

Co-Pt 合金中 $L1_0$ 原子间相互作用势和沉淀过程的 微观相场法研究

何承宇¹, 李梦佳^{1,2}, 董卫平^{1,2}, 王琳琳^{1,2}, 陈铮³

(1. 浙江师范大学 工学院, 浙江 金华 321004)

(2. 浙江省城市轨道交通智能运维技术与装备重点实验室, 浙江 金华 321004)

(3. 西北工业大学 材料学院, 陕西 西安 710072)

摘要: 基于微观相场法和原子间相互作用势方程, 计算出 Co-Pt 合金中 $L1_0$ 结构第一近邻原子间相互作用势, 计算结果得到 Co-Pt 合金中 $L1_0$ 结构第一近邻原子间相互作用势随温度的升高而增大, 随浓度的增大而增大, 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。利用计算的原子间相互作用势模拟了 Co-Pt 合金沉淀过程以及最终形貌, 模拟结果能得到 $L1_0$ 和 $L1_2$ 结构, 根据序参数可以得到 $L1_0$ 结构的沉淀转变机制特征是失稳分解, 而后粗化长大且最终两相体积分数接近, 合金沉淀形貌与实验结果符合。相场法计算 Co-Pt 合金中 $L1_0$ 结构原子间相互作用势, 拓展了相场法在含 $L1_0$ 结构的合金设计中的应用范围。

关键词: 相场法; 沉淀机制; 原子间相互作用势; Co-Pt 合金; 失稳分解

中图分类号: TG111.5; TG146.1+6

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2022)09-3316-07

大多数材料是多相体系, 相通常有复杂的空间排列方式, 形成不同的微观结构。由于多相材料的物理性能不仅取决于各组成相的原子结构, 而且还与其微观结构密切相关, 因此, 微观结构的形成和演化机制一直是近几十年来理论和实验研究的热点^[1-4]。在 Co-Pt 合金中, 使用电子显微镜的方法可以观察到其包含 2 种微观结构立方 $L1_2$ 和四方 $L1_0$ 有序相, 2 种结构之间有很多相似点^[5,6], 两者通过共格界面共存^[7]。以往利用实验手段对 Co-Pt 合金中沉淀相进行了大量研究, 多为讨论沉淀后期的沉淀相调制结构形貌、异常粗化(立方体分裂)等现象^[8,9]。然而, 在无序-有序转变过程中, Co-Pt 合金沉淀早期是高浓度梯度、非线性、非平衡的复杂系统, 沉淀早期的沉淀机制时空尺度而言, 其时间尺度在秒级, 空间尺度在数十至数百原子, 现有的实验手段研究合金沉淀早期的规律和机制非常困难, 计算机模拟弥补了这方面的不足^[10-12]。合金沉淀早期不仅可能出现经典或非经典形核长大、等成分有序化、失稳分解等机制, 还可能出现它们的混合机制^[13-15]。

近年来, 合金沉淀动力学的模拟研究工作已经开展, 国内外学者均在二元合金和三元合金的模拟研究中取得进展^[16-20]。相结构不同即原子占位规律不同,

微观相场动力学模型以原子占据晶格位置的概率为场变量来描述原子的组态和相变, 可观察到每一瞬时原子排列细节, 具有直观性、瞬时性和原位性, 故其在研究有序化过程中出现的析出相具有很多优势, 成功模拟了 Al-Li 和 Ni-Al 合金以及 Ni-Al-V 三元合金沉淀机制, 而且还考虑了外场作用对该合金沉淀机制的影响^[21-24]。但对 $L1_0$ 结构的沉淀机制的研究, 尤其是利用微观相场法进行 Co-Pt 合金中的 $L1_0$ 结构沉淀机制的定量研究还未见相关报道。本研究首先建立微观相场动力学模型, 该模型将考虑 $L1_0$ 相中随温度和浓度变化的原子间相互作用势等。计算出 $L1_0$ 相原子间相互作用势, 该模型将用于描述 Co-Pt 和类似合金。其次, 将进行相场法计算机模拟, 研究沉淀过程中结构的形成和粗化、沉淀机制等, 以此来为 Co-Pt 合金设计提供理论指导。

1 原子间相互作用势方程和晶体结构

1.1 原子间相互作用势方程

本工作第一近邻原子间相互作用势求值方程的推导是基于离散格点形式的微观相场动力学方程, 即 Cahn-Hilliard 扩散方程的微观离散格点形式, 最早是由 Khachaturyan 创建^[25]。基于该方程, Khachaturyan

收稿日期: 2021-09-10

基金项目: 国家自然科学基金(12002315)

作者简介: 何承宇, 男, 2002 年生, 学士, 浙江师范大学工学院, 浙江 金华 312004, E-mail: 3043521446@zjnu.edu.cn

进一步得出溶质原子(B 原子)占位几率和自由能之间关系的方程:

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

式中, c 为溶质原子(B 原子)的浓度, 是长程序参数, $E_s(r)$ 是与晶格对称性有关的函数, 是 A、B 原子之间的化学势, $t-1$ 是超晶格结构非零向量的数目。在此, 是原子间相互作用势的傅里叶变换形式。

在 L1₀ 结构中, 原子在晶格位置处的占位几率:

$$E(r) = \frac{1}{2} e^{i2\pi r} \quad (2)$$

同时在 L1₀ 结构中, $E(r)$ 只能取 1/2 或 -1/2, 故式(1)可用 2 个方程表示如下:

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

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

上面两式化简得到:

$$\frac{1-c(1+\eta)}{c(1+\eta)} = \frac{-u+c \cdot [V(0)+V(k_0)]}{k_B T} \quad (5)$$

$$\frac{1-c(1-\eta)}{c(1-\eta)} = \frac{-u+c \cdot [V(0)-V(k_0)]}{k_B T} \quad (6)$$

上面两式联立可以得出,

$$\frac{V(k_0) \cdot \eta}{k_B T} = \ln \frac{[1-c(1+\eta)] \cdot c(1-\eta)}{[1-c(1-\eta)] \cdot c(1+\eta)} \quad (7)$$

式中, c 为溶质原子(B 原子)的浓度, η 为 L1₀ 结构的长程序参数, k_B 为玻尔兹曼常数, T 为绝对温度。在 L1₀ 结构中,

$$k_0 = k_z = 2\pi a_3^* \quad (8)$$

把式(8)代入原子间相互作用能傅里叶变换式

$$V(k_0) = \sum_r w(r) \cdot e^{ik_0 r} \text{ 中,}$$

$$\begin{aligned} V_{af}(k) = & 4V_{af}^1 (\cos \pi h \cos \pi k + \cos \pi h \cos \pi l + \cos \pi k \cos \pi l) \\ & + 2V_{af}^2 (\cos 2\pi h + \cos 2\pi k + \cos 2\pi l) \\ & + 8V_{af}^3 (\cos 2\pi h \cos \pi k \cos \pi l + \cos \pi h \cos 2\pi k \cos \pi l \\ & + \cos \pi h \cos \pi k \cos 2\pi l) \\ & + 4V_{af}^4 (\cos 2\pi h \cos 2\pi k + \cos 2\pi h \cos 2\pi l + \cos 2\pi k \cos 2\pi l) \end{aligned} \quad (9)$$

并令 $V_1=W_1$, $V_2=W_2$, $V_3=W_3$, $V_4=W_4$ (W_1, W_2, W_3, W_4 分别为第一、二、三、四近邻原子间相互作用势), 忽略方程中其他近邻作用, 得出:

$$V(k_0) = -4W_1 \quad (10)$$

这样异类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, 更具体的推导过程可以参看 L1₂ 和 D0₂₂ 公式推导过程, 公式推导过程类似^[26,27]:

$$\frac{-4W_1 \cdot \eta}{k_B T} = \ln \frac{(1-\eta) \cdot [1-c(1+\eta)]}{(1+\eta) \cdot [1-c(1-\eta)]} \quad (11)$$

通过式(11), 可以从变化的长程序参数入手求得不同温度、浓度下的异类 L1₀ 结构第一近邻原子间相互作用势 W_1 , 以下称为微观相场反演原子间相互作用势, 并将此方法叫为微观相场反演法, 上述方程称为微观相场反演原子间相互作用势方程。该方程计算所得原子间相互作用势是随温度和浓度变化的。反演计算是从整体自由能的角度计算, 由于是对 L1₀ 结构的原子间相互作用势的计算, 必须选择相图中析出有序结构的区域进行计算, 因为只有在这个范围内, 才会出现长程序参数接近于 1 的 L1₀ 结构, 这个区域有一定温度、浓度范围。该方法适用于面心立方的 L1₀ 结构 AB 型 CuAu、CoPt 和 FeNi 等合金, 其中 A 溶剂原子对应 Cu、Co 和 Fe 原子, B 为溶质原子 Au、Pt 和 Ni 原子, 本文主要研究 Co-Pt 合金。

1.2 原子结构示意图

根据相图, 本工作中研究 Co-Pt 合金将出现 2 种晶体结构, 分别是 L1₀ 结构和 L1₂ 结构^[28]。2 种结构的三维结构示意图及在 [010] 方向上的二维投影图和模拟的原子演化图如图 1 所示。本研究中 Co-Pt 合金, 溶剂原子是 Co 原子(白色), 溶质原子是 Pt 原子(黑色)。模拟得到的原子演化图通过晶格位置 Pt 原子占位几率反映合金的沉淀过程, 晶格位置的亮度越高, Pt 原子占位几率越高; 亮度越低, Pt 原子占位几率越低。图 1a 和 1b 分别对应 2 种取向的 L1₀ 结构: Type-I 型和 Type-II 型, 它们的晶体结构没有区别, 只是取向不同, Type-I 型沿着平行于面心立方结构 [100] 方向旋转 90° 即为 Type-II 型结构。如果溶质原子在某一位置占位几率几乎为零, 则溶剂原子在该位置占位。

2 结果与分析

2.1 L1₀ 的原子间相互作用势结果

原子间相互作用势随长程序参数、浓度和温度变化如图 2 所示, 图 2a 是原子间相互作用势随长程序参数的变化曲线, 曲线随横坐标长程序参数的增大逐渐升高, 说明原子间相互作用势随长程序参数的增大而增大。

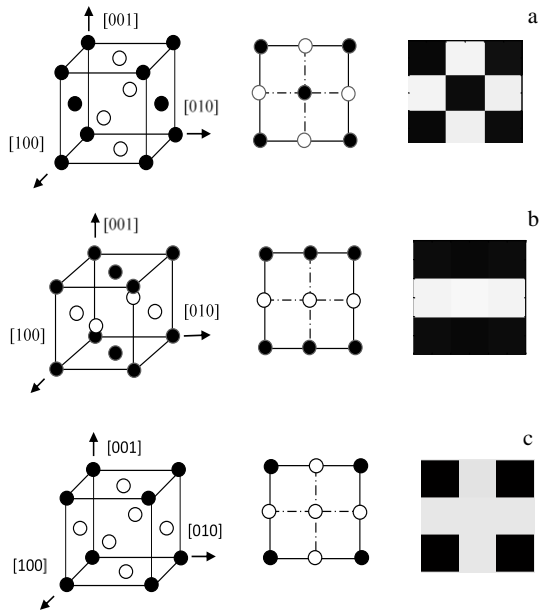


图 1 L₁₀ 和 L₁₂ 结构三维结构示意图及[010]方向上二维投影示意图和模拟的原子演化图

Fig.1 3D structures of L₁₀ and L₁₂, 2D projection diagram and simulation atomic evolution diagram in the [010] direction: (a) L₁₀ (Type-I), (b) L₁₀ (Type-II), and (c) L₁₂

由于长程序参数大小反映有序程度, 当有序度提高时, 原子排列更有序, 原子间间距以及原子周围的原子类型均随之变化, 影响原子间相互作用势值。在原来微观相场中是利用相场方程计算得到长程序参数, 而在本研究中, 长程序参数是作为一个输入参数, 由于本是计算 L₁₀ 有序相原子间相互作用势, 故选取有序度较高的部分来进行计算 (长程序参数本工作中选取 0.85~0.99)。根据相图在形成有序的 L₁₀ 结构的区域, L₁₀ 结构的原子比例是 1:1, 所以选取原子浓度在 0.5 附近的来计算原子间相互作用势, 温度范围选取 400 K 附近计算。同时从图 2a 还可以看出, 4 条曲线罗列上升, 即温度和浓度不同时, 原子间相互作用势不同且随温度和浓度增大而增大。为了进一步说明原子间相互作用势与温度和浓度的关系, 得到图 2b 和图 2c 所示原子间相互作用势随浓度变化曲线和原子间相互作用势随温度变化曲线。结果表明, 原子间相互作用势随浓度增大近似线性增大, 如图 2b 所示。而原子间相互作用势随温度的升高先缓慢增大, 后增大较多, 如图 2c 所示。同时得到原子间相互作用势随温度浓度交互作用的变化曲线, 如图 2d 所示, 同样可以从图中看出原子间相互作用势随温度和浓度的增大而增大。

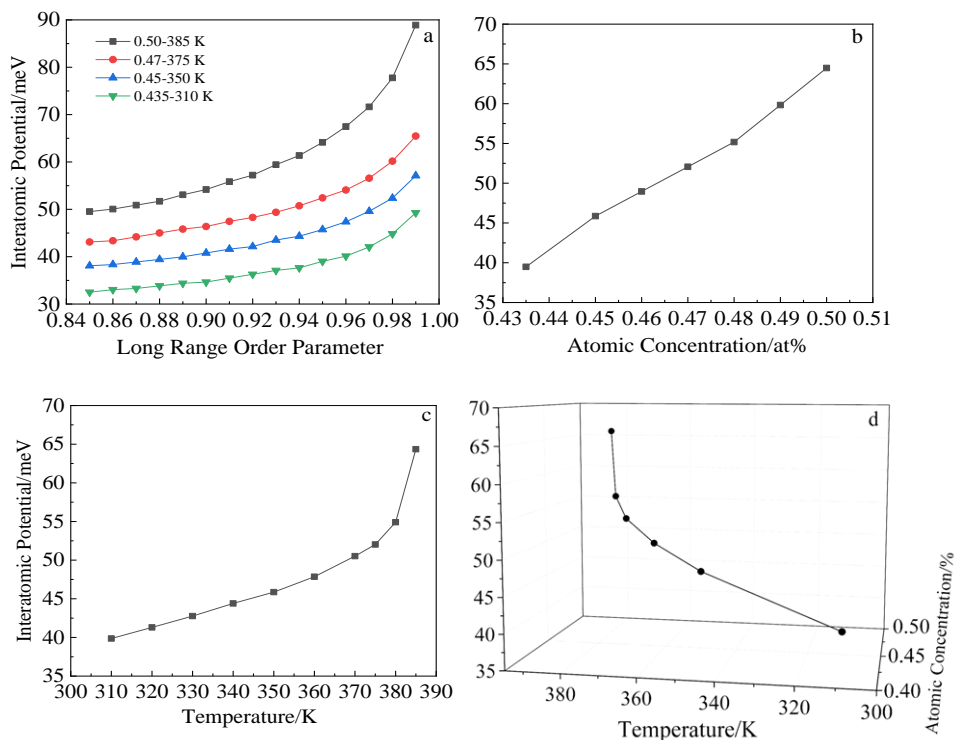


图 2 Co-Pt 合金 L₁₀ 结构原子间相互作用势随参数的变化曲线

Fig.2 Variations of interatomic potential and the parameters of L₁₀ structure in the Co-Pt alloy: (a) long range order parameter; (b) atomic concentration; (c) temperature; (d) temperature and atomic concentration

原子间相互作用势随温度和原子浓度变化的值如下表 1 所示, 从表中结果可以看出原子间相互作用势值随温度和原子浓度增大而增大, 得到的原子间相互作用势值将用于相场法进行相场模拟。同时将原子间相互作用势值与其他方法得到的原子间相互作用势值进行对比如图 3 所示, 紫色柱状图为相场法计算得到的 L₁₀ 结构原子间相互作用势, 而绿色柱状图是其他方法得到的 L₁₀ 结构原子间相互作用势, 对比发现在原子浓度等于 0.5 时, 2 种方法得到的原子间相互作用势值基本相等^[29]。而本文利用相场法计算得到的原子间相互作用势值是随温度和原子浓度变化而变化的。L₁₀ 结构的晶格常数随原子浓度增大而减少, 故原子间距减少, 原子间的相互作用更紧密, 即原子间相互作用势增大是随原子间距减少而增大。当温度增大的时候, 原子振动速度加剧, 内能增大, 原子间相互作用也增大, 原子间相互作用势也增大。

2.2 相场法模拟结果

上述研究得到的原子间相互作用势值代入相场法进行模拟得到的沉淀形貌, 如图 4 所示。Co-Pt 合金成分为钴元素是 0.37, 温度为 850 K, 格点选取 128×128, 随不同时间步长得到沉淀过程。根据相图, 该成分和温度下得到的沉淀相是 L₁₀ 和 L₁₂ 结构^[28]。当时间步长为 100 步时, 合金处于无序状态, 即图中为没有出现有序结构, 均为灰色。随时间步长到 10 000 步

时, 沉淀形貌中已经形成相连的有序结构, 根据图 1 模拟形貌图可以判断, 该有序结构为 L₁₀ 和 L₁₂ 结构混合沉淀。在图 4e 中, 即当时间步长为 500 000 步时, 用黑色圈标出部分为 L₁₀ 结构, 其他部分为 L₁₂ 结构。为了更清晰看到 L₁₀ 结构, 进行局部放大, 发现图 1 中 L₁₀ 的 2 种结构形式同时出现在本合金的沉淀相中。随时间步长的增大, 沉淀相不断长大, 得到块状的 L₁₀ 和 L₁₂ 结构, 与其他方法得到的沉淀形貌进行对比, 如图 4f 所示, 图中黑色块状为 L₁₀ 结构, 其他白色为 L₁₂ 结构, 结果表明 2 种方法得到的沉淀形貌基本一致^[7]。同时从图中可以看出, 沉淀后期最终得到 L₁₀ 和 L₁₂ 结构, 与相图中该温度浓度下相结构一致^[28]。说明将相场法计算得到的原子间相互作用势反代入相场法中模拟合金的沉淀过程能得到准确的模拟结果, 可以用于丰富原子间相互作用势计算方法, 同时可以用于指导有 L₁₀ 结构的相关合金的设计。

相场法模拟得到的合金沉淀形貌中, 选取时间步长为 500 000 步时计算 2 种沉淀相 L₁₀ 结构和 L₁₂ 结构的体积分数如图 5 所示。从图中可以看出, 2 种沉淀相随时间步长的增大而先明显增多, 对应合金从无序到有序化形核的初始阶段, 而 L₁₂ 增多没有 L₁₀ 明显, 说明 L₁₂ 刚开始沉淀少于 L₁₀ 结构。随着时间的进行, 2 种结构体积分数缓慢增大, 即相组织不断长大的过程, 与图 4 中形貌组织图相对应, 形貌组织图中, 刚开始 L₁₀ 结构和 L₁₂ 结构都比较小, 随着时间的进行, 2 种结构均长大。L₁₀ 结构和 L₁₂ 结构的体积分数最终值分别为 0.50 和 0.48, 说明沉淀后期中 2 种结构共存且占比体积接近。

由于沉淀机制的研究在沉淀早期, 时间比较短暂, 在实际试验过程中跟踪观察很困难, 而这正是计算机模拟的优势。在上述 L₁₀ 结构沉淀过程分析的基础上, 进一步研究 L₁₀ 结构沉淀机制, 得到如图 6 所示的 L₁₀ 结构长程序参数和成分序参数曲线图, 图中所选取的是晶胞位置是图 4d 中红线画出部分, 图中不同颜色的曲线表示不同的时间步长。有序相的长程序参数和成分序参数是由溶质原子的占位几率换算得到的。前者反映了合金晶胞尺度范围的有序化程度(其取值从 0~1), 取 0 表示完全无序状态, 取 1 表示完全有序。后者反映了晶胞尺度内溶质原子簇聚的程度, 在 L₁₀ 结构中根据原子比例, 其取值从 0 到 0.5, 取 0 表示不含溶质原子, 取 0.5 即 L₁₀ 结构达到平衡浓度。对照长程序参数和浓度变化演化过程可以看出, 该 L₁₀ 相的沉淀过程可分为如下 3 个阶段。第 1 阶段, 时间步数为 5000 步前, 有序相开始出现浓度基本保持初始浓度, 而此时长程序参数已经逐渐接近平衡值, 因此该

表 1 Co-Pt 合金 AB 型 L₁₀ 结构原子间相互作用势值

Table 1 Interatomic potential of AB-L₁₀ structure in Co-Pt alloy (meV)

Co concentration/at%	Temperature/K	Interatomic potential/meV
0.45	350	46.2853
0.475	365	52.4421
0.5	385	65.6790

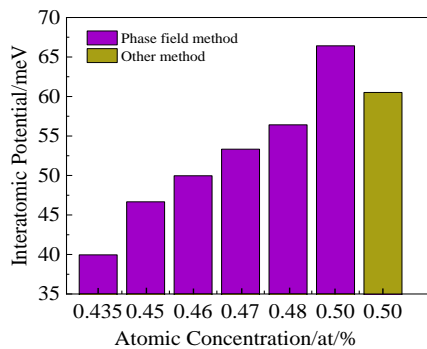


图 3 相场法原子间相互作用势值与其他方法原子间相互作用势值对比

Fig.3 Comparison of the interatomic potential values of phase-field method with other methods^[29]

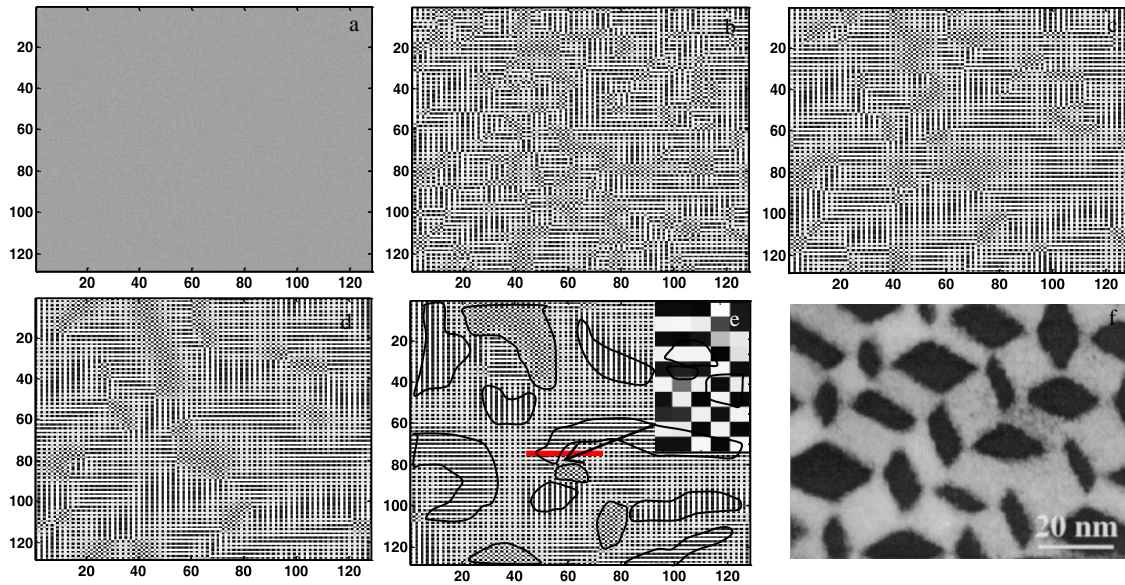


图 4 $\text{Co}_{0.395}\text{Pt}_{0.605}$ 合金温度为 850 K 时相场法模拟图和试验图对比

Fig.4 Comparisons of phase field simulation and experimental result at 850 K in $\text{Co}_{0.395}\text{Pt}_{0.605}$ alloy with different steps: (a) $t=100$, (b) $t=10\ 000$, (c) $t=50\ 000$, (d) $t=100\ 000$, (e) $t=500\ 000$, and (f) TEM image^[7]

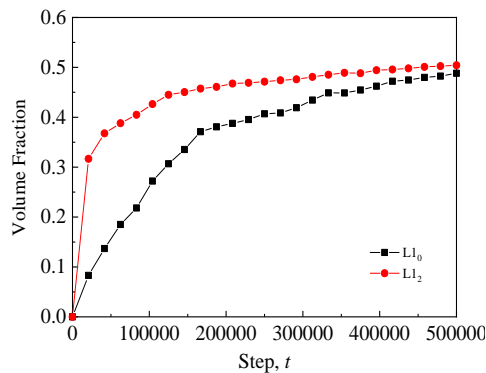


图 5 $\text{Co}_{0.395}\text{Pt}_{0.605}$ 合金温度为 850 K 时 L_{10} 和 L_{12} 沉淀相体积分数曲线

Fig.5 Volume fraction curves of L_{10} and L_{12} precipitation phase in $\text{Co}_{0.395}\text{Pt}_{0.605}$ alloy at 850 K

过程属于失稳分解过程，形成的是非化学计量比有序相。第 2 阶段，到时间步数 30 000 后，有序化继续进行，长程序参数略变宽，浓度序参数也变宽，值逐渐增大。第 3 阶段，在时间步数为 100 000 时，长程序参数和浓度均达到平衡值，此时形成化学计量比更高的有序相，对应有有序相颗粒的长大粗化过程。故本研究中 $\text{Co}_{0.395}\text{Pt}_{0.605}$ 合金温度为 850 K 时， L_{10} 结构的转变机制特征为：固溶体发生了失稳分解及随后的连续粗化。

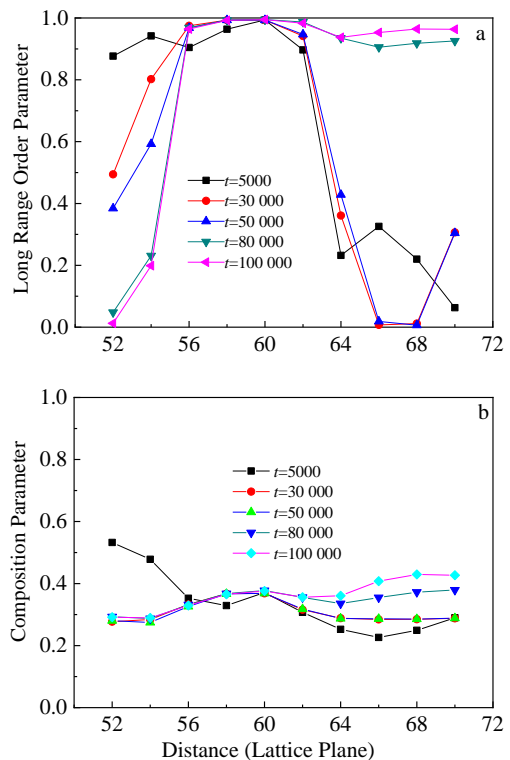


图 6 $\text{Co}_{0.395}\text{Pt}_{0.605}$ 合金中 L_{10} 相中长程序参数和成分序参数随时间步长的变化

Fig.6 Long range order parameter (a) and composition parameter (b) of L_{10} structure in $\text{Co}_{0.395}\text{Pt}_{0.605}$ alloy with different steps

3 结 论

1) 利用相场法反演原子间相互作用势方程计算得到 Co-Pt 合金中 $L1_0$ 结构随温度和浓度变化的原子间相互作用势值。且 $L1_0$ 结构原子间相互作用势值随温度和浓度增大而增大。并与其他方法得到的原子间相互作用势值对比, 结果接近。

2) 原子间相互作用势反代入相场法中模拟 Co-Pt 合金, 结果表明合金沉淀过程析出 2 种结构相 $L1_0$ 和 $L1_2$ 结构, 并逐渐粗化且最终 2 种结构的体积分数接近。沉淀形貌与其他结果基本一致。

3) Co-Pt 合金中 $L1_0$ 结构长程序参数先迅速上升后达到最大同时成分序参数变化不大, 即沉淀转变机制特征是失稳分解, 而后粗化长大。

参考文献 References

- [1] Yin D Y, Liu H Q, Chen Y Q *et al.* *International Journal of Fatigue*[J], 2016, 84: 9
- [2] Darling K A, Rajagopalan M, Komarasamy M *et al.* *Nature*[J], 2016, 537(7620): 378
- [3] Joseph C, Persson C, Colliander M H, *Materials Science and Engineering A*[J], 2017, 679: 520
- [4] Wang Y M, Voisin T, McKeown J T *et al.* *Nature Materials*[J], 2018, 17(1): 63
- [5] Bouary L Y, Loiseau A. *Acta Materialia*[J], 2001, 49: 2679
- [6] Ghatwai P, Vetter E, Hrdy H *et al.* *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*[J], 2015, 375: 87
- [7] Bouar Y L, Loiseau A, Khachatryan A G. *Acta Materialia*[J], 2013, 46(8): 2777
- [8] Kashyap I, Vetter E P, Floro J A *et al.* *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*[J], 2019, 479: 204
- [9] Chen S C, Kuo P C, Shen C L *et al.* *Materials and Design*[J], 2010, 31: 1706
- [10] Islam M, Sarker M S I, Nakamura T *et al.* *Materials Chemistry and Physics*[J], 2021, 269(2): 124 727
- [11] Park S I, Lee B J, Lee H M. *Scripta Materialia*[J], 2001, 45(5): 495
- [12] Lu F, Wang J, Li J M *et al.* *Applied Catalysis B: Environmental*[J], 2020, 278: 119 332
- [13] Jin H M, Guan R G, Huang X X *et al.* *Journal of Materials Science and Technology*[J], 2022, 96(10): 226
- [14] Yu H, Wang Z T, Zhang B Y *et al.* *Journal of Alloys and Compounds*[J], 2021, 876: 160 104
- [15] Zhang Q, Li Q A, Chen X Y *et al.* *Journal of Materials Research and Technology*[J], 2021, 15: 37
- [16] Chen X, Li Y S, Yan Z W *et al.* *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*[J], 2021, 29: 035 002
- [17] Shi S J, Yan Z W, Li Y S *et al.* *Journal of Materials Science*[J], 2021, 56: 2597
- [18] Chen J, Li Y S, Jin S S *et al.* *Progress in Natural Science-Materials International*[J], 2021, 31: 86
- [19] Zhou X Y, Kamachali R D, Boyce B L *et al.* *Acta Materialia*[J], 2021, 215: 117 054
- [20] Zhou J J, Zhong J, Chen L *et al.* *Calphad*[J], 2017, 56: 92
- [21] Zhao Yuhong(赵宇宏), 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], 2004, 33(7): 701
- [22] Liu L, Chen Z, Wang Y X *et al.* *Journal of Alloys and Compounds*[J], 2016, 661: 349
- [23] Zhen Huihui(甄辉辉), 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(2): 286
- [24] Lu Yanli(卢艳丽), Chen Zheng(陈 铮), Li Yongsheng(李永胜) *et al.* *Rare Metal Materials and Engineering(稀有金属材料与工程)*[J], 2005, 34(8): 1205
- [25] Khachatryan A G. *Theory of Structural Transformations in Solids*[M]. New York: Wiley, 1983
- [26] 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
- [27] 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
- [28] Okamoto H. *Journal of Phase Equilibria and Diffusion*[J], 2019, 40: 743
- [29] Cao W, Chang Y A, Zhu J *et al.* *Acta Materialia*[J], 2005, 53: 331

Microscopic Phase-field Study of the Interatomic Potential and Precipitation Process for L1₀ Structure in Co-Pt Alloys

He Chengyu¹, Li Mengjia^{1,2}, Dong Weiping^{1,2}, Wang Linlin^{1,2}, Chen Zheng³

(1. College of Engineering, Zhejiang Normal University, Jinhua 321004, China)

(2. Key Laboratory of Intelligent Operation and Equipment of Urban Rail Transit in Zhejiang Province, Jinhua 321004, China)

(3. School of Materials Science and Engineering, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China)

Abstract: Based on the microscopic phase-field method and the interatomic potential equation, the first near-neighbor interatomic potentials of the L1₀ structure in Co-Pt alloy was calculated. The results show that the first near-neighbor interatomic potential of the L1₀ structure in the Co-Pt alloy increases with the increase of the temperature, and increases with the increase of the concentration. The first near-neighbor interatomic potential, which linearly changes with the temperature and concentration, is close to other literature result. Using the interatomic potential to simulate the Co-Pt alloy precipitation process and the final morphology, the simulation results can get L1₀ and L1₂ structure. According to the sequence parameters, we can get that the L1₀ structure precipitation mechanism characteristics are spinodal decomposition, and then coarsed. The final two-phase volume fraction is close and the alloy precipitation profile and experimental results are consistent. The calculation of the interatomic potential for L1₀ structure in Co-Pt alloy using phase-field method can expand the application range of phase-field method in alloy design with L1₀ structure.

Key words: phase-field method; precipitation mechanism; interatomic potential; Co-Pt alloy; spinodal decomposition

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