

相场法研究 Ni-Al 间作用势对 Ni₇₅Al₁₄Cr₁₁ 合金 L₁₀ 预析出相的影响

董卫平¹, 汪彬¹, 宫宁宁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: 采用微观相场法研究了 Ni₇₅Al₁₄Cr₁₁ 合金第 1 个近邻到第 4 个近邻 Ni-Al 原子间相互作用势对 L₁₀ 预析出相沉淀过程的影响。结果表明, 当第 3 近邻 Ni-Al 原子间相互作用势增大或第 4 种近邻 Ni-Al 原子间相互作用势减少时, L₁₀ 预析出相和 L₁₂ 平衡相均提前沉淀, 且 L₁₀ 预析出相体积分分数减少而 L₁₂ 相的最终体积分分数几乎不变; 当第 3 近邻 Ni-Al 原子间相互作用势减少或第 4 近邻 Ni-Al 原子间相互作用势的增大时, L₁₀ 预析出相和 L₁₂ 最终相都会推迟沉淀, 且 L₁₀ 预析出相和 L₁₂ 相体积分分数均增大; 与上述 2 种情况相比, 改变第 1 近邻 Ni-Al 原子间相互作用势对 L₁₀ 预析出相沉淀过程的影响较小, 而改变第 2 近邻 Ni-Al 原子间相互作用势对沉淀过程几乎没有影响。进一步研究表明, Ni-Al 原子间相互作用势改变不影响合金的沉淀机制, 将影响 L₁₀ 预析出相、L₁₂ 平衡相的析出时间、速度和 2 种相的体积分分数, 沉淀形貌等, 从而影响 Ni₇₅Al₁₄Cr₁₁ 高温合金的结构和性能, 对合金优化设计有指导意义。

关键词: 相场法; 预析出相; Ni₇₅Al₁₄Cr₁₁ 合金; 原子间相互作用势

中图分类号: TG111.5

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2020)01-0169-08

由于实验研究的局限性, 计算机模拟成为科学研究的重要手段。材料的结构性质模拟研究, 除了直接的第一原理计算以外, 就是经验或半经验的从原子间相互作用势出发来进行材料的原子级模拟。不管是分子动力学方法与蒙特卡洛方法, 还是本研究所用相场方法, 最初输入的参数都包含原子间相互作用势^[1-3]。而且原子间相互作用势精确与否将直接影响着模拟结果的准确性, 因此原子间相互作用势的研究一直是凝聚态物质研究领域的一个重要课题, 发展了很多原子间相互作用势模型, 但是没有一种势模型是完全适用于不同结构、不同模拟方法的。原子间相互作用势模型将结合应用发展, 并在应用中不但出现新问题, 需要继续研究^[4-9]。

相场方法作为一种有效的材料模拟方法, 近年来在微观组织的模拟方面发展迅速, 应用范围不断扩大, 空间范围也从二维模型逐步发展到三维模型^[10-14]。基于 Onsager 和 Ginzburg-Landau 理论的微观相场理论, Chen 等^[15]实现了合金相变过程的模拟。该方法中原子间相互作用势采用四近邻原子间相互作用的近似, 研究表明原子间相互作用势对合金相变的扩散过程(包括原子簇聚、有序化、畴界的迁移和沉淀相的粗化)均有影响,

为发展新原子间相互作用势模型获得了一些具有指导意义的结果^[16,17]。研究表明镍基高温合金在沉淀过程中通常存在预析出相结构, 首先析出预析出相 L₁₀ 结构, 之后 L₁₀ 预析出相将转变为稳定相 L₁₂ 结构^[3,18], 且原子间相互作用势对预析出相有影响^[19], 但具体是哪类原子间相互作用势或哪个近邻原子间相互作用势对其有影响, 目前还尚未研究, 本工作基于此, 研究了不同近邻的 Ni-Al 原子间相互作用势对 Ni₇₅Al₁₄Cr₁₁ 合金预析出相 L₁₀ 结构沉淀过程(包括沉淀速率、沉淀序列、沉淀机制、相的体积分分数等)的影响。

1 相场法方程

R. Poudri 和 L. Q. Chen^[20]首先将微观相场动力学方程应用于模拟实际二元体系合金的沉淀过程, 再基于二元体系微观相场扩散方程发展了三元体系沉淀过程动力学模型^[21]。设 $P_A(\mathbf{r}, t)$ 、 $P_B(\mathbf{r}, t)$ 、 $P_C(\mathbf{r}, t)$ 分别是 A、B 和 C 原子在 t 时刻、占据格点位置 \mathbf{r} 的几率, 由于 $P_A(\mathbf{r}, t) + P_B(\mathbf{r}, t) + P_C(\mathbf{r}, t) = 1$, 所以每个格点上只有 2 个方程是独立的。假设以 A 原子和 B 原子的占位几率为 2 个独立变量, 三元体系微观扩散方程为:

收稿日期: 2019-01-22

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(LY18E010002, Y18E050011); 浙江省基础公益研究计划项目(LGG18E050010)

作者简介: 董卫平, 女, 1984 年生, 博士, 副教授, 浙江师范大学工学院, 浙江 金华 312004, E-mail: dwp@zjnu.cn

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

其中, $L_{\alpha\beta}(r-r')$ 是与单位时间内, 一对 α 、 β 原子在格点位置 r 和 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 (是原子间相互作用势的函数), k_B 为玻尔兹曼常数, T 为绝对温度。

F 自由能是关于原子间相互作用势的函数, 由于三元体系中考虑 3 种原子的跃迁以及可能的排布, 采用四近邻原子间相互作用近似, 比二近邻原子间相互作用近似可更为准确地描述自由能。设 $V_{\alpha\beta}^1, V_{\alpha\beta}^2, V_{\alpha\beta}^3, V_{\alpha\beta}^4$ 分别是第 1、2、3、4 近邻原子间相互作用势, 有:

$$\begin{aligned} V_{\alpha\beta}(k)_{ch} = & 4V_{\alpha\beta}^1(\cos\pi h \cdot \cos\pi k + \cos\pi h \cdot \cos\pi l + \cos\pi k \cdot \cos\pi l) \\ & + 2V_{\alpha\beta}^2(\cos 2\pi h + \cos 2\pi k + \cos 2\pi l) \\ & + 8V_{\alpha\beta}^3(\cos 2\pi h \cdot \cos\pi k \cdot \cos\pi l + \cos\pi h \cdot \cos 2\pi k \cdot \cos\pi l + \cos\pi h \cdot \cos\pi k \cdot \cos 2\pi l) \\ & + 4V_{\alpha\beta}^4(\cos 2\pi h \cdot \cos 2\pi k + \cos 2\pi h \cdot \cos 2\pi l + \cos 2\pi k \cdot \cos 2\pi l) \end{aligned} \quad (2)$$

对于 Ni-Al-Cr 三元合金 α 和 β 分别表示 Ni, Al 或 Cr 原子。本实验重点研究 Ni-Al 原子间相互作用势 $V_{NiAl}(k)$ 中第 1、2、3、4 近邻原子间相互作用势对 $Ni_{75}Al_{14}Cr_{11}$ 合金析出相 $L1_0$ 沉淀过程的影响。

2 结果与讨论

以 $Ni_{75}Al_{14}Cr_{11}$ 合金为研究对象, 温度为 800 K, 模拟了析出相 $L1_0$ 在不同 Ni-Al 原子间相互作用势下开始出现和转变为 $L1_2$ 相的过程, 比较了不同 Ni-Al 原子间相互作用势下体积分数, 平均长程序参数和成分序参数以及沉淀机制等。首先计算了不同 Ni-Al 原子间相互作用势下析出相 $L1_0$ 开始出现的时间步长和转变为 $L1_2$ 相所需的时间步长如表 1。可以看出 Ni-Al 原子间相互作用势改变对析出相 $L1_0$ 结构开始析出及转变过程所需时间均有影响。当 Ni-Al 第 1 近邻原子间相

相互作用势减少 10 meV 时, 将使析出相 $L1_0$ 推迟析出; 而其他近邻原子间相互作用势变化对开始析出 $L1_0$ 相的时间影响不大, 如表 1 第 1 列所示。当第 3 近邻减少 10 meV 和第 4 近邻增加 10 meV 时, 将使析出相 $L1_0$ 转变为稳定相 $L1_2$ 的时间大大延长, 即转变速率减小, 尤其是第 4 近邻增加 10 meV 时; 而第 3 近邻增加 10 meV 和第 4 近邻减少 10 meV 将缩短转变过程, 即转变速率加快; 其他近邻原子间相互作用势改变影响不大, 如表 1 第 2 列所示。综上, Ni-Al 原子间相互作用势变化将改变析出相 $L1_0$ 结构的沉淀进程。

图 1a, 1b 和 1c 为 $Ni_{75}Al_{14}Cr_{11}$ 合金不同 Ni-Al 原子间相互作用势下, 刚开始析出相时的沉淀形貌图, 步长对应表 1 中的第 1 列步数。由于不同原子间相互作用势下有的沉淀形貌是相同的, 故归为 3 类, 分别为图 1a, 1b 和 1c 所示。图 1a 为 Ni-Al 原子间相互作用势不变和第 1 近邻减少 10 meV 时的沉淀形貌图, 可以看出 $L1_2$ 结构最多同时伴有少量 $L1_0$ 结构; 图 1b 为原子间相互作用势第 1、3 近邻增加 10 meV, 第 2 近邻增加或减小, 第 4 近邻减少 10 meV 时的沉淀形貌图, 大部分都是 $L1_0$ 结构同时伴有少量 $L1_2$ 结构; 图 1c 为第 3 近邻减少 10 meV 和第 4 近邻增大 10 meV, 可以看出图中几乎全为 $L1_0$ 结构。由此可见 Ni-Al 原子间相互作用势的改变对沉淀早期是否析出析出相以及析出析出相的数量均有极大影响。图 1d, 1e 和 1f 为图 1a, 1b 和 1c 对应原子间相互作用势下在 10000 步时的沉淀形貌图。图 1d 中大部分是 $L1_2$ 结构, 在 $L1_2$ 结构界面间明显存在延连的 DO_{22} 结构 (图中红色部分); 图 1e 中 $L1_2$ 结构间有极少量 DO_{22} 结构; 而图 1f 中却全部为 $L1_2$ 结构, 没发现有 DO_{22} 结构析出。由此可见, 原子间相互作用势影响沉淀早期析出相 $L1_0$ 结构的沉淀进程, 同时析出相 $L1_0$ 结构将影响最终相 $L1_2$ 结构和 DO_{22} 结构的析出^[3,19], 从而影响最终沉淀形貌和合金的性能, 可见原子间相互作用势的研究可为合金的设计提供重要参考依据。

表 1 不同 Ni-Al 原子间相互作用势下析出相 $L1_0$ 转变过程的时间步长

Table 1 Time step of transition process of the pre-precipitated phase $L1_0$ under different interatomic potentials

Interatomic potentials	$L1_0$ appearing time	Total time from $L1_0$ to $L1_2$	$L1_0$ disappearing time
Unchanged	1000	1500	2500
First-nearest neighbor -10 meV	1500	1800	3300
First-nearest neighbor +10 meV	800	1600	2400
Second-nearest neighbor-10 meV	900	1400	2300
Second-nearest neighbor+10 meV	900	1500	2400
Third-nearest neighbor-10 meV	900	2600	3500
Third-nearest neighbor+10 meV	800	1100	1900
Fourth-nearest neighbor-10 meV	800	1100	1900
Fourth-nearest neighbor+10 meV	1100	3400	4500

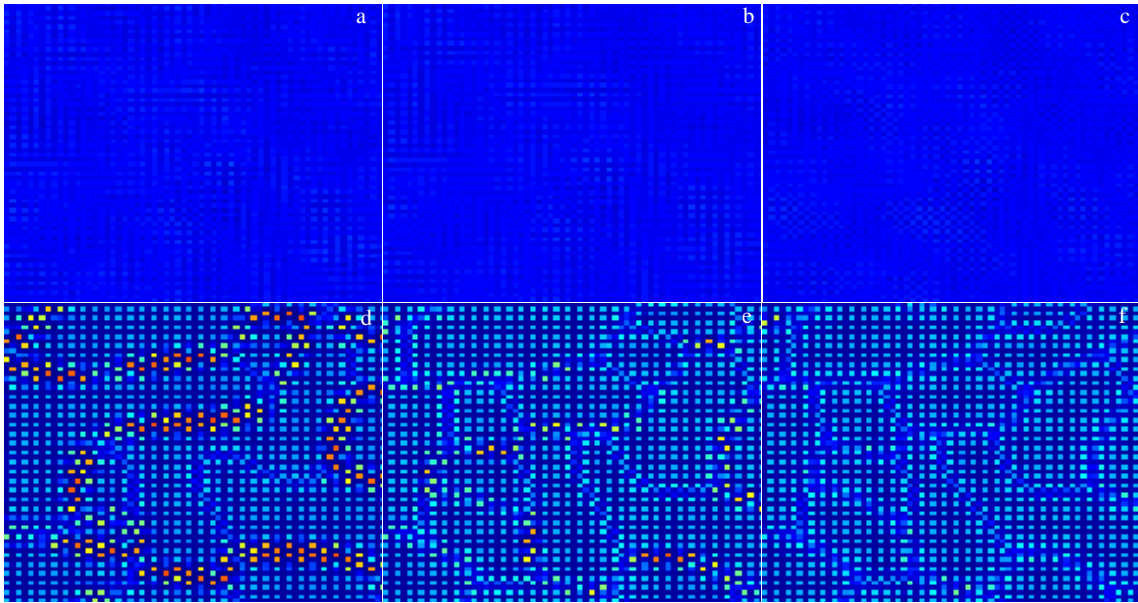


图 1 $\text{Ni}_{75}\text{Al}_{14}\text{Cr}_{11}$ 合金温度为 800 K 时沉淀形貌图

Fig.1 Precipitation morphology of $\text{Ni}_{75}\text{Al}_{14}\text{Cr}_{11}$ alloy at 800 K: (a) unchanged and first-nearest neighbor -10 meV; (b) first-nearest neighbor +10 meV, second-nearest neighbor+10 meV, second-nearest neighbor+10 meV, third-nearest neighbor+10 meV and fourth-nearest neighbor-10 meV; (c) third-nearest neighbor-10 meV and fourth-nearest neighbor+10 meV; (d~f) the precipitation morphologies of 10 000 steps corresponding to (a~c) situations, respectively

为了进一步研究 Ni-Al 原子间相互作用势对 $\text{Ni}_{75}\text{Al}_{14}\text{Cr}_{11}$ 合金沉淀早期的影响, 得到预析出相 L1_0 结构和平衡相 L1_2 结构的体积分数随 Ni-Al 原子间相互作用势的变化曲线如图 2 和图 3 所示。图 2 分别是受不同近邻 Ni-Al 原子间相互作用势影响下 L1_0 结构的体积分数曲线, 蓝色三角形线表示原子间相互作用势增大时, 黑色正方向形线表示原子间相互作用势减少时, 红色圆圈线表示原子间相互作用势不变时。从图 2a 中可以看出第一近邻原子间相互作用势增大将使预析出相 L1_0 结构提前沉淀 (三角形线比圆圈线先上升) 且预析出相 L1_0 结构体积分数增大 (三角形线高于圆圈线); 而第 1 近邻原子间相互作用势减少对预析出相 L1_0 结构的影响刚好相反 (正方形线)。图 2b 中第 2 近邻原子间相互作用势的改变影响很小。图 2c 和图 2d 中第 3 近邻原子间相互作用势增大或第 4 近邻原子间相互作用势减少都将使预析出相 L1_0 结构沉淀提前但体积分数减少; 反之则反。图 3 分别是受不同近邻 Ni-Al 原子间相互作用势影响下 L1_2 结构的体积分数曲线。从图中可以看出第 1 近邻原子间相互作用势增大将使平衡相 L1_2 结构提前沉淀 (三角形线上升的时间步长比圆圈线少); 而第 1 近邻原子间相互作用势减少时对 L1_2 结构的影响刚好相反。第 2 近邻原子间相互作用势的改变影响很小。第 3 近邻原子间相互

作用势增大或第 4 近邻原子间相互作用势减少都将使 L1_2 结构沉淀提前; 反之则反。比较图 2 和图 3, 可以看出 Ni-Al 原子间相互作用势影响预析出相 L1_0 结构提前沉淀也必然将影响 L1_2 结构提前沉淀, 原子间相互作用势影响预析出相 L1_0 结构滞后也将影响 L1_2 结构滞后, 可见原子间相互作用势的改变影响预析出相, 从而进一步影响最终稳定相的沉淀过程; 平衡相 L1_2 结构比预析出相 L1_0 结构的体积分数明显大 (图 2 体积分数最大 0.42, 图 3 体积分数最大 0.75), 这是因为预析出相是过渡结构, 预析出相出现在沉淀早期且过程很短, 预析出相沉淀时有序度较低; 原子间相互作用势对最终平衡相 L1_2 结构的体积分数有影响但是影响较小 (图 3 体积分数曲线最终相差不大)。

以上研究表明, Ni-Al 原子间相互作用势不仅对预析出相沉淀过程、体积分数和最终相有影响, 而且对整个有序化过程均有影响。图 4 是 $\text{Ni}_{75}\text{Al}_{14}\text{Cr}_{11}$ 合金的平均长程序参数和平均成分偏离序参数随不同近邻 Ni-Al 原子间相互作用势的变化曲线。平均长程序参数反映合金整体有序化的程度, 平均成分偏离序参数反映合金整体溶质原子簇聚的程度。从图中可以看出平均长程序参数和平均成分偏离序参数受不同原子间相互作用势影响不同, 但总趋势一致, 如第 4 近邻增加时, 平均长程序参数和平均成分偏离序参数均滞后

且减少（圆圈玫红线），说明合金有序化程度和原子簇聚程度均降低。反之第 4 近邻 Ni-Al 原子间相互作用势减少时，有序化程度和原子簇聚程度均提高（五边形线）。同时比较图中不同近邻原子间相互作用势对有

序度的影响，可以看出第 3 近邻和第 4 近邻 Ni-Al 原子间相互作用势的影响较大，其中第 4 近邻影响最大，下文以第 4 近邻 Ni-Al 原子间相互作用势来研究合金沉淀过程中沉淀机制是否随原子间相互作用势发生变化。

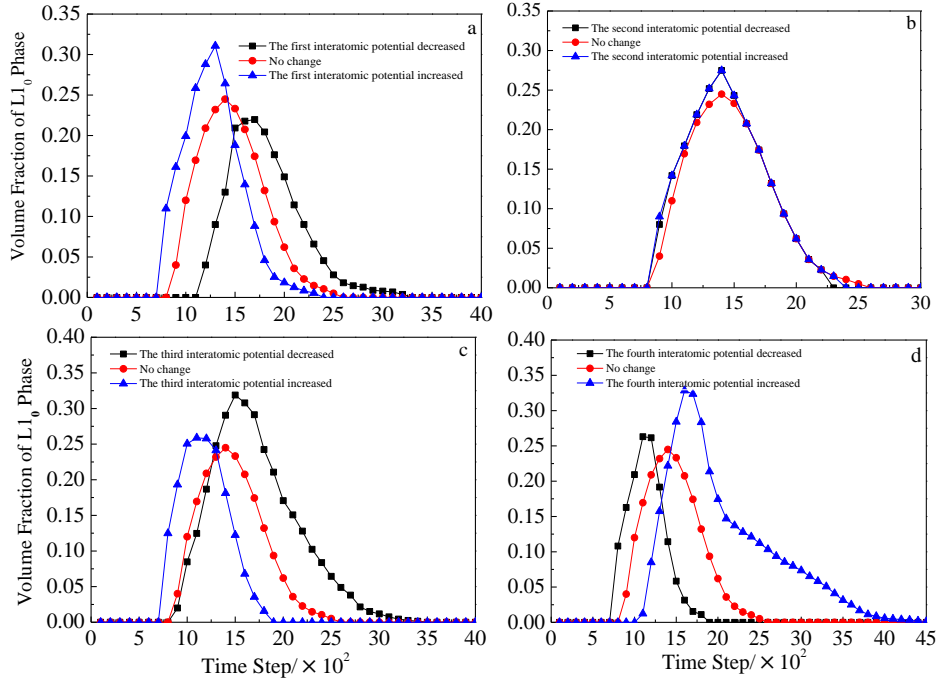


图 2 预析出相 L₁₀ 体积分数随 Ni-Al 原子间相互作用势的变化曲线

Fig.2 Curves of the volume fraction of the pre-precipitated phase L₁₀ with the interatomic potential between Ni-Al atoms: (a) first-nearest neighbor, (b) second-nearest neighbor, (c) third-nearest neighbor, and (d) fourth-nearest neighbor

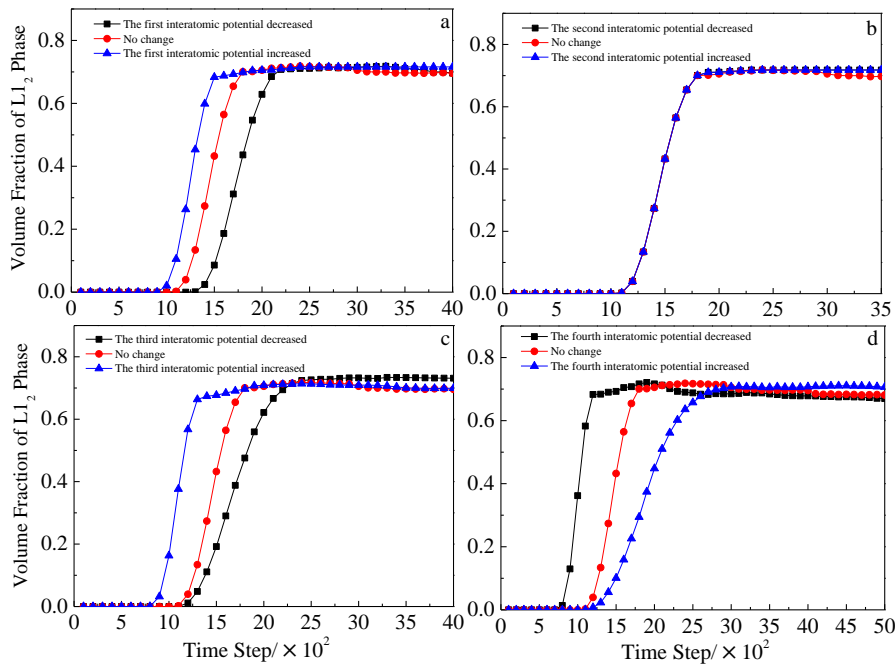


图 3 稳定相 L₁₂ 体积分数随 Ni-Al 原子间相互作用势的变化曲线

Fig.3 Curves of the volume fraction of the pre-precipitated phase L₁₂ with the interatomic potential between Ni-Al atoms: (a) first-nearest neighbor, (b) second-nearest neighbor, (c) third-nearest neighbor, and (d) fourth-nearest neighbor

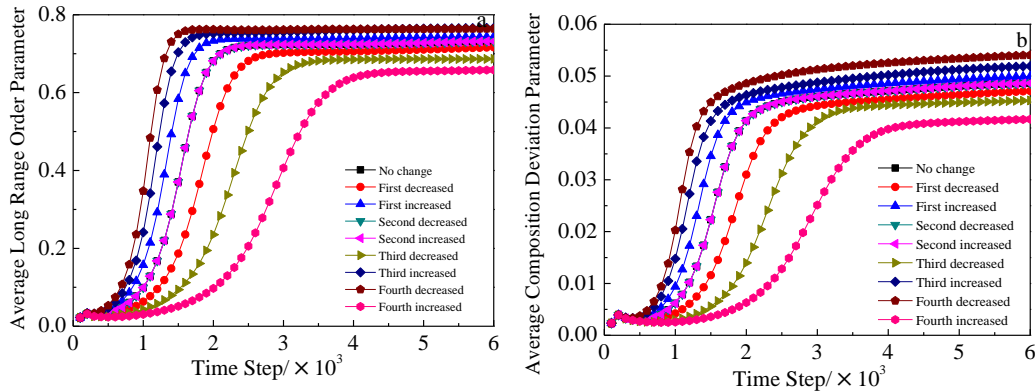


图 4 平均序参数随原子间相互作用势的变化曲线

Fig.4 Curves of average order parameters with interatomic potential: (a) average long range order parameter and (b) average composition deviation order parameter

图 5 为第 4 近邻 Ni-Al 原子间相互作用势不同时的沉淀过程。图 5a、5d 和 5g 为第 4 近邻 Ni-Al 原子间相互作用势减少时,图 5b、5e 和 5h 为第 4 近邻 Ni-Al 原子间相互作用势不变时,图 5c、5f 和 5i 为第 4 近邻 Ni-Al 原子间相互作用势增大时,第 1 行、第 2 行、第 3 行时间步长分别为 1000、1500、10000。圆圈标示处为用于对比研究沉淀形核机制处。从图中可以得到不同第 4 近邻 Ni-Al 原子间相互作用势下,合金的沉淀过程均为从无序开始,逐渐得到预析出相 L₁₀ 结构和 L₁₂ 结构,后全部转变为平衡相 L₁₂ 结构,最终有第二相 DO₂₂ 结构在相间析出。从图中第 1 行和第 2 行可以看出,第 4 近邻原子间相互作用势越大,沉淀早期预析出相出现越晚。从图 5h 可以得到当第 4 近邻 Ni-Al 原子间相互作用势不变时,平衡相 L₁₂ 结构相间析出很多第二相 DO₂₂ 结构(红色),而第 4 近邻 Ni-Al 原子间相互作用势变化时,DO₂₂ 结构明显减少,尤其是当原子间相互作用势增大时,几乎无第二相 DO₂₂ 结构析出。综上,不同第 4 近邻 Ni-Al 原子间相互作用势对沉淀序列无影响;而原子间相互作用势的改变将影响沉淀形貌和相的最终体积分数。

为了进一步研究第 4 近邻 Ni-Al 原子间相互作用势的变化对沉淀过程的影响,用图 5 中不同原子间相互作用势下圆圈标示相同位置的 L₁₂ 结构内 Al 原子长程序参数和成分序参数对比研究沉淀机制的变化情况,得到图 6 的序参数曲线,为更清晰表达曲线变化做局部放大,不同曲线的时间步长分别为 1000, 1500, 2000, 2500, 3000, 5000 和 10000。其中图 6a, 6d 为第 4 近邻-10 meV;图 6b, 6e 不变;图 6c, 6f 第 4 近邻+10 meV。当第 4 近邻原子间相互作用势

-10 meV 时,图 6a 中时间步长为 1000 时,已经出现很大的起伏,到 1500 已基本达到平衡值 1(其他时间步数长程序参数几乎和 1500 重叠如局部放大图);图 6d 中浓度曲线是小起伏,整个沉淀相内浓度一起慢慢增大,直到 5000 之后才达到平衡值。可见预析出相开始出现时(1000~1500),浓度变化不大,而此时长程序参数已经接近平衡值,因此该过程属于失稳分解过程,形成的是非化学计量比预析出相。当原子间相互作用势不变时,图 6b 和 6e 中,1000 时有序度很低,1500 开始起伏,2000 之后基本达到平衡值(之后的时间步长基本与 2000 重叠如局部放大图),成分序参数起伏较小。当原子间相互作用势+10 meV 时,图 6c 和 6f 中,1000 时有序度很低,1500 开始起伏,5000 之后才达到平衡值(10000 与 5000 基本重叠),成分序参数起伏较小。综上 3 种不同原子间相互作用势下浓度曲线均只出现小的起伏,即范围较大的有序区域,满足吉布斯第 2 类涨落范围较大、程度较小的特点,所以合金沉淀初期均为失稳分解机制。由此可知原子间相互作用势的变化对沉淀早期沉淀机制影响不大,主要是影响沉淀过程中有序化开始时间和有序化的快慢,影响预析出相 L₁₀ 转变为稳定相 L₁₂ 的进程。

不同原子间相互作用势对合金沉淀过程的影响不同,有的影响沉淀形貌以及组织结构,有的影响沉淀序列,有的影响沉淀快慢等,从而影响合金的性能。可以依据合金元素之间原子间相互作用势不同来对合金进行添加元素合金化,得到不同组织结构的合金,研究不同组织结构合金的性能,实现合金优化设计。

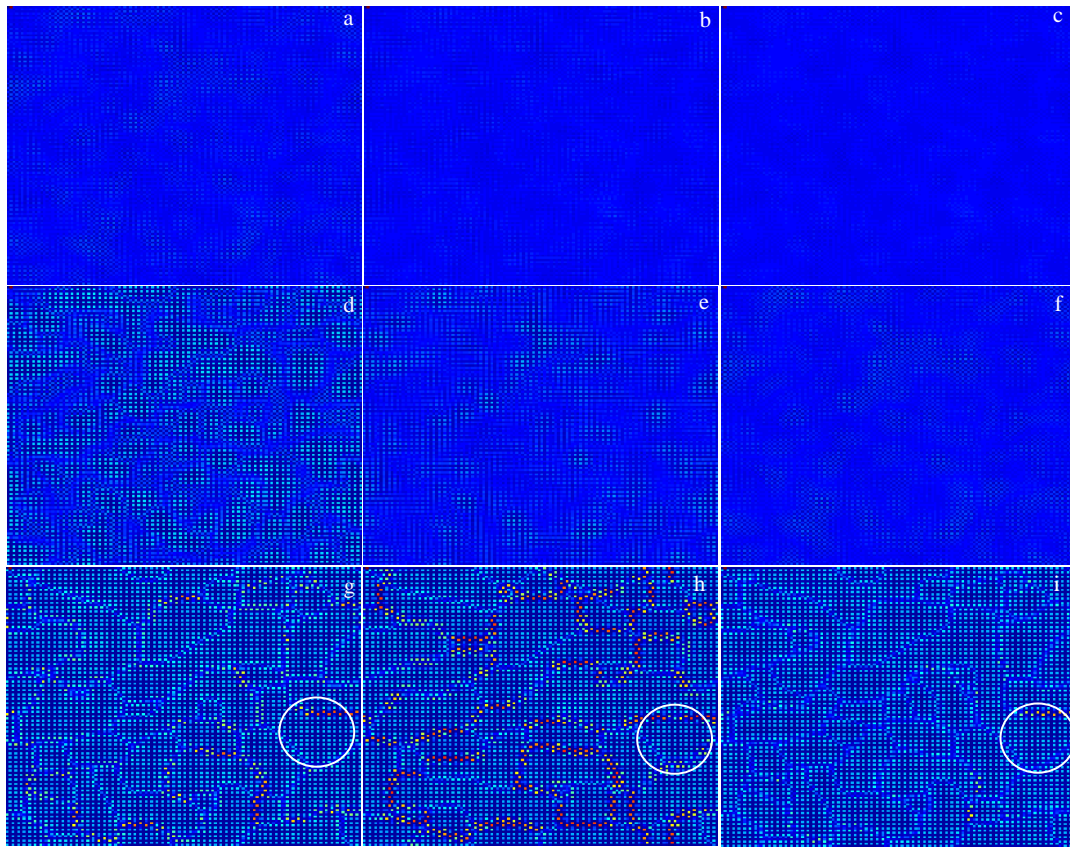


图 5 不同第 4 近邻 Ni-Al 原子间作用势下, $Ni_{75}Al_{14}Cr_{11}$ 合金温度为 800 K 时沉淀形貌图

Fig.5 Precipitation morphology of $Ni_{75}Al_{14}Cr_{11}$ alloy at 800 K with varying the fourth-nearest neighbor of Ni-Al interatomic potential: (a, d, g) the fourth-nearest neighbor -10 meV, (b, e, h) unchanged, (c, f, I) the fourth-nearest neighbor $+10$ meV

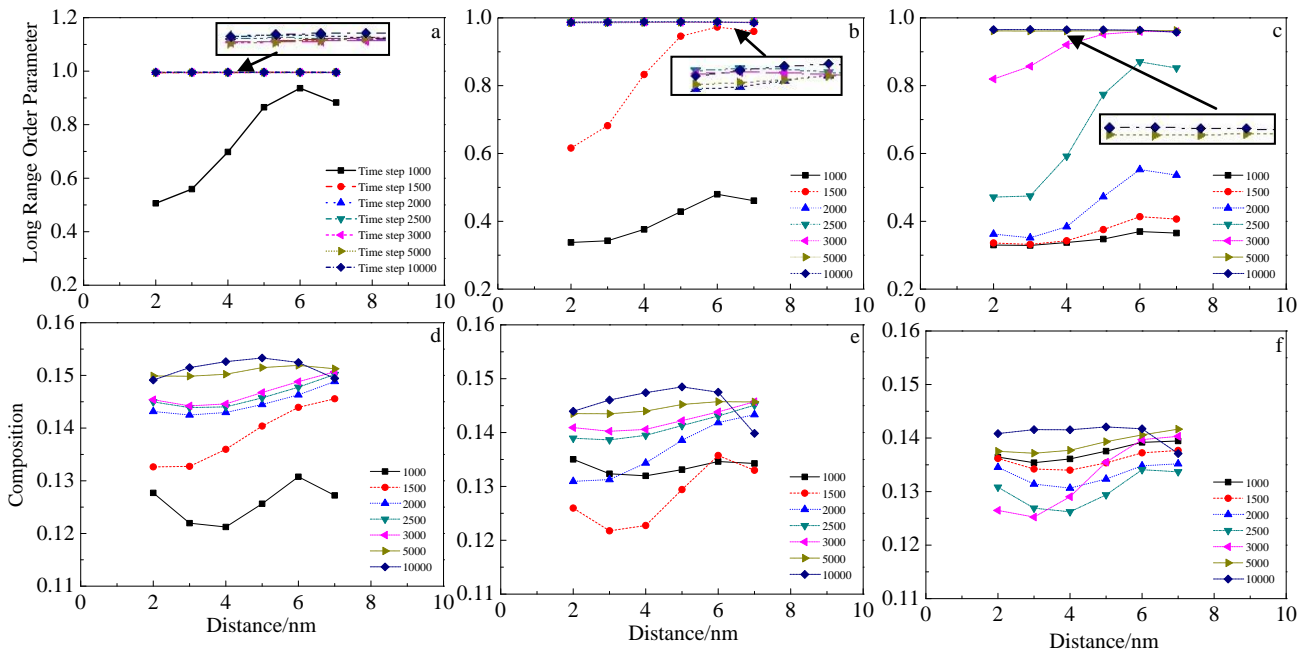


图 6 $L1_2$ 结构内 Al 原子序参数随时间步长的变化曲线

Fig.6 Curves of Al atomic order parameters in $L1_2$ structure with time steps: (a~c) long range order parameter and (d~f) composition order parameter

3 结 论

1) Ni-Al 原子间相互作用势的改变将影响合金沉淀形貌, 预析出相转变进程等。第 2 近邻 Ni-Al 原子间相互作用势改变对沉淀过程几乎没有影响。第 1 近邻 Ni-Al 原子间相互作用势对 L₁₀ 预析出相沉淀过程的影响较小, 当其减小时, 将延缓 L₁₀ 预析出相向 L₁₂ 平衡相的转变。第 3 近邻 Ni-Al 原子间相互作用势减小或第 4 近邻 Ni-Al 原子间相互作用势增大, L₁₀ 预析出相和 L₁₂ 平衡相都会推迟沉淀, 且延缓 L₁₀ 预析出相向 L₁₂ 平衡相转变进程, 反之则反。除第 1 近邻 Ni-Al 原子间相互作用势减小, 其他近邻原子间相互作用势的改变都使最终沉淀形貌改变, 且 L₁₂ 平衡相第 2 相 DO₂₂ 减少。

2) Ni-Al 原子间相互作用势将影响 L₁₀ 预析出相、L₁₂ 平衡相的析出时间和相的体积分数, 且影响原子有序化和簇聚程度。第 2 近邻原子间相互作用势对体积分数影响极小。第 1 近邻原子间相互作用势增大、第 3 个近邻原子间相互作用势减小和第 4 近邻原子间相互作用势增大时, L₁₀ 预析出相体积分数明显增大, 原子有序化和簇聚程度降低; 而第 3 个近邻原子间相互作用势增大和第 4 近邻原子间相互作用势减小时, L₁₀ 预析出相体积分数略微增大, 原子有序化和簇聚程度升高; 第 1 近邻原子间相互作用势减小时, L₁₀ 预析出相体积分数略微减少, 原子有序化和簇聚程度也升高。第 3 个近邻原子间相互作用势减小和第 4 近邻原子间相互作用势增大时, L₁₂ 平衡相体积分数略微增大; 其他近邻变化对 L₁₂ 平衡相体积分数几乎无影响。

3) Ni-Al 原子间相互作用势的改变对沉淀机制和沉淀序列均无影响, 主要影响沉淀有序化起始时间和相的转变速度。

参考文献 References

- [1] Yu Rui, Li Guodong, Guo Xiang *et al.* *Computational Materials Science*[J], 2018, 149: 49
- [2] Mao Zugang, Christopher Booth-Morrison, Sudbrack Chantal K *et al.* *Acta Materialia*[J], 2012, 60: 1871
- [3] Lu Yanli, Lu Guangming, Liu Fang *et al.* *Journal of Alloys and Compounds*[J], 2015, 637: 149
- [4] Yuya Yamamoto, Naoya Sawaguchi, Makoto Sasaki. *Journal of*

Non-Crystalline Solids[J], 2017, 466-467: 29

- [5] Li Rusong(李如松), He Bin(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): 0195
- [6] Ma Shenggui, Kong Xianggang, Li Shichang *et al.* *Materials Chemistry and Physics*[J], 2018, 214: 548
- [7] Yang Hu, Schuler Jennifer D, Timothy J. *Computational Materials Science*[J], 2018, 148: 10
- [8] Dong Weiping, Chen Zheng, Lee Byeong-Joo. *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*[J], 2015, 25: 907
- [9] Manan Dholakia, Sharat Chandra, Jaya S Mathi. *Journal of Alloys and Compounds*[J], 2018, 739: 1037
- [10] Johannes Häzler, Marco Seiz, Michael Kellner *et al.* *Acta Materialia*[J], 2019, 164: 184
- [11] Michael Kellner, Ioannis Sprenger, Philipp Steinmetz *et al.* *Computational Materials Science*[J], 2017, 128: 379
- [12] Yang Min, Zhang Jun, Wei Hua *et al.* *Journal of Alloys and Compounds*[J], 2018, 769: 453
- [13] Kamachali Reza Darvishi, Schwarze Christian, Lin Mingxuan *et al.* *Computational Materials Science*[J], 2018, 155: 541
- [14] Cao Dongjia, Ta Na, Zhang Lijun. *Progress in Natural Science: Materials International*[J], 2017, 27: 678
- [15] Chen Longqing. *Annual Review of Materials Research*[J], 2002, 32: 113
- [16] Dong Weiping(董卫平), Wang Linlin(王琳琳), Wang Xiaoming(王晓明) *et al.* *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2018, 47(1): 201
- [17] 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], 2011, 40(6): 1055
- [18] Chang Xiuli(常秀丽), Wang Yongxin(王永欣), Chen Zheng(陈铮) *et al.* *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2013, 42(6): 1113
- [19] Dong Weiping, Chen Zheng, Wang Yongxin. *Science China: Physics, Mechanics & Astronomy*[J], 2011, 54(5): 821
- [20] Poduri R, Chen L Q. *Acta Materialia*[J], 1998, 46: 3915
- [21] Poduri R, Chen L Q. *Acta Materialia*[J], 1998, 46: 1719

Phase-field Simulation for Influence of Ni-Al Interatomic Potential on L1₀ Pre-precipitation Phase of Ni₇₅Al₁₄Cr₁₁ Alloy

Dong Weiping¹, Wang Bin¹, Gong Ningning¹, 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 influence of Ni-Al interatomic potential from the first-nearest neighbor to the fourth-nearest neighbor on the precipitation process of L1₀ pre-precipitation phase in Ni₇₅Al₁₄Cr₁₁ alloy was investigated by the Microscopic Phase-Field method. Results show that as the third-nearest Ni-Al interatomic potential increases or the fourth-nearest interatomic potential decreases, L1₀ pre-precipitation phase and L1₂ phase appears in advance; besides, the volume fraction of L1₀ pre-precipitated phase decreases while the final volume fraction of L1₂ phase remains almost unchanged. Whereas, L1₀ pre-precipitation phase and L1₂ phase appears later; besides, the volume fraction of both phases increases. Compared with the above two, the first-nearest interatomic potential has the less impact and the second-nearest Ni-Al interatomic potential has the least impact on the precipitation process of L1₀ pre-precipitation phase and L1₂ phase. Further research shows that Ni-Al interatomic potential does not affect the precipitation mechanism of the alloy but will affect the precipitation time, speed, volume fraction and precipitation morphology of L1₀ pre-precipitation phase and L1₂ equilibrium phase, thus affecting the structure and properties of Ni₇₅Al₁₄Cr₁₁ superalloy, which has guiding significance for alloy optimization design.

Key words: phase-field; pre-precipitation phase; Ni₇₅Al₁₄Cr₁₁ alloy; interatomic potential

Corresponding author: Dong Weiping, Ph. D., Associate Professor, College of Engineering, Zhejiang Normal University, Jinhua 321004, P. R. China, E-mail: dwp@zjnu.cn