

微观相场模型及其在合金固态相变中的应用

王 锐, 王永欣, 卫 普, 卢艳丽, 张 静, 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: 材料科学与工程领域中, 相场法是计算材料学的重要分支。相场法在模拟与预测材料微观组织、形貌演化等方面的作用越来越突出。材料微观组织决定其宏观服役性能。商业合金材料性能的改变与控制, 在很大程度上依赖于精细调控固态相变过程以期获得理想的微组织图斑。实验对于合金材料固态相变的分析侧重于结果的观测与讨论, 对于相变动力学过程研究较少。基于微观扩散理论的相场模型在原子尺度上研究合金固态相变过程, 这显著不同于其它的相场模型。本文系统综述了微观相场模型在合金固态相变方面的研究思路及研究成果。在此基础上, 阐述了当前研究的难点, 展望了微观相场在固态相变领域的发展前景, 最后特别指出了微观相场在合金相变方面未来的研究方向。

关键词: 相场法; 合金固态相变; 计算模拟; 合金

中图法分类号: TG111.5

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2019)11-3770-11

现代先进工程材料领域中, 合金材料占有重要地位。对合金材料实施各种各样的加工、处理及设计, 其目的在于通过改变微观组织结构得到能够对抗服役环境的物理性能。固体结构材料微观组织决定其宏观物理性能。材料多种性质在很大程度上依赖于固态相变过程中微观组织(结构、组元)调整: 例如新相的生成、相空间取向及分布、生成相种类、相化学成分波动、有序畴、有序度转变、结构缺陷(空位、反位)变化等。在空间尺度上, 这些结构转变通常从原子尺度到纳米尺度之间; 而在时间尺度上, 微观组织变化通常在极短的时间内发生或完成; 在影响因素上, 这些细微结构变化通常是温度、应力、电、磁、辐照、合金成分等影响因素的动态函数。不考虑时、空限制以及各种影响因素, 材料科学实验中, 只研究单独一个相变过程时, 若完成对材料整个微观组织演化的实时动态全程观察研究不仅需要昂贵的精密仪器, 还需要不菲的经济支出。若进行系统性研究, 则工作量巨大, 几乎难以实现。此外, 工程或实验过程中固态相变分析通常在二维维度内针对相变结果进行分析研究, 较少侧重相变动力学过程研究。

基于合金固态相变过程具有复杂性和非平衡性特点, 材料科学家逐步考虑使用计算机数值模拟作为材料研究手段。例如, 侧重于实时动态追踪材料微观演化过程的分子动力学方法(molecular dynamics)^[1]、蒙特卡罗法(monte carlo)^[2]以及相场法(phase-field, PF)^[3]等; 侧重于材料物理参数静态计算的第一性原理方法(first-principles)^[4]等。

基于扩散界面描述的 PF 法是一种高效研究材料微观组织、结构及其演化的计算模拟工具^[5], 涉及物理、数学、计算机技术、材料等领域。自 Khachaturyan 系统地提出微观扩散方程以来^[6], 研究人员利用微观相场模型(microscopic phase-field, MPF)在合金固态相变方面的研究中付出了较大精力并取得一系列成果。对于这些研究成果, 目前文献尚比较零散, 缺乏系统总结。

本研究在前人工作的基础上, 结合最新的 MPF 研究成果。对 MPF 在合金固态方面的应用进行较为全面的综述和分析。希望能为本领域的学者们提供有价值的参考。

1 PF 模型

1.1 PF 简介

PF 法最先应用于纯金属凝固过程研究(“PF”这一术语最先在纯金属凝固模拟研究时提出^[7])。研究液态金属凝固时, 材料科学家们的最初目的是单纯地追求避免追踪界面结构演化。随着材料学的发展与现代计算机技术的进步, 依据多种相变类型、影响因素, 研究者们不断改进、创建新的 PF 模型, 使得 PF 模型种类逐渐丰富并拓展到多种材料研究领域, 例如, 二元^[8, 9]乃至多元合金的凝固^[10]及其固态相变^[8, 9, 11, 12]、纯金属材料相变^[13]、铁电材料相变^[14]、磁致伸缩材料^[15]、材料缺陷^[16]、材料腐蚀^[17]、电池反应^[18]、无机非金属材料^[19]等材料科学与工程领域。在这些 PF 模型中, 连续相场模型(continuous phase-field, CPF)出现频率

最高(见下文 1.2 部分), 晶体相场 (phase-field crystal, PFC) 为最近出现的模型。

1.2 CPF 模型

CPF 法通过求解非线性 C-H 扩散方程 (Cahn-Hilliard, 公式 1)^[7]与 A-C 弛豫方程(Allen-Cahn, or time-dependent Ginzburg-Landau, 公式 2)^[20]得到的浓度场(c , 保守场)变量与序参数场变量(η , 非保守场)随时间的变化函数。相变过程中非平衡态变化的微观组织结构演化过程通过这两项参数来表征。

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \beta \nabla \frac{\delta \psi}{\delta c} \quad (1)$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = -\alpha \frac{\delta \psi}{\delta \eta} \quad (2)$$

式中, ψ 为体系自由能, c 为浓度, η 为序参数, α 为正系数, β 为与原子或界面迁移相关的系数。

图 1 为 MPF 模拟 Al-Li 合金中 L1₂ 结构 δ' 相析出的原子-介观尺度模拟结果。在介观尺度来看(图 1a, 1b), MPF 与 CPF 模拟结果一致(颗粒密度不同在于研究的温度、合金成分区别)。图 1c 展示了 MPF 在原子尺度的模拟结果, 与 TEM 观察结果(图 1d)保持一致。

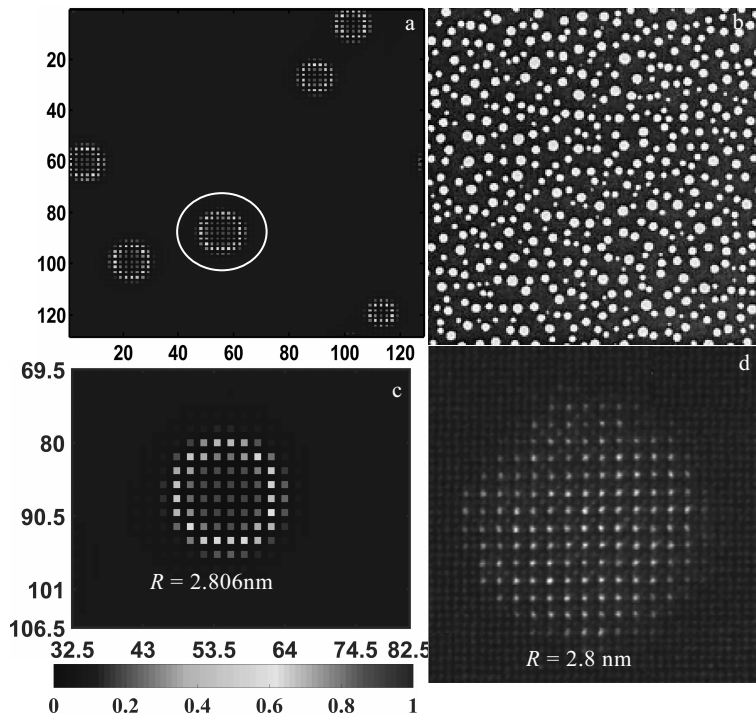


图 1 MPF 法模拟 Al-Li 合金中 Al₃Li 沉淀形貌^[21]、传统 PF 法模拟 Al₃Li 沉淀形貌^[22]、图 1a 中标注沉淀颗粒放大图及单个 L1₂ 沉淀颗粒高角环形暗场 TEM 照片^[23]

Fig.1 L1₂-structural Al₃Li precipitates in Al-Li alloy in the MPF simulation^[21] (a); L1₂ precipitates obtained in traditional PF model^[22] (b); enlarged image of highlighted L1₂ precipitate in Fig.1a (c); high angle annular dark field TEM image of one L1₂ precipitate^[23] (d)

1.3 PFC 模型

微观—介观组织、结构演变研究需要原子层次的分析与解释。迄今为止, 迄今为止, 在材料科学领域的理论研究中, 能够在原子尺度进行合金固态相变分析的 PF 法主要有 MPF 模型与 PFC 2 种。PFC 以原子密度场变化为信息追踪相变过程。

$$\rho = \rho_0 + \sum_G A_G e^{iGx} + c.c. \quad (3)$$

式(1)中, G 为倒易点阵矢量, A_G 为倒易点阵矢量幅度, ρ_0 为固相平均密度, i 为虚数单位, $c.c.$ 表示共轭复数。

式(1)与 MPF 中求解的原子占位函数($\Phi_s(\mathbf{r}, t)$)在傅里叶空间具有类似的表达形式:

$$\Phi(\mathbf{r}) = \Phi_0 + \sum_j Q(k_j) e^{ik_j r} \quad (4)$$

式中, Φ_0 为合金初始浓度, $Q(k_j)$ 为傅里叶系数, k_j 表示波矢, \mathbf{r} 代表格点位置。

PFC 可以灵活的模拟相变前后具有不同晶体结构的微观演化过程, 可以方便的引入位错, 空位, 外场等影响因素。但是, PFC 不能很好的将合金的真实物理参数作为输入单位。因此, 其在实际合金的模拟研

究中局限较大。最近, Fallah 首次将晶体 PF 模型应用于 Al-Cu 合金^[24]、Al-Cu-Mg 合金^[25]、Al-Mg-Si 合金^[11, 12]的早期相变过程, 这大大改变了晶体 PF 以模型合金为研究对象的现状。MPF 虽然以实际合金为研究对象, 但依然可以像晶体 PF 一样进行处理模型合金的计算与模拟^[26], 以模型合金为研究对象时需要选择合适的原子间相互作用势即可。

1.4 MPF 模型

Khachaturyan 创立微观晶格扩散理论并构建 MPF 动力学方程^[6], 该方程实际为 C-H 方程的离散格点形式(MPF 与 CPF 之间关联可参考文献[27, 28])。MPF 在空间尺度上以离散的刚性晶格格点为基本研究单位, 以不同元素(S)在所有单晶格格点占位几率($\Phi_S(\mathbf{r}, t)$)为研究对象, 且所求元素占位几率为时间的函数。因此, 在原子尺度上来讲, 相变过程中形成的晶体结构(例如, 过渡结构、亚稳相、平衡相、界面原子分布)通过相邻配位格点上不同元素的占位几率变化来描述; 而在介观尺度上来讲, 相变过程中微观组织(结构)形貌变化通过区分不同晶体结构的区域来描述。在 MPF 中, 研究对象的尺寸(Size)由系统计算矩阵(n)与合金的晶胞参数(a, b, c)共同决定。描述原子分布的微观扩散动力学方程为:

$$\frac{d\Phi_s(\mathbf{r}, t)}{dt} = \sum_{\mathbf{r}'} L_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\delta\psi}{\delta(\mathbf{r}', t)} \quad (5)$$

式中, $L_0(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ 为动力学系数矩阵, 下标 S 代表元素种类, ψ 为平均场理论下体系自由能, \mathbf{r} 为原子所在晶格坐标位置, t 为时间。为提高计算效率, 在傅里叶空间使用欧拉方法进行求解:

$$\widehat{\Phi}_s(\mathbf{r}, t + dt) = \widehat{\Phi}_s(\mathbf{r}, t) + \frac{d\widehat{\Phi}_s(\mathbf{r}, t)}{dt} dt \quad (6)$$

符号“ $\widehat{}$ ”表示傅里叶变化。将公式(6)所得结果再次进行傅里叶逆变换即得到不同时间下真实空间原子分布信息:

$$\Phi = \{\Phi_s(n^*, t^*)\} \quad (7)$$

式(7)中, $n^* \in n, t^* = dt/dt$, 且 $0 \leq \Phi_s \leq 1$ 。据此, 材料固态相变过程中的各种现象被统一的包括在集合 Φ 之中。进一步对 Φ 进行数值计算得到一系列相变过程的唯象数值信息。利用这些信息, 不同相变过程, 例如条幅分解、等结构有序化、形核-长大、晶粒粗化、溶质偏聚、界面迁移等, 得以追踪与分析。关于 MPF 方程的具体介绍与详细求解过程可参阅文献[28-31]。

1.5 PF 模型关联: CPF, MPF, PFC

MPF 模型为 C-H 方程原子尺度上的离散格点形式。在 MPF 中, 单格点原子占位函数 $\Phi_s(\mathbf{r}, t)$ 的求解仅在 $\lim_{\mathbf{k} \rightarrow 0} \mathbf{k}$ 附近(\mathbf{k} 为倒易空间波矢)。在此状态下,

由于所求区域空间尺寸极小, $\Phi_s(\mathbf{k})$ 即为 CPF 中宏观浓度(式(1)中 c)傅立叶变换。此外, MPF 参数与 CPF 公式中的唯象参数(例如, β)均存在数学上的一一对应关系^[27, 28]。

CPF 模型通过求解原子密度场(ρ)来描述材料结构演化。原子密度场的最大值即显示为原子占位位置。原子密度场随时间的变化($\partial\rho/\partial t$)依然符合 CPF 中 C-H 方程的表达形式, 即:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = \nabla \cdot \kappa \nabla \frac{\partial\psi}{\partial t} \quad (8)$$

式(8)中, κ 为迁移率。MPF 模型中对于任意格点位置, 存在 $\sum \Phi_s = 1$ 。因此, 可以将 Φ_s 看成是单格点位置原子密度。与 MPF 不同的是, PFC 通过进一步精细划分网格(MPF 中的晶格), 使得 ρ 可以在这种精细网格中有更多的(不同的)空间取向选择, 这种空间取向的集群体现就是生成相的晶体点阵类型。这种处理赋予 PFC 描述多晶体结构转变能力。表 1 给出了 3 种 PF 模型时间、空间尺度对比。

2 MPF 法在合金固态相变中的应用

不同(合金)固态相变现象, 从微观角度上来看, 均属于短程范围内(不同元素)原子的有序化重构; 不同相变现象的区别是原子重构后元素原子配位情况不同, 进而生成不同的相并伴随着不同的相变现象, 例如同素异构转变、沉淀相生成、条幅分解等等。从唯象角度来看, 相变是一个体系自由能(ψ)降低的过程(相变驱动力的本质为热力学弛豫过程中前后体系能量差)。本研究从原子尺度求解 MPF 动力学方程(4), 进而描述 ψ 降低的不同相变过程。

2.1 材料组织形貌演化研究

微观组织及其演化的全面研究对于材料性能分析、性能—结构关联、性能设计具有重要意义。

材料固态相变的特性之一是: 初始阶段, 材料微观结构变化依附于母相。因此早期相变过程中新相普遍与

表 1 不同 PF 模型特征简介

Table 1 A brief listing of three PF models

Model	Ψ evolution	Spatial scale		Temporal scale
		Space span	Atomic or not	
CPF ^[3]	C-H	nm~ μ m	N	Sec.
MPF ^[6]	C-H	nm	Y	Sec.
PFC ^[11]	C-H	nm	Y	10^{-6} Sec.

Note: Ψ -free energy of system; space span-magnitude of size for modeled materials; N-No; Y-Yes; Sec.-second (1/60 of a minute)

母相共格。这些多相共格微观组织有可能产生不同程度的非均匀弹性应变能。弹性应变能的释放驱动微观组织在各方面改变: 形貌、尺寸、新组织的空间取向、分布等。例如, 立方合金调制结构的 MPF 研究表明^[32]: 调幅分解相变线两侧合金虽然以不同机制相变, 但强共格应力促使不同相变机制下微观组织由球状向板条状转变。与此相比, 减小共格应力时, 形貌变化所受影响显著降低。2017 年, 郑晓娟^[33]研究了非均匀弹性应变能对三元合金等温时效过程的影响。郑的研究表明, 增大应变能可以获得两相交替周期性分布的共嵌微观组织。与无应变下两相无规则排布相比, 这种周期性图斑对操控合金性能非常有利。与二维模型相比, 三维模拟更为直观、有效、形象。图 2 给出了三维 MPF 模拟两相微观组织形貌图^[34,35]。图 2a 中 $D0_{22}$ 结构均用绿色表示, 由于 $D0_{22}$ 结构晶胞参数存在 $c > b = a$ 这一特点, 从而导致其沿 c 轴在空间取向上存在 3 种变体。变体方向与材料服役时受力方向的交互作用影响材料使用寿命。二维维度内, PF 只能展示 2 个方向上变体分布情况, 且二维形貌为真实形貌单层切片反映。这限制了研究视野。与二维模拟相比, 三维 MPF 可以将 3 种变体(实际上任意方向变体)完全呈现, 使得研究更加精确、方便。由图 2b~2d 表明, 弹性畸变能的增加促使特定方向上变体体积减少, 甚至消失。这为合金设计时微观组织控制

提供了理论指导。

微观组织形貌还取决于相变发生时选取的热处理工艺。添加 Cr 元素镍基合金的多级时效研究表明^[36]: 二级时效时间延长, 晶粒粗化且异相界面出现溶解; 时效温度升高, γ'' 相回溶而 γ' 相以球状均匀分布于基体中。值得关注的是, Li^[37]与 Zhang^[36]对于沉淀颗粒粗化的研究得出了不同的结论, 其原因在于不同合金化元素的加入使得相变热力学条件改变, 因而沉淀相不一定遵循 LSW 熟化理论。这表明合金元素的选择对微观组织控制尤为重要。合金微观组织筏化可以提高合金使用寿命, CPF 研究筏化现象时, 无法处理外应力下界面的原子尺度行为。Yang 首次将外应力场引入 MPF^[38]。应力-温度耦合场的研究证明, 热处理时施加外应力, 将会产生筏化组织, 筏化类型的改变与外应力施加方向、应力类型密切相关。此外, 本研究将其它金固态中微观组织研究分类于表 2 中, 此处不再一一列举。

2.2 界面研究: 相(畴)界面迁移与界面结构

界面控制对材料性能有重要影响。界面工程不但是材料工程领域中的一个重要分支, 而且是一个重大挑战, 这源于界面的情况很难确切的知道: 例如, 界面处原子配置、合金元素聚集(贫乏)、界面类型、界面缺陷、界面厚度界定等。因此, 当研究材料的宏观性能时, 界面的原子尺度研究不能不被考虑。

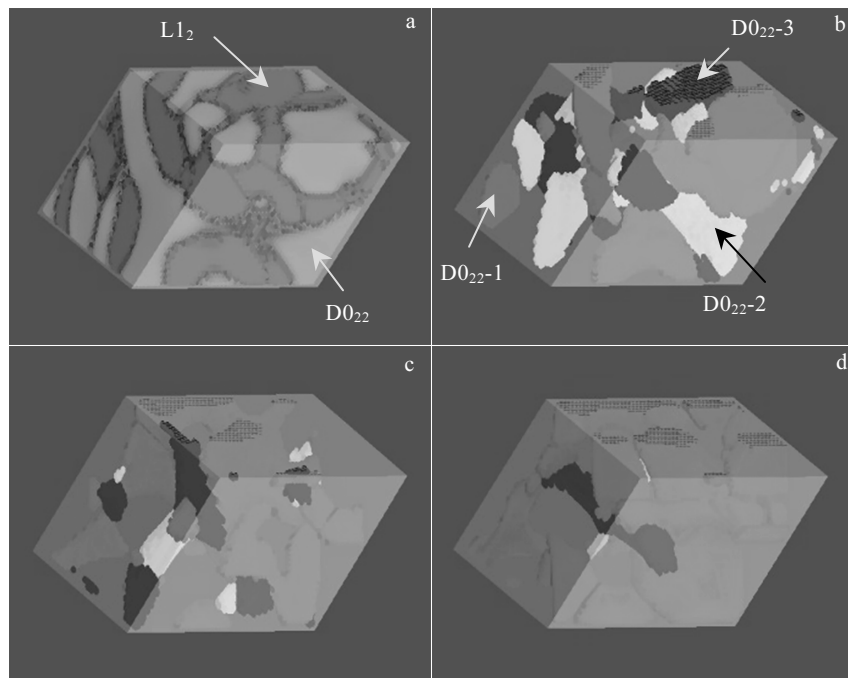


图 2 MPF 模拟 Ni 基合金中 $L1_2+D0_{22}$ 双相沉淀形貌图及 MPF 模拟 $D0_{22}$ 沉淀形貌图^[34,35]

Fig.2 $L1_2+D0_{22}$ precipitates in Ni-based alloy in the MPF simulation^[34] (a); $D0_{22}$ precipitates consisting of oriented variants^[35] (b~d); the coherent strain energy becomes increased from (b) to (d)

Wang^[39]最先将 MPF 用于有序相中纳米反向畴界 (anti-phase domain boundary, APDB) 的湮灭过程研究。Wang 认为热处理温度、浓度对于 APDB 包围面积、半径(R)的动力学消失过程有直接影响。不同温度、浓度下 APDB 面积、 R 各自遵循其变化规律。此外, 研究表明, APDB 在 R 由初始值到 $R=0$ 变化过程中, 虽然 APDB 形貌整体以标准圆形进行等径收缩, 但是 APDB 处溶质原子却表现出强烈的晶体位向依赖特征: 在等径圆形的特定方向出现浓度聚集现象。这种浓度-晶体位向之间的相关性是否存在于实际合金中仍需进一步确认。基于此 MPF 模型, Chen^[40]研究了半导体异相连接材料界面浓度扩散现象。结果表明, 整个弛豫过程中出现的界面处浓度超量源于浓度梯度场与局部自由能场之间竞争导致。

2018 年, Wang^[41]等人利用 MPF 模型研究了 Fe-Al 合金在等成分有序化过程中 APDB 的形成过程。发现 APDB 的形成存在 2 种机理: 一方面源于初始微小反向畴 (antiphase domain, APD) 在长大过程中的相互碰撞接触使得晶格周期排布不能重叠的 APD 之间形成 APDB, 这是 APDB 生成的主要机制; 另一种情况是较大尺寸的 APD 在长大过程中内部出现较小无序区域, 随着体系自由能降低, 无序区域逐渐有序化而形成 APDB, 这种情况较为罕见。在第 2 种机制下形成的 APDB 属于一个封闭 APDB 中包裹一个较小的 APDB。第 1 种形成机制下, APD 的粗化与溶解类似

于 LSW 颗粒粗化。第 2 种机制下细小 APDB 的消失动力学研究较少, 且目前存在的理论研究均将消失过程中 APDB 形貌强制设定为等径圆收缩, 这与实验室观察到的 APDB 后期形状演化符合很好 (见图 3d~3f)。但实际上, APDB 初始形貌为不规则形状 (见图 3a)。可见, 初始阶段的演化并非沿 APDB 各方向上收缩。图 3 展示了 MPF 模拟的单个封闭 APDB 的完整湮灭过程。可见在 APDB 后期 (图 3e) 演化过程中, MPF 与其它理论模型符合很好。

在相界面研究方面, 李永胜^[42, 43]首先利用 MPF 模型研究了 Ni 基合金中的同相有序畴界面与异相界面, 指出同相畴界面与异相界面在生成与演化过程中表现出方向性特征并影响随后的沉淀相析出过程。在此基础上, 为进一步明确相变过程中界面演化, 张明义^[44, 45]系统研究了合金成分、热处理温度、弹性应变能等因素对相变过程中界面类型、界面迁移的影响。理论结果表明, $L1_2$ - $L1_2$ 畴界^[46, 47]、 $D0_{22}$ - $D0_{22}$ 畴界^[48]、 $L1_2$ - $D0_{22}$ 相界^[49, 50]之间存在明确的界面类型。依据迁移特性, 这些界面被划分为可迁移界面与不可迁移界面。张明义等人认为决定界面迁移和界面处原子扩散、偏聚、贫乏的决定性因素为畴(相)界面处原子配位结构。此外, 文献^[51, 52]对于界面处元素偏聚、溶质扩散的研究结果与 MC 法计算结果保持一致^[53]。这些研究表明 MPF 模型不仅可以研究小尺度现象, 而且可以从原子尺度研究解释与此相关的材料界面行为。

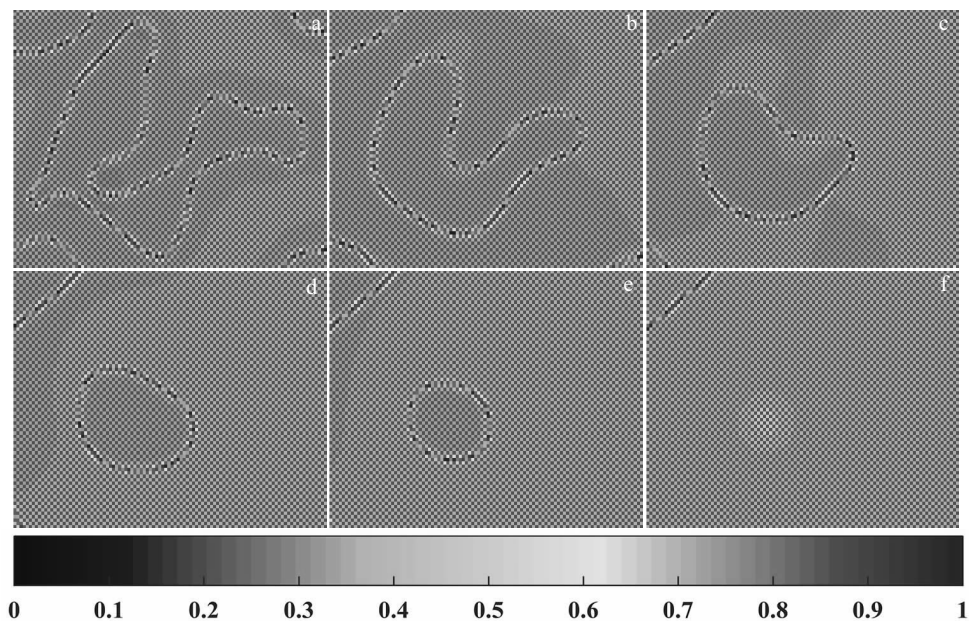


图 3 Fe-45%Al 合金中 B2 型细小 APDB 消失过程的 MPF 模拟

Fig.3 Annihilation behavior of B2-APDB in Fe-45%Al alloy during the aging process: (a) $t=1300$, (b) $t=5300$, (c) $t=10000$, (d) $t=14000$, (e) $t=18000$, and (f) $t=22900$

2.3 原子占位、替位、反位行为研究

合金材料尤其是金属间化合物材料, 其不同种类构成原子之间在理想状态下占据不同的亚晶格位置形成有序结构(相)。由于热力学或动力学因素导致有序晶体内某些组元原子占据其它元素的有序点阵位置形成反位缺陷。其它非有序相构成原子在有序晶体内亦表现出不同的格点占位选择倾向而形成替位缺陷。占(替)位与反位效应影响位错运动、APDB 能量、界面类型。对合金材料的塑形、强度、长程有序产生重要影响。在平均场理论下, MPF 动力学模型可以追踪占(替)位与反位缺陷随温度、外场、浓度、相变的动态变化过程^[54], 这不同于第一性原理从能量角度研究元素占位与反位。

利用 MPF, Zapolsky^[55]研究了 Ni_3Al 中 Al 与 V 含量, 发现在 Ni_3Al 中 2 种元素比值接近 1 而 Ni 元素含量超过 75%。Zapolsky 的结论得到了相关实验结果的证实。这证明 Ni_3Al 中存在明显的反位与替位行为。Zhao^[56]等人利用 MPF 研究了不同浓度下 Fe-Al 合金等结构转变过程中 Fe 反位与 Al 反位的变化^[56]。发现 2 种反位缺陷的变化取决于相变机制, 反位缺陷随时间的函数曲线并非单调的。随着时效的进行, 后期发生的调幅分解将会使等成分有序化下形成的反位缺陷升高, 在 2 种相变机制的临界点处存在极小值。Fe/Al 比值同样影响反位缺陷趋势: 降低 Fe/Al 比值, Fe 反位趋势变小。出现这种变化的原因是由于 Al 原子增多致使更多的格点被 Al 元素占据。Liang^[57]研究了复合 $\text{Ni}_3(\text{Fe}, \text{Al})$ 相中不同亚晶格位置上的原子占位情况。Liang 指出, Fe 元素掺杂减缓了 Ni 在 Al 亚晶格的反位趋势却增加了 Al 在 Ni 亚晶格的反位, 随着 Fe 元素掺杂的增加, 2 种亚晶格位置逐渐呈现出多原子共同占位情形。这与 Liao^[58]在 2016 年的研究结论吻合。Zhang 系统地研究了 Ni_3V ^[54, 59-62]、 Ni_3Al ^[54, 59, 62-64] 2 种金属间化合物相内的原子分布情况。其研究表明, 2 种有序相内原子的替位、反位行为与合金成分、相变温度、应力等因素密切相关。Zhang^[59]指出在所研究的范围内, Ni_3Al 与 Ni_3V 各自拥有不同的反位缺陷类型。温度与合金成分对这些点缺陷的影响主要是通过影响溶质原子在两相的扩散来实现。此外, 有关其它三元、二元合金点缺陷研究亦见于报道, 具体可参阅表 2。

2.4 相变动力学机理研究

不同材料在相变过程中表现出类似的现象, 材料科学家试图建立一种统一且广泛的理论来解释这些相变。通常, 不同的相变机理赋予材料不同的形态和微观结构。相变机理的研究不仅有助于材料科学基础的发展, 对于研发新材料、提升材料加工工艺等也具有

重要理论意义。

Zhao 等^[65]研究了 Fe-24Al 合金中纳米结构的形成过程。Zhao 指出, 合金相变过程中有序化与调幅分解可以共存, 两者交互作用促使合金中出现共格微观组织。共格应变能的增加使相变的动力学过程加速, 进而促使共格组织提前出现。Fe-Mo 合金相变热力学的 MPF 研究表明^[66], 当摩尔比 Fe:Mo=1 时, 调幅分解所需临界温度最高; 而动力学研究则指出, 在此浓度下调幅分解将以最快的速度进行。调幅分解的组织形貌对畸变能敏感, 与 2 种机制共存下相比^[65], 调幅分解下弹性畸变能促使微观组织成孤立条带状沿弹性软方向分布。这种应力对微组织动力学演化的影响还见于二元、三元合金^[67]。

Ustinovshilv^[68]研究了不同成分 $A-B$ 二元合金淬火态母相中 AB 相的析出机理。Ustinovshilv 指出对于 $A-B$ 型固溶体, 调幅分解理论只有在化学计量比等于 1 时才适用。一旦固溶体为非化学计量比成分时, 沉淀相主要以形核长大方式生成。 $A:B \neq 1$ 时, 调幅分解机制只适用于沉淀早期原子团簇。赵荣达^[29]研究了 B2-FeAl 相的析出, 赵指出在相变初期以有序化进行, 随后以调幅分解+有序化机制进行。这与 Ustinovshilv 的理论并不矛盾, 这是因为对非均匀应变能的处理着手点不同: Ustinovshilv 模型中弹性应变能的考虑基于微观弹性理论而赵则选取从宏观均匀弹性立场的微观化着手。此外, 最新的研究结果表明当忽略弹性应变能时^[41], 合金将以等成分有序化完成整个相变过程。这证明弹性应变能的存在将强烈影响到相变机理。Hou^[69]利用 MPF 法研究了早期相变过程中 θ 相形成元素对合金相变的影响, 认为 Ni-Al 稀固溶体中沉淀相并以简单非经典形核方式析出。早期的溶质原子团簇行为使得沉淀初期呈现出调幅分解形貌; 相变后期新、旧两相成分确定, 因而以等成分有序化机制使沉淀相有序度提高。 θ 相形成元素加入时, γ' 依然由混合机制析出。钒元素以较大固溶度存在于 γ' 相中, 后期 θ 相沿 γ' 相晶界析出。因而 θ 相析出机制为等成分有序化+调幅分解 \rightarrow 非经典形核。此外, 热处理工艺^[70]选择、原子间化学相互作用势^[71]对合金相变机理影响的研究也多有涉及。

总之, MPF 在合金固态相变方面应甚广, 设计到相变的各方面。其它有关 MPF 在合金固态相变方面的研究(例如, 过渡相^[62]、有序化与原子簇集^[72]、合金孕育期的影响^[70, 73, 74])限于篇幅不再一一讨论列举。表 2 较为全面的概括了 MPF 在这些固态相变方面的应用(本研究按照研究对象、内容、目的对其进行了分类)。表 2 中相关文献可能会重复在不同领域出现, 这是由

表 2 MPF 模型在合金固态相变中的应用

Table 2 Application of the MPF for solid-state transformation in alloys^[75-109]

Fields	Materials & References
Site occupation and antisite	Al-Li ^[21] , Ni-Al-V ^[30, 61, 62, 64, 75, 76] , Fe-Al ^[56] , Ni-Fe-Al ^[58, 77-79] , Ni-Al-Ti ^[80] , Ni-Al-Mo ^[71, 77, 81] , Ni-Al ^[63] , Ni-Al-Cr ^[82, 83]
Antiphase domain boundary	Fe-Al ^[41] , Mode alloy ^[39] , Ni-Al-V ^[47]
Interface and interfacial migration	Ni-Al-V ^[44, 50-53, 84] , Ni-Al-Mo ^[85]
Spinodal phase separation	Fe-Al ^[56, 65, 86] , Fe-Mo ^[66] Model alloy ^[32]
Precipitation from solid solution	Ni-Al-Mo ^[71, 81, 87] , Ni-Cr-Al ^[34, 88] , Ni-Al-V ^[62, 89, 90] , Ni-Al ^[69, 90, 91] , Ni-Al-Fe ^[58]
Phase separation under external pressure	Ni-Al-V ^[36, 92] , Model alloy ^[32]
Phase separation considering intrinsic stress	Ni-Al-V ^[33, 42, 67] , Ni-Al-Ti ^[80] , Fe-Al ^[86] , Ni-Al-Mo ^[81, 85, 93] , Ni-Al ^[94] , Ni-Al-Cr ^[74, 95] , Fe-Mo ^[66] , Model alloy ^[68]
Coarsening	Ni-Al-V ^[35, 89, 96] , Ni-Al-Cr ^[34, 97, 98]
Grain growth of the single phase in a disordered matrix	Ni-Al-Mo ^[71, 85, 99] , Ni-Al-Ti ^[80] , Ni-Al-Cr ^[94] , Ni-Al ^[100]
Completing growth of two coherent phases	Ni-Cr-Al ^[34, 88, 101] , Ni-Al-V ^[33, 89, 102, 103]
Transient phase	Ni-Cr-Al ^[88, 90] , Ni-Al-V ^[62, 90, 104, 105] , Ni-Al-Mo ^[71, 77, 81, 93, 106] , Ni-Al ^[90] , Ni-Al-Fe ^[107]
Others	Ni-Fe-Al ^[67, 108] , Ni-Al-V ^[109] , Ni-Al-Mo ^[71, 77]

于研究点的交叉重叠导致。这样分类目的是使相关研究人员便捷地检索到其所感兴趣的相关文献。

3 展 望

MPF 作为极具潜力的材料计算模拟工具，成功应用于合金固态相变的许多领域并取得一系列成果。此方法利用单格点原子占位信息实现对组织形貌、微观结构的追踪。不同固态相变过程通过求解形式上等同的微观扩散方程来描述。若要考虑其它相变影响因素，则将这些因素的能量表达式直接引入到微观扩散主方程中的能量函数公式后求解。

经过近十年的发展，国内外研究人员在使用 MPF 进行合金固态相变方面研究做了许多工作。这些工作涉及合金固态相变过程的早期、中期和后期阶段。尽管这些工作取得了大量成果。但是，与其它(相场)理论模型相比，尚存在较大的拓展空间：例如，从模拟维度上来看，当前 MPF 研究侧重二维维度定性研究，三维空间内的相变定性、定量研究均较少涉及；从相

变晶体学上来看，MPF 主要应用于相变前后具有等同晶体结构的合金相变(例如，面心立方、体心立方、三方及有序-无序等)。与 CPF 和 MPF 相比，对于非等同晶体结构相变研究较少；从模拟合金组元来看，主要集中于二元、三元合金。也有部分研究以模型和金为研究对象，虽然模型合金可以使 MPF 像 PFC 模型一样方便的模拟多组元合金，但是模型合金构建的相图为拓扑学上与真实合金类似的相图。这些局限的根源在于：微观扩散方程的扩展推导以明确的伊辛晶格骨架为空间基础，这赋予了 MPF 独一无二的原子尺度模拟特性。但在空间单位的处理上却没有 PFC 灵活。

基于以上考虑，未来 MPF 的应用研究可以在以下几个方面集中进行：(1) 建立 MPF 与其它 PF 的嵌套模型，实现复合 PF 模拟。介观-宏观尺度的相变热力学、动力学现象将在原子尺度进行分析研究。例如，宏观结构演化过程中相间、界面处、相-界面之间的原子流扩散能够通过 MPF 追踪，进而确定不同晶面(点阵)对不同元素扩散的影响。(2) 借助于现代超级计算服务平台，构建微观-介观-宏范围内的三维 MPF 模型。使当前 MPF 从定性模拟为主逐步拓展至定量分析、计算模拟。进行 MPF 二维模拟，材料计算尺度小，耗时长。三维模拟时，个人工作站无法运行。超算平台不仅可以提高计算效率，还可扩展模拟空间维度，获得更佳模拟、预测效果。(3)多种材料加工因素应当耦合入 MPF，例如此外加电场、磁场等，从而为材料加工工艺的优化、设计提供更丰富的理论指导。微观结构缺陷(如位错、APDB、空位等)、结构缺陷之间、以及缺陷与组织之间的相互作用也应当考虑在 MPF 模型内。赋予 MPF 更多的预测材料加工时微结构演化能力。(4)依托当前第一性原理计算、相图计算、材料基因工程、晶体学数据库获得 MPF 基本输入参数。与此同时，建立不同晶系之间的相变微观扩散方程，从而实现包含多组元、多晶系的合金相变的微观尺度仿真模拟、预测。

参考文献 References

[1] Gu Y, Chen L, Heo T W *et al. Scripta Materialia*[J], 2013, 68(7): 451
 [2] Qin L, Redermeier A, Dellago C *et al. Acta Materialia*[J], 2018, 159: 429
 [3] Liu L, Chen Z, Wang Y *et al. Journal of Alloys and Compounds*[J], 2017, 703: 321
 [4] Garg P, Adlakhia I, Solanki K N. *Acta Materialia*[J], 2018, 153: 327
 [5] Heo T W, Zhang L, Du Q *et al. Scripta Materialia*[J], 2010, 63(1): 8

- [6] Khachaturyan A G. *Theory of Structural Transformations in Solids*[M]. New York: Wiley, 1983
- [7] Chen L Q. *Annual Review of Materials Research*[J], 2002, 32(1): 113
- [8] Wu X, Li Y, Huang M *et al. Materials Chemistry and Physics*[J], 2016, 182: 125
- [9] Alster E, Elder K R, Hoyt J J *et al. Phys Rev E*[J], 2017, 95(2-1): 22 105
- [10] Galenko P K, Reutzler S, Herlach D M *et al. Acta Materialia*[J], 2009, 57(20): 6166
- [11] Fallah V, Langelier B, Ofori-Opoku N *et al. Acta Materialia*[J], 2016, 103: 290
- [12] Fallah V, Korinek A, Ofori-Opoku N *et al. Acta Materialia*[J], 2015, 82: 457
- [13] Sheng G, Bhattacharyya S, Zhang H *et al. Materials Science and Engineering A*[J], 2012, 554: 67
- [14] Xue A F, Wang J J, Sheng G *et al. Acta Materialia*[J], 2013, 61: 2909
- [15] Zhang J X, Chen L Q. *Acta Materialia*[J], 2005, 53(9): 2845
- [16] Hu S Y, Li Y L, Zheng Y X *et al. International Journal of Plasticity*[J], 2004, 20(3): 403
- [17] Ansari T Q, Xiao Z, Hu S *et al. NPJ Computational Materials*[J], 2018, 4(1): 1
- [18] Liang L, Qi Y, Xue F *et al. Physical Review E*[J], 2012, 86(5): 051 609
- [19] Mamivand M, Asle Zaeem M, El Kadiri H *et al. Acta Materialia*[J], 2013, 61(14): 5223
- [20] Cahn J W. *Acta Metallurgica*[J], 1961, 9(9): 795
- [21] Zhang Jianjun(张建军), Zhang Dongbo(张东博), Xue Zhin(薛志勇) *et al. Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2016, 45(5): 122
- [22] Vaithyanathan V, Chen L Q. *Scripta Materialia*[J], 2000, 42(10): 967
- [23] Lefebvre W, Masquelier N, Houard J *et al. Scripta Materialia*[J], 2014, 70: 43
- [24] Fallah V, Korinek A, Ofori-Opoku N *et al. Acta Materialia*[J], 2013, 61(17): 6372
- [25] Fallah V, Ofori-Opoku N, Stolle J *et al. Acta Materialia*[J], 2013, 61(10): 3653
- [26] Chen L, Wang Y, Khachaturyan A G. *Philosophical Magazine Letters*[J], 1991, 64(5): 241
- [27] Poduri R, Chen L Q. *Acta Materialia*[J], 1998, 46(11): 3915
- [28] Zhao Yuhong(赵宇宏). *Atomic-Scale Computer Simulation for Alloy during Early Precipitation Process*(合金早期沉淀过程的原子尺度计算机模拟)[D]. Xi'an: Northwestern Polytechnical University, 2003
- [29] Zhao Rongda(赵荣达). *Spinodal Decomposition and Ordering Coexist Phase Transformation Kinetic and Microscopic Mechanism Investigation of Binary Alloy*(二元合金调幅分解与有序化共存相变动力学和微观机制研究)[D]. Xi'an: Northwestern Polytechnical University, 2012
- [30] Zhang Jing(张静). *The Study on the Temporal Evolution of Antisite Defect for Ni₃(Al, V) Intermetallic Compounds Using Microscopic Phase Field Model*(微观相场研究 Ni₃(Al, V)金属间化合物的反位缺陷演化)[D]. Xi'an: Northwestern Polytechnical University, 2011
- [31] Yang Kun(杨坤). *Microscopic Phase Field Study on Orientation Selection during Precipitation Process in Ni₇₅Al_xV_{25-x} Alloy*(Ni₇₅Al_xV_{25-x}合金沉淀过程中生长取向选择的微观相场研究)[D]. Xi'an: Northwestern Polytechnical University, 2013
- [32] Wang Y, Chen L, Khachaturyan A G. *Scripta Metallurgica et Materialia*[J], 1991, 25(8): 1969
- [33] Zheng Xiaojuan(郑晓娟), Zhao Yuhong(赵宇宏), Hou Hua(侯华) *et al. The Chinese Journal of Nonferrous Metals*(中国有色金属学报)[J], 2017(10): 2098
- [34] 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, 11(11): 1960
- [35] Zhuang Houchuan(庄厚川). *Phase-field Study on Phase Variant Selection and Dual Multi-phase Microstructure of Ni₇₅Al_xV_{25-x} Alloy*(Ni₇₅Al_xV_{25-x}合金相位选择、双级复相组织的相场研究)[D]. Xi'an: Northwestern Polytechnical University, 2012
- [36] Zhang J X, Chen Z, Lai Q B *et al. Chinese Journal of Aeronautics*[J], 2009, 22(5): 551
- [37] Li Y S, Chen Z, Lu Y L *et al. Chinese Physics*[J], 2007, 16(3): 854
- [38] Yang K, Zhang M Y, Chen Z *et al. Computational Materials Science*[J], 2012, 62: 160
- [39] Wang Q, Chen L Q. *Acta Materialia*[J], 1999, 47(13): 3695
- [40] Chen L, Wang Q. *Scripta Materialia*[J], 1998, 39(8): 1113
- [41] Wang K, Wang Y X, Cheng Y F. *Materials Research-Ibero-american Journal of Materials*[J], 2018, 21(5): e20 171 048
- [42] Li Yongsheng(李永胜). *Microscopic Phase-Field Simulation of Effect of Temperature on the Precipitation Process of Ni₇₅Al_xV_{25-x} Alloy*(温度对 Ni₇₅Al_xV_{25-x}合金沉淀过程影响的微观相场模拟)[D]. Xi'an: Northwestern Polytechnical University, 2006

- [43] Li Yongsheng(李永胜), 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], 2006, 35(2): 200
- [44] Zang M Y, Wang Y X, Chen Z *et al. Rare Metal Materials and Engineering*[J], 2010, 39(7): 1147
- [45] Zhang Mingyi(张明义). *Microscopic Phase Field Simulation of Evolution of Ordered Domain Interfaces in Ni₇₅Al_xV_{25-x} Alloys*(Ni₇₅Al_xV_{25-x} 合金中有序畴界演化的微观相场模拟)[D]. Xi'an: Northwestern Polytechnical University, 2011
- [46] Zhang Mingyi(张明义), Wang Yongxin(王永欣), Chen Zheng(陈 铮) *et al. Acta Metallurgica Sinica*(金属学报)[J], 2007, 43(10): 1101
- [47] Zhang M Y, Yang K, Chen Z *et al. Science China Technological Sciences*[J], 2011, 54(12): 3409
- [48] Zhang Mingyi(张明义), 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], 2009, 38(6): 962
- [49] Zhang Mingyi(张明义), Chen Zheng(陈 铮), Wang Yongxin(王永欣) *et al. Acta Metallurgica Sinica*(金属学报)[J], 2009, 45(8): 930
- [50] Zhang M Y, Chen Z, Wang Y X *et al. Journal of Wuhan University of Technology-Mater, Sci Ed*[J], 2010, 25(5): 814
- [51] Zhang Mingyi(张明义), Yang Kun(杨 坤), Chen Zheng(陈 铮) *et al. Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2013, 42(6): 1194
- [52] Zhang Mingyi(张明义), Yang Kun(杨 坤), Chen Zheng(陈 铮) *et al. Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2012, 41(8): 1376
- [53] Dong W, Wang L, Chen Z. *Journal of Phase Equilibria and Diffusion*[J], 2017, 38(2): 102
- [54] Zhang Jing(张 静), Chen Zheng(陈 铮), Zhang Lipeng(张利鹏) *et al. Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2009, 38(3): 416
- [55] Zapolsky H, Pareige C, Marteau L *et al. Calphad*[J], 2001, 25(1): 125
- [56] Zhao R, Zhu J, Liu Y *et al. Journal of Materials Science*[J], 2012, 47(7): 3376
- [57] Liang M J, Chen Z, Wang Y X *et al. Materials Letters*[J], 2008, 62(28): 4332
- [58] Liao H H, Liang M J, Bai P K. *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*[J], 2016, 26(4): 1073
- [59] Zhang J, Chen Z, Zhang M Y *et al. Science in China Series G: Physics, Mechanics and Astronomy*[J], 2009, 52(8): 1154
- [60] Zhang J, Chen Z, Wang Y X *et al. Physica B: Condensed Matter*[J], 2010, 405(1): 140
- [61] Zhang J, Chen Z, Zhuang H *et al. Chinese Physics Letters*[J], 2012, 29(2): 26 103
- [62] Zhang J, Chen Z, Wang Y X *et al. Superlattices and Microstructures*[J], 2013, 64: 251
- [63] Zhang J, Chen Z, Lu Y L *et al. Science China Physics, Mechanics and Astronomy*[J], 2010, 53(11): 2047
- [64] Zhang J, Chen Z, Du X J *et al. Superlattices and Microstructures*[J], 2012, 52(4): 834
- [65] Zhao R, Zhu J, Lai Z *et al. Journal of Shanghai Jiaotong University (Science)*[J], 2012, 17(4): 461
- [66] J C Zhu, R D Zhao, Z H Lai *et al. Journal of Wuhan University of Technology-Mater*[J], 2009, 24(S1): 9
- [67] Li Y S, Chen Z, Lu Y L *et al. Materials Letters*[J], 2007, 61(4-5): 974
- [68] Ustinovshikov Y, Koretsky V. *Computational Materials Science*[J], 1998, 11(1): 74
- [69] Hou H, Zhao Y H, Zhao Y H. *Materials Science and Engineering A*[J], 2009, 499(1-2): 204
- [70] Zhang Jixiang(张济祥), 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], 2008, 37(2): 210
- [71] Ma Q, Jin Y, Zhao Y *et al. Acta Metallurgica Sinica*[J], 2016, 29(10): 975
- [72] Miao Shufang(苗树芳), 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], 2009, 38(9): 1562
- [73] Xu Cong(徐 聪), 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], 2009, 38(11): 1935
- [74] Lu Y, Chen Z, Wang Y X *et al. Computational Materials Science*[J], 2011, 50(6): 1925
- [75] Liu Fang(刘 芳), 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], 2012, 41(6): 973
- [76] Zhang M Y, Li Z G, Zhang J L *et al. Transactions of Nonferrous Metals Society of China*[J], 2015, 25(5): 1599
- [77] Ma Q, Ma Z, Zhao Y *et al. Science of Advanced Materials*[J], 2018, 10(6): 904
- [78] Guo Shu(郭 舒), 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(1): 52
- [79] Liang M J, Liao H H, Ding W J *et al. Transactions of Nonferrous Metals Society of China*[J], 2010, 20(10): 1963
- [80] Wang Xinran(王新然). *Microscopic Phase-field Simulation of Precipitation Process for Ni-Al-Ti Alloy*(Ni-Al-Ti 合金沉

- 淀过程的微观相场研究)[D]. Taiyuan: North University of China, 2015
- [81] Ma Qingshuang(马庆爽). *Precipitation Process of Nickel Base Alloy and the Interatomic Potential Calculation by Microscopic Phase-field Simulation*(镍基合金沉淀过程及原子间相互作用势的微观相场理论研究)[D]. Taiyuan: North University of China, 2016
- [82] Chu Zhong(褚 忠), Zhao Guoqun(赵国群), Chen Zheng(陈 铮). *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2012, 41(11): 2021
- [83] Chu Zhong(褚 忠), Wang Jin(王 进), Chen Zheng(陈 铮). *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2011, 40(2): 259
- [84] Li Y S, Chen Z, Lu Y L *et al.* *Trans Nonferrous Met Soc China*[J], 2006, 16: 91
- [85] Yang Dongran(杨东然). *Microscopic Phase-field Simulation of Precipitation Process and Atomic Site Occupation for Ni₇₅Al₁₄Mo₁₁ Alloy*(Ni₇₅Al₁₄Mo₁₁ 合金沉淀过程及原子占位的微观相场研究)[D]. Taiyuan: North University of China, 2014
- [86] Zhao Rongda(赵荣达), Zhu Jingchuan(朱景川), Lai Zhonghong(来忠红) *et al.* *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2012, 41(S2): 206
- [87] Liang J J, Li R Q, Zhao Y H. *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*[J], 2015, 25(7): 2361
- [88] Lu Y L, Chen Z, Li X *et al.* *Computational Materials Science*[J], 2015, 99: 247
- [89] Yang K, Chen Z, Wang Y *et al.* *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*[J], 2013, 23(1): 193
- [90] Lu Y, Lu G, Liu F *et al.* *Journal of Alloys and Compounds*[J], 2015, 637: 149
- [91] Wu Lin(伍 林), 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(9): 1568
- [92] Yang Kun(杨 坤), Ji Nan(吉 楠), Sha Ting(沙 婷) *et al.* *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2017, 46(7): 1869
- [93] Wang Kun(王 锐), Zhao Yuhong(赵宇宏), Yang Dongran(杨东然) *et al.* *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2015, 44(4): 939
- [94] Lu Yanli(卢艳丽). *Microscopic Phase-field Simulation Coupled with Strain Energy for the Precipitation Process of Nickel Base Alloys*(镍基合金沉淀过程的含畸变能微观相场模拟)[D]. Xi'an: Northwestern Polytechnical University, 2006
- [95] Y L Lu, Z Chen, Y S Li *et al.* *Trans Nonferrous Met Soc China*[J], 2007, 17: 64
- [96] Li Y S, Chen Z, Lu Y L *et al.* *Journal of Materials Research*[J], 2007, 22(1): 61
- [97] Lu Y L, Chen Z, Zhang J. *J Cent South Univ Technol*[J], 2008, 15: 443
- [98] Zhong Hanwen(钟汉文), 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(7): 1185
- [99] Ma Qingshuang(马庆爽), Jin Yuchuan(靳玉春), Zhao Yuhong(赵宇宏) *et al.* *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*(中国有色金属学报)[J], 2015, 25(6): 1450
- [100] Lu Y L, Zheng C, Zhong H W *et al.* *Rare Metal Materials and Engineering*[J], 2009, 38(11): 1890
- [101] Dong W P, Chen Z, Wang Y X. *Science China Physics, Mechanics and Astronomy*[J], 2011, 54(5): 821
- [102] Dong W P, Wang Y X, Yang K *et al.* *Chinese Science Bulletin*[J], 2011, 56(19): 2055
- [103] 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
- [104] Chang X L, Wang Y X, Chen Z *et al.* *Rare Metal Materials and Engineering*[J], 2013, 42(6): 1113
- [105] Lu Y L, Zhang L C, Chen Y P *et al.* *Intermetallics*[J], 2013, 38: 144
- [106] Wang Kun(王 锐). *Investigation on Precipitation of Ni₇₅Al₁₄Mo₁₁ Alloy by Phase-field Simulation*(Ni₇₅Al₁₄Mo₁₁ 合金沉淀相场微观模拟)[D]. Taiyuan: North University of China, 2015
- [107] Dong W P, Wang Y X, Chen Z *et al.* *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*[J], 2011, 21(5): 1105
- [108] 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
- [109] Yang K, Chen Z, Dong W *et al.* *Science China Technological Sciences*[J], 2011, 54(4): 835

Microscopic Phase-field Model and Its Application for Solid-state Phase Transformation of Alloys

Wang Kun, Wang Yongxin, Wei Pu, Lu Yanli, Zhang Jing, Chen Zheng

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

Abstract: In the field of materials science and engineering, the phase-field method is an indispensable component of computational materials science. The phase-field method has incomparable advantages in simulating and predicting the microstructural and morphological evolutions in materials. The microstructure determines the service performances of materials. In fact, the manipulation of various properties of the solid materials principally depends on the anticipative material microstructures generated through the subtle control on phase transition process. In general, the experimental analysis of the solid-state phase transformation of alloy materials prevalingly focuses on the observation and discussion of the results, but less concerns on the kinetics of phase transitions. The phase-field method based on microscopic diffusion theory is capable of exploring the phase transformation process at the atomic scale, for which other phase-field models are powerless to achieve. This paper systematically reviewed the research ideas and results about the application of microscopic phase-field model in solid-state phase transformations. On this basis, the difficulties of current research were expounded, and the development prospect of microscopic phase-field in the field of solid-state phase transition was prospected. Finally, we forecasted the possible developments of microscopic phase-field in the foreseeable future.

Key words: phase-field; solid-state phase transformation; computational simulation; alloys

Corresponding author: Wang Yongxin, Ph. D., Professor, State Key Laboratory of Solidification Processing, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, P. R. China, E-mail: wangyx818@126.com