子之间的化学势, $t-1$ 是超晶格结构非零向量 k_s 的数目。在此 $V(k) = \sum_r \tilde{V}(r) e^{ikr}$, 是原子间相互作用势的傅里叶变换形式。

根据公式(2), 得出 $L1_0$ 相占位几率和原子间相互作用势可用两个方程表示如下:

$$c + \frac{1}{2} \eta = \left[\exp\left(\frac{-u + c(v(0) + v(k_0)\eta)}{k_B T}\right) + 1 \right]^{-1} \quad (3)$$

$$c - \frac{1}{2} \eta = \left[\exp\left(\frac{-u + c(v(0) - v(k_0)\eta)}{k_B T}\right) + 1 \right]^{-1} \quad (4)$$

上面两式联立可以得出:

$$\frac{V(k_0)\eta}{k_B T} = \ln \frac{(1-\eta)[1-c(1+\eta)]}{(1+\eta)[1-c(1-\eta)]} \quad (5)$$

式中, 忽略其他近邻作用 $V(k_0) = -4W_1$, 得出 $L1_0$ 相第一近邻原子间相互作用势 W_1 和长程序参数 η 之间关

系方程:

$$\frac{-4W_1\eta}{k_B T} = \ln \frac{(1-\eta)[1-c(1+\eta)]}{(1+\eta)[1-c(1-\eta)]} \quad (6)$$

同理根据公式(2), 得出 $L1_2$ 相和 DO_{22} 相第一近邻原子间相互作用势 W_1 和长程序参数 η 之间关系方程:

$$\frac{-4W_1\eta}{k_B T} = \ln \frac{(1-\eta)[1-c(1+3\eta)]}{(1+3\eta)[1-c(1-\eta)]} \quad (7)$$

$$-\frac{2W_1}{k_B T} (\eta_1 + \eta_2) = \ln \frac{[1-c(1+\eta_1+2\eta_2)](1-\eta_1)}{[1-c(1-\eta_1)](1+\eta_1+2\eta_2)} \quad (8)$$

由公式(6)至公式(8)可以从变化的长程序参数入手求得 $L1_0$ 相、 $L1_2$ 相和 DO_{22} 相不同温度、不同浓度下的第一近邻原子间相互作用势 W_1 , 以下也称为微观相场反演原子间相互作用势, 上述方程称为微观相场反演原子间相互作用势方程。

2 结果与讨论

以 $Ni_{0.75}Al_xV_{0.25-x}$ 合金为研究对象, 首先计算沉淀相 $L1_0$ 、 $L1_2$ 和 DO_{22} 的第一近邻原子间相互作用势, 并研究原子间相互作用势随温度和浓度的变化规律, 并将微观相场法反演计算的作用势结果与其他方法得到的值进行比较; 然后将计算得到的随温度浓度变化的原子间相互作用势代入微观相场法中计算 $Ni_{0.75}Al_{0.16}V_{0.09}$ 合金在温度为 950 K 时沉淀过程和最终形貌, 并用反演原子间相互作用势模拟 $Ni_{0.75}Al_{0.075}V_{0.175}$ 合金在温度为 1273 K 时组织形貌与实验结果进行对比。

计算 $L1_0$ 、 $L1_2$ 和 DO_{22} 相随温度浓度变化的第一近邻原子间相互作用势选取的温度和浓度参照 Ni_3Al-Ni_3V 伪二元相图^[23], 根据相图, 该合金在 1281 K 发生共析反应, 高温无序相 α 的低温平衡态为 $L1_2(Ni_3Al)$ 和 $DO_{22}(Ni_3V)$ 相, 2 种有序相在低温下一定浓度范围内共存。将选取的数据代入公式(6)至公式(8)反演并根据长程序参数接近 1(0.95~0.99)时, 才认为沉淀相已完全析出并达到稳定, 故选取长程序参数为 0.95~0.99 时相场反演原子间相互作用势值 W_1 做近似平均优化处理, 优化结果即得到沉淀相第一近邻原子间相互作用势, 结果见表 1 至表 4。

表 1 至表 3 分别为 $L1_0-Ni(Al, V)$ 、 $L1_2-Ni_3Al$ 和 $DO_{22}-Ni_3V$ 相不同温度不同浓度的原子间相互作用势。由表 1 至表 3 可以得出, 不同温度浓度下 $L1_0-Ni(Al, V)$ 、 $L1_2-Ni_3Al$ 和 $DO_{22}-Ni_3V$ 相原子间相互作用势不同, 每行的浓度不变, 原子间相互作用势随温度的升高而增大; 每列的温度不变, 随浓度增大, 原子间相互作用势也增大。从晶胞结构来说, $L1_0$ 相的溶质原子浓度为 0.5, 而实际在 $Ni_{0.75}Al_xV_{0.25-x}$ 合金

表1 $\text{L1}_0\text{-Ni}(\text{Al},\text{V})$ 相的原子间相互作用势

Table 1 Interatomic potentials of $\text{L1}_0\text{-Ni}(\text{Al},\text{V})$ phase (meV)				
$c_{\text{Al}+\text{V}}$	T/K			
	950	1000	1046.5	1100
0.21	81.75	86.06	90.06	94.66
0.25	84.73	89.19	93.34	98.11

表2 $\text{L1}_2\text{-Ni}_3\text{Al}$ 相的原子间相互作用势

Table 2 Interatomic potentials of $\text{L1}_2\text{-Ni}_3\text{Al}$ phase (meV)				
c_{Al}	T/K			
	950	1000	1046.5	1100
0.04	109.10	114.85	120.19	126.33
0.06	111.14	116.99	122.43	128.69
0.16	126.16	132.80	138.98	146.08
0.21	141.72	149.18	156.12	164.10

表3 $\text{DO}_{22}\text{-Ni}_3\text{V}$ 相的原子间相互作用势

Table 3 Interatomic potentials of $\text{DO}_{22}\text{-Ni}_3\text{V}$ phase (meV)				
c_{V}	T/K			
	950	1000	1046.5	1100
0.21	119.86	126.17	132.04	138.79
0.19	113.40	119.37	124.92	131.31
0.09	95.28	100.29	104.96	110.33
0.04	89.84	94.56	98.96	104.02

中, L1_0 相的溶质原子浓度为 $\text{Al}+\text{V}$ 浓度之和 0.25, 温度为 950, 1000, 1046.5 和 1100 K 时的原子间相互作用势较接近 $\text{Ni}_{0.75}\text{Al}_x\text{V}_{0.25-x}$ 合金 L1_0 相的实际值, 分别为: 84.73, 89.19, 93.34 和 98.11 meV。对于 $\text{Ni}_{0.75}\text{Al}_x\text{V}_{0.25-x}$ 合金, Al 和 V 浓度之和为 0.25, 所以表 2 和表 3 同行对应同种合金。表 2 中, 同列的温度不变, 随 Al 浓度增大, 原子间相互作用势也增大; 表 3 中, 随 V 浓度增大, 原子间相互作用势也增大。由此得到: 温度升高, 所有原子间相互作用势均增大; 相同温度, 随 $\text{Al}+\text{V}$ 浓度增大, $\text{L1}_0\text{-Ni}(\text{Al},\text{V})$ 原子间相互作用势增大; 相同温度, Al 浓度增大, V 浓度减小, $\text{L1}_2\text{-Ni}_3\text{Al}$ 相原子间相互作用势增大, $\text{DO}_{22}\text{-Ni}_3\text{V}$ 相原子间相互作用势减小, 反之 $\text{L1}_2\text{-Ni}_3\text{Al}$ 相原子间相互作用势减小, $\text{DO}_{22}\text{-Ni}_3\text{V}$ 相原子间相互作用势增大。

表 4 是 $\text{L1}_2\text{-Ni}_3\text{Al}$ 和 $\text{DO}_{22}\text{-Ni}_3\text{V}$ 相在一定温度和浓度时, 采用微观相场反演法计算的第一近邻原子间相互作用势值与其他计算值^[24]的对比。与文献中一样, 温度为 1046.5 K 时的原子间相互作用势值取自表 2 和表 3, 可见在一定误差允许范围内, 二者结果几乎接近。但目前采用其他方法还尚未计算出随温度和浓度相关的原子间相互作用势值。故本研究微观相场反演原子间相互作用势方法丰富了原子间相互作用势计算方法。也进一步说明了原子间相互作用势与温度和浓度之间关系密切。对以后精确的模拟研究合金有非常

表4 L1_2 和 DO_{22} 相的相场反演原子间相互作用势和其他方法计算结果的对比

Table 4 Comparison between the phase field inverse interatomic potentials of L1_2 and DO_{22} phase and other method results				
Phase	T/K	Phase field inverse interatomic potentials/meV	Other method results/meV	Ratio/%
$\text{DO}_{22}\text{-Ni}_3\text{V}$	1046.5	104.96	107.2 ^[24]	2.12
$\text{L1}_2\text{-Ni}_3\text{Al}$	1046.5	122.43	122.3 ^[24]	0.11

重要的作用。但目前该方法还尚待完善, 对于计算其他近邻原子间相互作用势需做进一步研究。

为研究用微观相场法反演计算的原子间相互作用势是否可以进一步用于微观相场法模拟合金的沉淀过程, 图 1 为将表 1 至表 3 中随温度和浓度变化的原子间相互作用势代入微观相场法模拟的 $\text{Ni}_{0.75}\text{Al}_{0.16}\text{V}_{0.09}$ 合金在温度为 950 K 时, 沉淀相析出序列微观结构演化过程。其中蓝色为 Ni 原子为基体, 绿色为 Al 原子聚集处为 L1_2 相, 红色为 V 原子聚集处为 DO_{22} 相。温度为 950 K, 溶质原子 Al 浓度为 0.16, 溶质原子 V 浓度为 0.09, 分别取表 1 中 $\text{L1}_0\text{-Ni}(\text{Al},\text{V})$ 相 84.73 meV、表 2 中 $\text{L1}_2\text{-Ni}_3\text{Al}$ 相 126.16 meV 和表 3 中 $\text{DO}_{22}\text{-Ni}_3\text{V}$ 相 95.28 meV 进行合金沉淀序列模拟。图 1a 是时间步长为 10 步时, 即为起始时, 合金无有序相析出, 处于无序状态。图 1b 渐渐出现有序相, 该有序相由于不稳定是过渡相, 会迅速转变为其他稳定相, 故被称为预析出相 L1_0 相。图 1c 为时间步长 2000 步时, 已经有许多 L1_0 预析出相转变为 L1_2 稳定相(析出后不会消失转变的相), 同时还有部分 L1_0 相存在。直到 3000 步时即图 1d, 基本所有的 L1_0 预析出相都已转变为 L1_2 稳定相, L1_2 相绿色几乎充满整个合金系统, 中间由许多界面相连接。随着时效时间进行到 150 000 步时即图 1e, 在 L1_2 相间的界面处有部分 DO_{22} 第二相红色聚集析出, 这是由于 V 原子在界面处聚集, 比较图 1d, 合金系统中相长大, 同时界面减少。到 2 000 000 步图 1f 时 L1_2 和 DO_{22} 相均粗化长大。为了更清晰地看出不同时间步长相析出过程, 将合金系统中同一处的 L1_0 、 $\text{L1}_0+\text{L1}_2$ 、 L1_2 和 $\text{L1}_2+\text{DO}_{22}$ 相局部放大在图中左上角处。由此可得, 将微观相场法反演计算的随温度浓度变化的原子间相互作用势代入微观相场法模拟 $\text{Ni}_{0.75}\text{Al}_{0.16}\text{V}_{0.09}$ 合金在温度为 950 K 时, 合金析出序列为无序相 $\rightarrow\text{L1}_0$ 预析出相 $\rightarrow\text{L1}_0$ 预析出相+ L1_2 稳定相 $\rightarrow\text{L1}_2$ 稳定相 $\rightarrow\text{L1}_2+\text{DO}_{22}$ 稳定相, 符合相图对 Ni-Al-V 合金系统的沉淀过程的分析^[23]。

$\text{Ni}_{0.75}\text{Al}_{0.16}\text{V}_{0.09}$ 合金在温度为 950 K 时, L1_0 、 L1_2 和 DO_{22} 相体积分数变化曲线为图 2。由于 L1_0 预析出

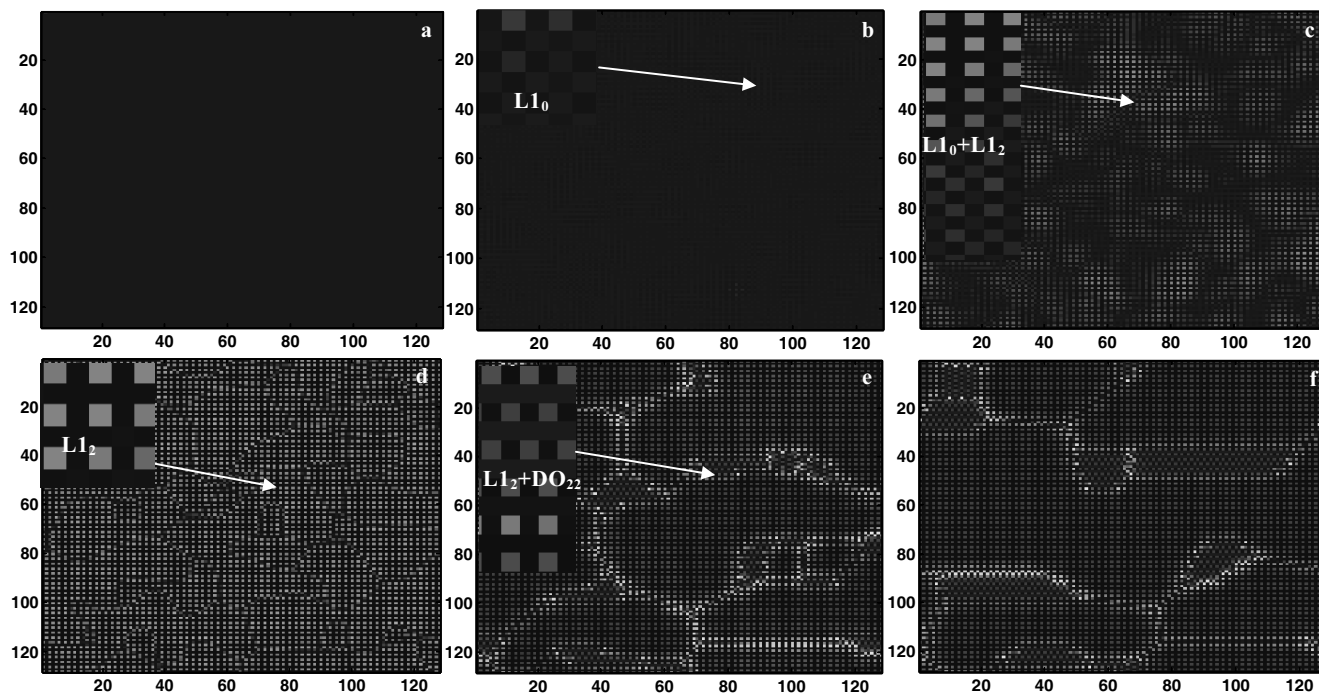


图 1 $\text{Ni}_{0.75}\text{Al}_{0.16}\text{V}_{0.09}$ 合金在温度为 950 K 时, 沉淀相析出序列微观结构演化过程图

Fig.1 Simulated atomistic microstructure temporal evolution pictures of $\text{Ni}_{0.75}\text{Al}_{0.16}\text{V}_{0.09}$ at 950 K: (a) $t=10$, (b) $t=1500$, (c) $t=2000$, (d) $t=3000$, (e) $t=15000$, and (f) $t=200000$

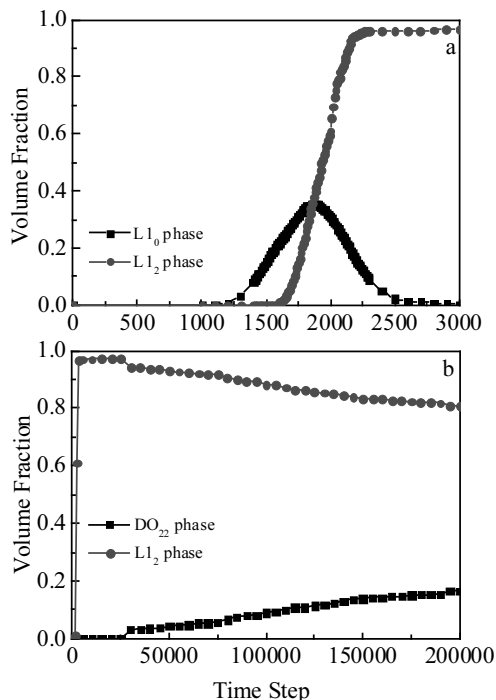


图 2 $\text{Ni}_{0.75}\text{Al}_{0.16}\text{V}_{0.09}$ 合金在温度为 950 K 时, L_{10} 、 L_{12} 和 DO_{22} 相体积分数变化曲线

Fig.2 Volume fraction of L_{10} , L_{12} and DO_{22} phases in $\text{Ni}_{0.75}\text{Al}_{0.16}\text{V}_{0.09}$ alloy at 950 K: (a) L_{10} and L_{12} phases and (b) L_{12} and DO_{22} phases

相出现时间很短, 而 DO_{22} 第二相出现较晚, 体积变化过程较长, 故在不同曲线图中才能清晰地反映体积分数的变化。图 2a 为 L_{10} 和 L_{12} 相体积分数曲线, 由图可以得出, L_{10} 预析出相在 1000 步之后就开始渐渐上升, 而 L_{12} 稳定相在 1500 之后才开始上升, 可见 L_{10} 比 L_{12} 相先析出。 L_{10} 相的体积分数最高峰只到 0.4, 说明 L_{10} 相未充满合金系统, 只是在形核处附近形成, 之后就迅速转变为 L_{12} 相, L_{10} 相的体积分数曲线渐渐降为 0, 完全转变为 L_{12} 相。 L_{12} 相的体积分数曲线不断上升, 直到几乎占满总个合金系统, 直到 30000 步之后, 图 2b 中 DO_{22} 第二相的出现, L_{12} 相的体积分数曲线逐渐下降, 而 DO_{22} 相的体积分数曲线逐渐上升, 对应图 1e 和图 1f, DO_{22} 相明显增多, L_{12} 相相应减少。由此可得, $\text{Ni}_{0.75}\text{Al}_{0.16}\text{V}_{0.09}$ 合金在温度为 950K 时, L_{10} 相比 L_{12} 相先析出后消失, DO_{22} 后析出并渐渐增多, 而 L_{12} 相最多。

$\text{Ni}_{0.75}\text{Al}_x\text{V}_{0.25-x}$ 合金微观相场法反演原子间相互作用势下模拟结果和实验结果对照如图 3 所示。图 3a、3b 分别 1273 K 时 $\text{Ni}_{0.75}\text{Al}_{0.075}\text{V}_{0.175}$ 合金在相场法反演原子间相互作用势下模拟的合金组织和 $\text{Ni}_{0.75}\text{Al}_{0.075}\text{V}_{0.15}\text{Ti}_{0.025}$ 合金时效的透射电镜微观多相组织图^[25]。虽然 2 种合金成分稍有区别, 但由于 $\text{Ni}_{0.75}\text{Al}_{0.075}\text{V}_{0.15}\text{Ti}_{0.025}$ 合金中 Ti 原子主要是取代 V 原子占位且 Ti 的浓度很

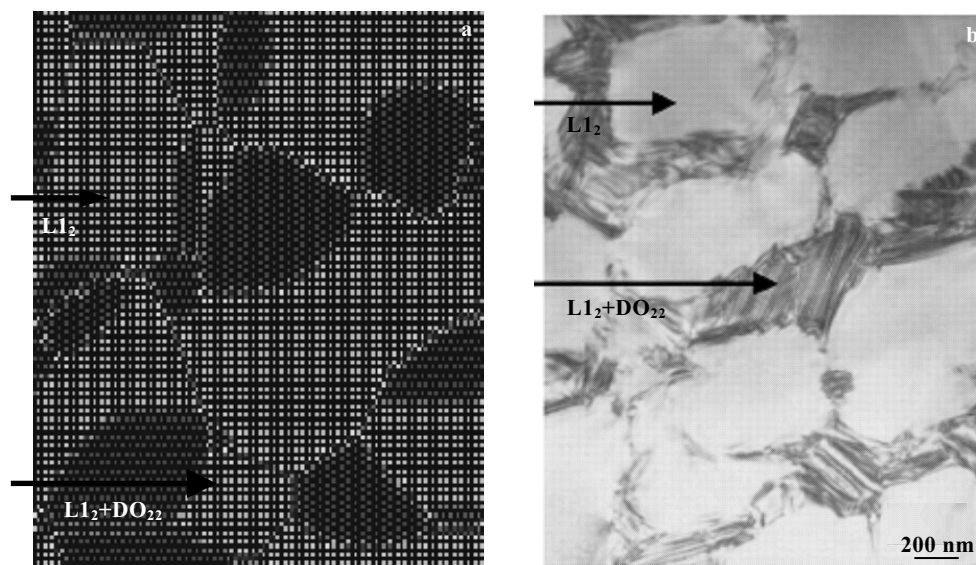


图3 1273 K 时效在相场反演原子间相互作用势下模拟合金组织与实验结果的对比

Fig.3 Comparison between the simulated morphology and experimental results at 1273 K: (a) simulated morphology of $\text{Ni}_{0.75}\text{Al}_{0.075}\text{V}_{0.175}$ alloy and (b) TEM image of $\text{Ni}_{0.75}\text{Al}_{0.075}\text{V}_{0.15}\text{Ti}_{0.025}$ alloy^[25]

小,故可以认为2种合金的成分近似一样。总的来说,微观相场法反演原子间相互作用势下模拟得到的 $\text{Ni}_{0.75}\text{Al}_{0.075}\text{V}_{0.175}$ 合金中沉淀相的两相分布形貌与实验对 $\text{Ni}_{0.75}\text{Al}_{0.075}\text{V}_{0.15}\text{Ti}_{0.025}$ 伪三元合金的研究中得到了2种相 L1_2 和 $\text{L1}_2+\text{DO}_{22}$ 组织形貌相似。由此证明了本研究的微观相场法反演原子间相互作用势具有较好的可靠性与准确性,进一步说明了微观相场法反演原子间相互作用势代入微观相场模型非常合理而且可以用于描述合金沉淀过程。

微观相场反演原子间相互作用势代入微观相场模拟中,发现微观相场法反演的原子间相互作用势下的合金沉淀过程能很好地反映微观组织形貌,即不改变各有序相的体积分数;不改变沉淀早期析出相的沉淀序列;与理论分析和已有的实验结果相吻合。因此,微观相场反演原子间相互作用势值可以用于微观相场法对 $\text{Ni}_{0.75}\text{Al}_x\text{V}_{0.25-x}$ 合金沉淀过程进行计算机模拟。

3 结 论

1) 微观相场法反演的原子间相互作用势值随温度和浓度变化,相同浓度,原子间相互作用势随温度升高均增大,相同温度,原子间相互作用势随相应相的溶质原子浓度增大而增大。且相同温度下,微观相场法计算的原子间相互作用势值与其他计算值非常吻合。

2) 微观相场法反演的原子间相互作用势代入模拟温度为 950 K 时 $\text{Ni}_{0.75}\text{Al}_{0.16}\text{V}_{0.09}$ 合金沉淀过程和体

积分数曲线,得出沉淀序列为:无序相 $\rightarrow\text{L1}_0$ 预析出相 $\rightarrow\text{L1}_0$ 预析出相+ L1_2 稳定相 $\rightarrow\text{L1}_2$ 稳定相 $\rightarrow\text{L1}_2+\text{DO}_{22}$ 稳定相,且 L1_0 预析出相不稳定瞬间转变为 L1_2 相。

3) 微观相场法反演的原子间相互作用势下模拟的合金组织形貌与实验结果较为一致,微观相场反演随温度和浓度变化的原子间相互作用势方法丰富了原子间相互作用势计算方法,对以后精确的模拟研究合金和设计合金化有非常重要作用。

参考文献 References

- [1] Huang H B, Ma X Q, Wang J J *et al.* *Acta Mater*[J], 2015, 83: 333
- [2] Takaki T, Sakane S, Ohno M *et al.* *Acta Mater*[J], 2016, 118: 230
- [3] Mu Hong(牧 虹), Lu Yanli(卢艳丽), Chen Zheng(陈 铮). *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2013, 42(8): 70
- [4] Raabe D. *Computational Materials Science*[M]. Beijing: Chemical Industry Press, 2002
- [5] Lu Y L, Chen Z, Li X *et al.* *Comp Mater Sci*[J], 2015, 99: 247
- [6] Lu Y L, Lu G M, Jia D W *et al.* *Trans Nonferrous Met Soc China*[J], 2015, 25: 544
- [7] Ma Qingshuang(马庆爽), Jin Yuchun(靳玉春), Zhao Yuhong(赵宇宏) *et al.* *The Chinese Journal of Nonferrous Metals*(中国有色金属学报)[J], 2015, 25(6): 1450
- [8] Li Rusong(李如松), He Bun(何 彬), Zhang Quanhu(张全虎).

- Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2011, 40(2): 195
- [9] Mendez J P, Ariza M P. *J Mech Phys Solids*[J], 2016, 93: 198
- [10] Lipnitskii A G, Saveliev V N. *Comp Mater Sci*[J], 2016, 121: 67
- [11] Purja Pun G P, Darling K A, Kecskes L J *et al. Acta Mater*[J], 2015, 100: 377
- [12] Tomas C D, Suarez-Martinez I, Marks N A. *Carbon*[J], 2016, 109: 681
- [13] Pishkenari H N, Ghanbari P G. *Comp Mater Sci*[J], 2016, 122: 38
- [14] Xu Cong(徐 聪), Chen Zheng(陈 铮), Lu Yanli(卢艳丽) *et al. Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2010, 39(6): 1027
- [15] Dong Weiping(董卫平), 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], 2010, 39(11): 1970
- [16] Dong W P, Wang Y X, Yang K *et al. Chinese Sci Bull*[J], 2011, 56: 2055
- [17] Dong W P, Chen Z, Wang Y X. *Sci China Phys Mech Astron*[J], 2011, 54(5): 821
- [18] Lu Y L, Lu G M, Liu F *et al. J Alloy Compd*[J], 2015, 637: 149
- [19] Khachaturyan A G. *Theory of Structural Transformation in Solids*[M]. New York: Wiley, 1983
- [20] Chen L Q, Khachaturyan A G. *Acta Metall Mater*[J], 1991, 39: 2533
- [21] Wang Y, Chen L Q, Khachaturyan A G. *Acta Metall Mater*[J], 1993, 41: 279
- [22] Poduri R, Chen L Q. *Acta Mater*[J], 1998, 46: 1719
- [23] Taimura M, Hirata A, Koyama Y. *Phys Rev B*[J], 2004, 70: 094 111
- [24] Poduri R, Chen L Q. *Acta Mater*[J], 1998, 46(5): 1719
- [25] Nunomura Y, Kaneno Y, Tsuda H *et al. Intermetallics*[J], 2004, 12: 389

Inversion of the Interatomic Potential in $\text{Ni}_{0.75}\text{Al}_x\text{V}_{0.25-x}$ Alloy by Microscopic Phase-Field Simulation

Dong Weiping¹, Wang Linlin¹, Wang Xiaoming¹, Chen Zheng²

(1. Zhejiang Normal University, Jinhua 321004, China)

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

Abstract: The first nearest neighbor interatomic potentials of $\text{Ni}_{0.75}\text{Al}_x\text{V}_{0.25-x}$ alloy's for L_{10} , L_{12} and DO_{22} phases were calculated out according to the formula which were referenced on the relation equation between interatomic potentials and long range order parameters by Khachaturyan. Then we simulated the precipitation process and the final morphology of $\text{Ni}_{0.75}\text{Al}_x\text{V}_{0.25-x}$ alloy using the calculated potentials based on the Microscopic Phase-field method. The results show that the interatomic potentials of L_{10} , L_{12} and DO_{22} phases will increase while the temperatures or the atom's concentration rise. And the interatomic potentials, which change with the temperature and the concentration, match well with the earlier values. The simulation results can obtain the pre-precipitation phase L_{10} , the stable phase L_{12} and the second phase DO_{22} . And the alloy precipitation morphology is found to be in agreement with the experimental result. The inversion of interatomic potentials by the phase field method expands the application of the phase field method in the alloy design.

Key words: microscopic phase-field method; interatomic potential; $\text{Ni}_{0.75}\text{Al}_x\text{V}_{0.25-x}$ alloy; inversion; precipitated phase

Corresponding author: Dong Weiping, Ph. D., Lecturer, Lab for Advanced Material Processing, Zhejiang Normal University, Jinhua 321004, P. R. China, E-mail: dwp@zjnu.cn