

原子间相互作用能对 Ni₇₅Al_xV_{25-x} 合金孕育期影响的微观相场模拟

徐 聪, 陈 铮, 王永欣, 钟汉文, 孙立岩, 苗海川

(西北工业大学, 陕西 西安 710072)

摘 要: 基于微观相场动力学模型, 研究原子间相互作用能对 Ni₇₅Al_xV_{25-x} 合金孕育期的影响。根据 Khachaturyan 所给的占位几率公式进一步得到了长程序参数的求值公式。结果表明, 先析出相为 DO₂₂ 时, Ni-Al 最近邻原子间作用能 V_{Ni-Al} 增大, L1₂ 相的孕育期缩短, DO₂₂ 相的孕育期变化不明显; Ni-V 最近邻原子间作用能 V_{Ni-V} 增大, L1₂ 相和 DO₂₂ 相的孕育期均缩短。先析出相为 L1₂ 相时, V_{Ni-Al} 增大, L1₂ 相和 DO₂₂ 相孕育期均缩短; V_{Ni-V} 增大, L1₂ 相孕育期变化不明显, DO₂₂ 相的孕育期缩短。

关键词: 孕育期; 原子间相互作用能; 微观相场; Ni₇₅Al_xV_{25-x} 合金

中图分类号: TG 146.1⁺5

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2009)11-1935-05

早期析出相组织在很大程度上决定了合金的最终组织, 但是关于成核孕育期的研究很少见到, 原因在于孕育期发生的时间非常短暂, 并且此时尚没有完整的晶核形成, 测量起来比较困难。Chen^[1]等在利用微观主方程(microscopic master equation)对二元固溶体中发生的扩散型相变动力学进行计算机模拟时发现: 无论是对于失稳有序化, 还是失稳分解, 或是两者同时存在, 在相变发生之前都存在有孕育期(incubation time)。Fumihiko Wakai 等^[2]在用表面演化法研究理想晶粒在三维长大过程中晶界的运动时也发现了孕育期。国内陈铮^[3]等人用微观相场法模拟出了 Ni-Al-V 合金的孕育期。

以上研究多是考虑浓度或温度对孕育期的影响, 并未考虑原子间相互作用能对其的影响。本文利用离散格点形式的微观相场动力学模型, 研究原子间相互作用能对 Ni₇₅Al_xV_{25-x} 合金中 DO₂₂ 相与 L1₂ 相孕育期的影响。

1 理论模型

采用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, 由 Khachaturyan(1968)创建^[4,5]。三元合金微观相场动力学方程由 L. Q. Chen 等人发展而来。用 P_A(r, t)、P_B(r, t)、P_C(r, t) 分别表示 A、B 和 C 原子在 t 时刻、占据格点

位置 r 的几率, 由于 P_A(r, t)+P_B(r, t)+P_C(r, t)=1, 所以只需要 2 个方程便可描述沉淀过程。为了描述形核等热起伏过程, 在方程右边添加一个随机起伏项, 得到三元体系微观 Langevin 方程^[6]:

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

式中, L(r-r') 为与单位时间内由格点 r 跃迁至 r' 的几率有关的常数, T 为温度, k_B 为玻尔兹曼常数, ζ(r, t) 为均值为零的高斯分布, 与时间、空间无关, 遵循涨落-耗散定理, F 为系统总自由能, 是晶格被占几率的函数。

方程最终在 Fourier 空间进行求解, 在求解过程中, 唯一需输入的变量是原子间相互作用能。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, 可更为准确地描述自由能。V¹_{αβ}, V²_{αβ}, V³_{αβ}, V⁴_{αβ} 分别是第 1、2、3、4 近邻原子间相互作用能, 其表达如下:

$$V_{\alpha\beta}(k) = 4V^1_{\alpha\beta}(\cos\pi h \cdot \cos\pi k + \cos\pi h \cdot \cos\pi l +$$

收稿日期: 2008-10-11

基金项目: 国家自然科学基金(50671084, 50875217); 中国博士后科学基金(2007040218); 陕西省自然科学基金

作者简介: 徐 聪, 男, 1982 年生, 硕士, 西北工业大学材料学院, 陕西 西安 710072, 电话: 029-88474095, E-mail: xucong55555.student@sina.com

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

根据文献[7], Ni-Al-V 合金在 1046.5 K 下最近邻原子间相互作用能(meV/atom)分别为: $V_{\text{Ni-Al}}=122.30$; $V_{\text{Ni-V}}=107.2$; $V_{\text{Al-V}}=40.0$ 。本模拟在其它值不变的情况下,分别对这 3 组最近邻原子间相互作用能增加(减少)3%取值;在 $\text{Ni}_{75}\text{Al}_x\text{V}_{25-x}$ 合金中,当 Al 原子浓度小于 0.055 时,先析出相为 DO_{22} 相,当 Al 原子浓度大于 0.055 时,先析出相为 LI_2 相^[7],因此选取 $\text{Ni}_{75}\text{Al}_{3.5}\text{V}_{21.5}$ 合金和 $\text{Ni}_{75}\text{Al}_{10}\text{V}_{15}$ 合金进行研究。

体系初始状态为无序过饱和 fcc 固溶体,模拟开始给系统加上一定的随机热力学起伏,待稳定晶核形成后,去掉热起伏项,系统自动选择演化路径。模拟迭代计算 200 000 步,时间步长为 $\Delta t=0.0001$ 。

2 长程序参数

L.D.Landau 指出在热力学的宏观变量中加入序参量用以描述相变,序参量是描写系统内部有序化程度,表征相变过程的基本参量。在平均场近似下,可从长程有序角度表达原子形成超结构的过程。对于 LI_2 相中的 Al 原子, Khachaturyan^[8]的占位几率 $P_{\text{Al}}(r)$ 函数:

$$P_{\text{Al}}(r) = C_{\text{Al}}(1 + \eta_{\text{Al}}(e^{i2\pi x} + e^{i2\pi y} + e^{i2\pi z})) \quad (3)$$

式中, C_{Al} 为 Al 的原子浓度, η_{Al} 是 Al 原子的长程序参数。由此可以看出, Al 原子在 LI_2 相中的占有率可能呈现 $C_{\text{Al}}(1+3\eta_{\text{Al}})$ 和 $C_{\text{Al}}(1-\eta_{\text{Al}})$ 2 个值, $C_{\text{Al}}(1+3\eta_{\text{Al}})$ 对应 LI_2 相中 α 格点位, $C_{\text{Al}}(1-\eta_{\text{Al}})$ 对应 β 格点位。由此,可以得出长程序参数方程如下:

$$\text{对于 } \alpha \text{ 格点位, } P_{\text{Al}}^{\alpha} = C_{\text{Al}}(1 + 3\eta_{\text{Al}}) \quad (4)$$

$$\text{对于 } \beta \text{ 格点位, } P_{\text{Al}}^{\beta}(r) = C_{\text{Al}}(1 - \eta_{\text{Al}}) \quad (5)$$

根据 Khachaturyan 所给的式(4)和式(5),消去 C_{Al} , 可以得出

$$\eta_{\text{Al}} = \frac{P_{\text{Al}}^{\alpha}(r) - P_{\text{Al}}^{\beta}(r)}{P_{\text{Al}}^{\alpha}(r) + 3 \cdot P_{\text{Al}}^{\beta}(r)} \quad (6)$$

同理,对于 DO_{22} 相中的 V 原子, Khachaturyan^[8]给出占位几率 $P_{\text{V}}(r)$ 函数如下:

$$P_{\text{V}}(r) = C_{\text{V}} + C_{\text{V}} \{ 2 \cdot \eta_{\text{V1}} \cdot \cos[\pi(2x + z)] + \eta_{\text{V2}} \cdot \cos[2\pi(2x + z)] \} \quad (7)$$

式中, C_{V} 为 V 的原子浓度, η_{V} 是 V 原子的长程序参数。可以看出, V 原子在 DO_{22} 相中的占有率可能呈现 $C_{\text{V}}+C_{\text{V}}(2\cdot\eta_{\text{V1}}+\eta_{\text{V2}})$, $C_{\text{V}}+C_{\text{V}}(-2\cdot\eta_{\text{V1}}+\eta_{\text{V2}})$ 和 $C_{\text{V}}-C_{\text{V}}\eta_{\text{V2}}$ 3 个值, $C_{\text{V}}+C_{\text{V}}(2\cdot\eta_{\text{V1}}+\eta_{\text{V2}})$ 对应 DO_{22} 相中 α 格点位, $C_{\text{V}}+C_{\text{V}}(-2\cdot\eta_{\text{V1}}+\eta_{\text{V2}})$ 对应 β 格点位, $C_{\text{V}}-C_{\text{V}}\eta_{\text{V2}}$ 对应 γ 格点位。这里对 Khachaturyan 的公式进行近似处理,选

取 $\eta_{\text{V1}}=\eta_{\text{V2}}=\eta_{\text{V}}$, 由此,可以得出长程序参数方程如下:

$$\text{对于 } \alpha \text{ 格点位, } P_{\text{V}}^{\alpha} = C_{\text{V}}(1 + 3\eta_{\text{V}}) \quad (8)$$

$$\text{对于 } \beta(\gamma) \text{ 格点位, } P_{\text{V}}^{\beta(\gamma)}(r) = C_{\text{V}}(1 - \eta_{\text{V}}) \quad (9)$$

同样可以得出

$$\eta_{\text{V}} = \frac{P_{\text{V}}^{\alpha}(r) - P_{\text{V}}^{\beta(\gamma)}(r)}{P_{\text{V}}^{\alpha}(r) + 3 \cdot P_{\text{V}}^{\beta(\gamma)}(r)} \quad (10)$$

3 计算结果和分析

3.1 原子间相互作用能对 $\text{Ni}_{75}\text{Al}_{3.5}\text{V}_{21.5}$ 合金孕育期的影响

图 1 为不同最近邻原子间相互作用能作用下 $\text{Ni}_{75}\text{Al}_{3.5}\text{V}_{21.5}$ 合金的平均长程序参数曲线。1a 和 1b 分别为不同 Ni-Al 最近邻原子间相互作用能 $V_{\text{Ni-Al}}$ 作用下 LI_2 相和 DO_{22} 相的平均长程序参数曲线, 1c 和 1d 分别为不同 Ni-V 最近邻原子间相互作用能 $V_{\text{Ni-V}}$ 作用下 LI_2 相和 DO_{22} 相的平均长程序参数曲线。图 1 中, 初始阶段, 各个状态下序参数的值均为零, 说明系统此时处于完全无序状态, 该阶段即为孕育期。由图 1 可知, LI_2 相的孕育期比 DO_{22} 相的长, 说明 DO_{22} 相先于 LI_2 相析出。随后, 析出相有序化程度迅速增大到最大值。由图 1a 和 1b 知, $V_{\text{Ni-Al}}$ 增大, LI_2 相的孕育期缩短, 说明 $V_{\text{Ni-Al}}$ 对 LI_2 相的析出起促进作用; $V_{\text{Ni-Al}}$ 增大, DO_{22} 相的孕育期变化不大, 说明 $V_{\text{Ni-Al}}$ 对 DO_{22} 相孕育期影响不大。由图 1c 和 1d 知, $V_{\text{Ni-V}}$ 增大, DO_{22} 相孕育期缩短, 说明 $V_{\text{Ni-V}}$ 对 DO_{22} 相的析出具有促进作用, LI_2 相的情况与 DO_{22} 相类似, 其孕育期也缩短, 说明 $V_{\text{Ni-V}}$ 对 LI_2 相析出也起促进作用。

3.2 原子间相互作用能对 $\text{Ni}_{75}\text{Al}_{10}\text{V}_{15}$ 合金孕育期的影响

图 2 为不同最近邻原子间相互作用能作用下 $\text{Ni}_{75}\text{Al}_{10}\text{V}_{15}$ 合金的平均长程序参数曲线。2a 和 2b 分别为不同 Ni-Al 最近邻原子间相互作用能 $V_{\text{Ni-Al}}$ 作用下 LI_2 和 DO_{22} 相的平均长程序参数曲线, 2c 和 2d 分别为不同 Ni-V 最近邻原子间相互作用能 $V_{\text{Ni-V}}$ 作用下 LI_2 和 DO_{22} 相的平均长程序参数曲线。由图 2 知, LI_2 相和 DO_{22} 相的形成也存在孕育期, 其有序度逐渐提高并达到最大值。 LI_2 相的孕育期比 DO_{22} 相的孕育期短, 说明 LI_2 相先于 DO_{22} 相析出。由图 2a 和 2b 知, $V_{\text{Ni-Al}}$ 增大, LI_2 相孕育期缩短, 说明 $V_{\text{Ni-Al}}$ 对 LI_2 相的析出具有促进作用, DO_{22} 相的情况与 LI_2 相类似, 其孕育期也缩短, 说明 $V_{\text{Ni-Al}}$ 对 DO_{22} 相析出也起促进作用。由图 2c 和 2d 知, $V_{\text{Ni-V}}$ 增大, LI_2 相孕育期变化不大, 说明 $V_{\text{Ni-V}}$ 对 LI_2 相的析出影响不明显; $V_{\text{Ni-V}}$ 增大, DO_{22} 相的孕育期缩短, 说明 $V_{\text{Ni-V}}$ 对 DO_{22} 相的析出起促进作用。

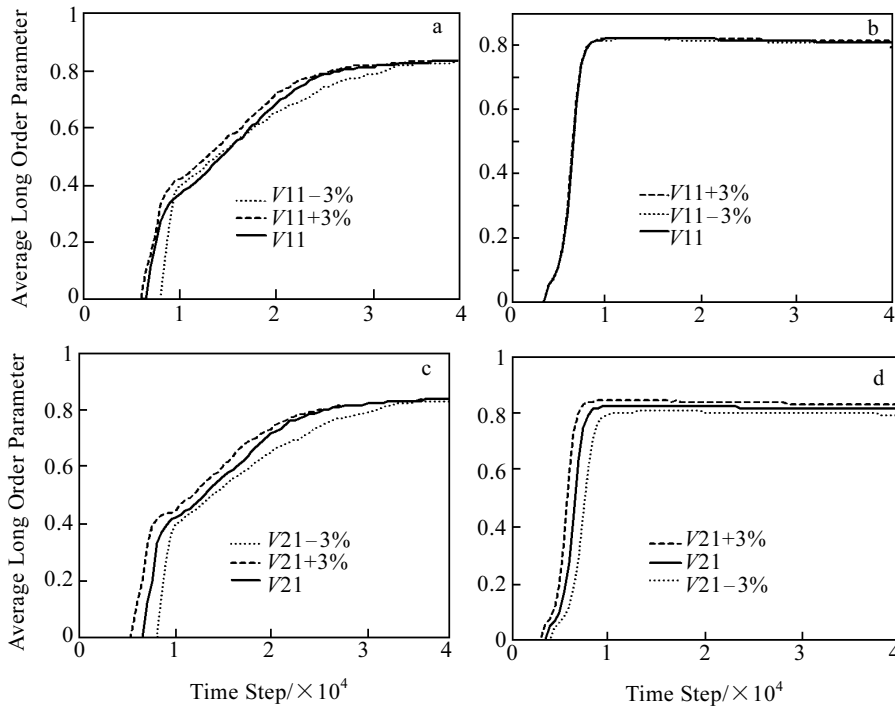


图 1 $\text{Ni}_{75}\text{Al}_{3.5}\text{V}_{21.5}$ 合金在 $V_{\text{Ni-Al}}$ 和 $V_{\text{Ni-V}}$ 影响下的 L_2 相和 DO_{22} 相平均长程序参数的变化曲线 初始

Fig.1 Long order parameter curves influenced by $V_{\text{Ni-Al}}$ and $V_{\text{Ni-V}}$ in $\text{Ni}_{75}\text{Al}_{3.5}\text{V}_{21.5}$ alloy: (a) L_2 phase by $V_{\text{Ni-Al}}$, (b) DO_{22} phase by $V_{\text{Ni-Al}}$, (c) L_2 phase by $V_{\text{Ni-V}}$, and (d) DO_{22} phase by $V_{\text{Ni-V}}$ (V_{11} is original value of $V_{\text{Ni-Al}}$, V_{21} is original value of $V_{\text{Ni-V}}$)

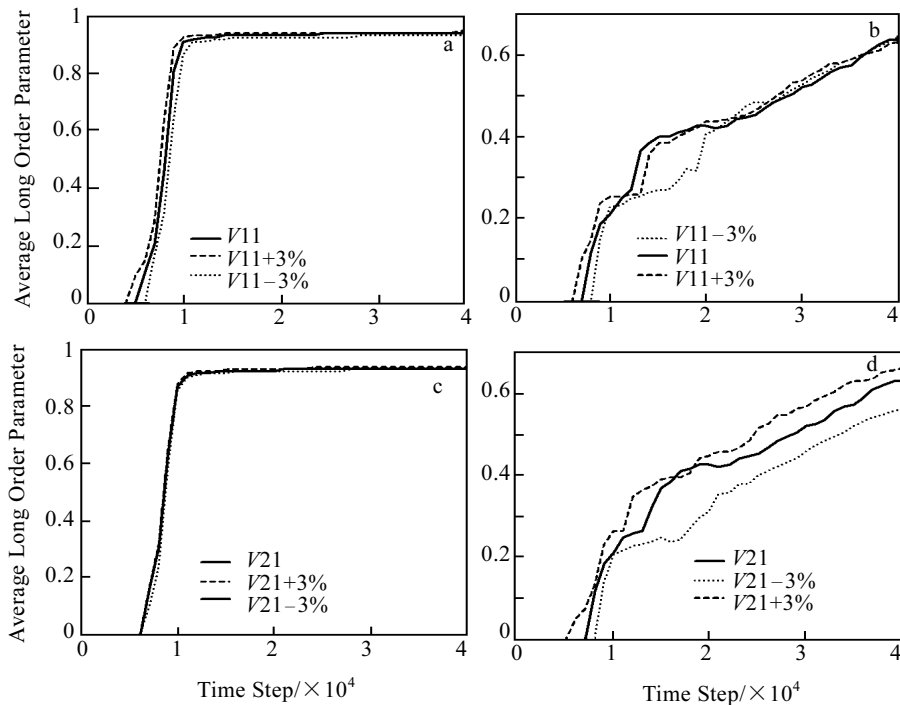


图 2 $\text{Ni}_{75}\text{Al}_{10}\text{V}_{15}$ 合金在 $V_{\text{Ni-Al}}$ 和 $V_{\text{Ni-V}}$ 影响下的 L_2 相和 DO_{22} 相平均长程序参数的变化曲线

Fig.2 Long order parameter curves influenced by $V_{\text{Ni-Al}}$ and $V_{\text{Ni-V}}$ in $\text{Ni}_{75}\text{Al}_{10}\text{V}_{15}$ alloy: (a) L_2 phase by $V_{\text{Ni-Al}}$, (b) DO_{22} phase by $V_{\text{Ni-Al}}$, (c) L_2 phase by $V_{\text{Ni-V}}$, and (d) DO_{22} phase by $V_{\text{Ni-V}}$ (V_{11} is original value of $V_{\text{Ni-Al}}$, V_{21} is original value of $V_{\text{Ni-V}}$)

3.3 讨论

L.Q. Chen^[7]认为影响合金第二相的析出的主要因素是局部的长程有序波动变化的驱动力, $\delta\eta(r)$ 为引入的第 2 个自由能参量, 其与相应的长程有序参数有关:

$$\Delta f \rightarrow \int \left(\frac{\partial^2 f}{\partial \eta^2} \right)_{\eta=0} (\delta\eta)^2 d^3r \rightarrow C(T-T_-) \int (\delta\eta)^2 d^3r \quad (11)$$

式中, C 是常数, T_- 是有序化失稳线的温度, $\left(\frac{\partial^2 f}{\partial \eta^2} \right)_{\eta=0}$

是负的, 为和有序化程度相关的局部长程有序波动的驱动力。方程(11)表示局部长程有序波动的驱动力与过冷度($T-T_-$)成正比。 $T < T_-$ 时, T 值越小, 相对有序化失稳温度 T_- 的过冷度越大, 有序化的驱动力越大。对于等成分的沉淀过程, 与有序化失稳线的垂直距离越大, 体系有序化的驱动力越大。

Khachaturyan^[8]给出

$$T_- = \frac{\varphi(c)}{k_B} \cdot V_{AB}(k_0) \quad (12)$$

式中, $\varphi(c)$ 是和原子浓度 c 有关的函数, $V_{AB}(k_0)$ 是原子间相互作用能, LI_2 相是 V_{Ni-Al} , DO_{22} 相是 V_{Ni-V} 。

对于 $Ni_{75}Al_{3.5}V_{21.5}$ 合金, 此时 $C_{Al}=0.035$, 温度为 1046.5 K, 合金处于 LI_2 和 DO_{22} 相失稳线以下。当只有 V_{Ni-Al} 变化时, 由式(12) 可知, V_{Ni-Al} 的改变只引发 LI_2 相失稳线温度 T_- 改变, 并很容易发现, V_{Ni-Al} 增大, LI_2 相的过冷度($T-T_-$)增大, LI_2 相的驱动力增大。

图 3 为 $Ni_{75}Al_xV_{25-x}$ 合金的原子演化图像。从图 3a 中可以清晰的看出, 大量 LI_2 相会在 DO_{22} 相晶界处形核, 这是因为 DO_{22} 相先于 LI_2 相析出, 先析出的 DO_{22} 相的结构对后析出的 LI_2 相的形核有很大的影响, 导致大量 LI_2 相会在 DO_{22} 相晶界处形核, 降低 LI_2 相的形核阻力, 从而使 LI_2 相提前析出, 孕育期缩短。由以上两方面的原因可知 V_{Ni-Al} 对 LI_2 相的析出起促进作用。 V_{Ni-Al} 的变化并没有改变 DO_{22} 相的失稳线温度 T_- , 也就没有改变 DO_{22} 相的驱动力, 因此 V_{Ni-Al} 对 DO_{22} 相的析出的影响不大。同理, 当只有 V_{Ni-V} 变化时, V_{Ni-V} 的增大, 改变了 DO_{22} 相的失稳线温度 T_- , 使得 DO_{22} 相的过冷度($T-T_-$)增大, DO_{22} 相的驱动力增大, 所以 DO_{22} 相的孕育期缩短, 提前析出; 尽管 V_{Ni-V} 的改变没有改变 LI_2 相的失稳线温度 T_- , 也就没有改变 LI_2 相的驱动力, 但是先析出的 DO_{22} 相对后析出的 LI_2 相的形核有很大的影响, 大量 LI_2 相会在 DO_{22} 相晶界处形核, 大大降低 LI_2 相的形核阻力, 从而使 LI_2 相也提前析出, 孕育期缩短, 因此 V_{Ni-V} 对 LI_2 相的析出也起促进作用。

对于 $Ni_{75}Al_{10}V_{15}$ 合金, 此时 $C_{Al}=0.1$, 温度为 1046.5 K, 合金处在 LI_2 相失稳线以下, DO_{22} 相失稳

线以上。当只有 V_{Ni-Al} 变化时, 同样由式(12)可知, 由于合金处在 LI_2 相失稳线以下, V_{Ni-Al} 的增大使得 LI_2 相的过冷度($T-T_-$)增大, LI_2 相的析出驱动力也就增大, 使得 LI_2 相的孕育期缩短, 提前析出; V_{Ni-Al} 的变化对 DO_{22} 相的驱动力并没有影响, 但从图 3b 可知, 先析出的 LI_2 相对后析出的 DO_{22} 相的形核有很大的影响, 大量 DO_{22} 相会在 LI_2 相晶界处形核, 大大降低 DO_{22} 相的形核阻力, 从而使 DO_{22} 相也提前析出, 孕育期缩短。当只有 V_{Ni-V} 变化时, 同样由式(12)可知, V_{Ni-V} 对 LI_2 相析出的影响不大; 此时合金处在 DO_{22} 相失稳温度线以上, V_{Ni-V} 的增大改变了 DO_{22} 相的失稳线温度 T_- , 使得 DO_{22} 相的温度差值($T-T_-$)减小(由于此时合金处在 DO_{22} 相失稳温度线以上, ($T-T_-$)不能再称为过冷度), DO_{22} 相的驱动力减小, 但是由于 LI_2 相的提前析出, 从图 3b 可清楚看到大量 DO_{22} 相在 LI_2 相晶界处形核, 大大降低了 DO_{22} 相的形核阻力, 因此, 虽然 DO_{22} 相的驱动力减小, 但是减小的阻力远远大于减少的驱动力, 仍然可以使 DO_{22} 相提前析出, 孕育期缩短, 因此 V_{Ni-V} 对 DO_{22} 相的析出起促进作用。

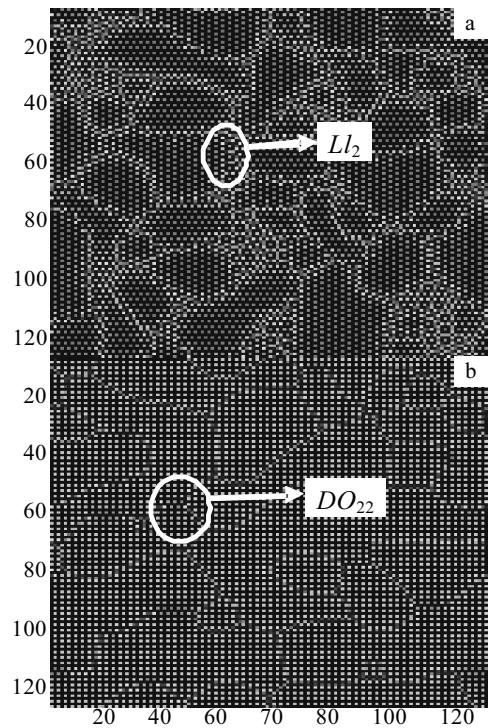


图 3 $Ni_{75}Al_xV_{25-x}$ 合金的原子演化图像

Fig.3 The atomic evolution pictures for $Ni_{75}Al_xV_{25-x}$ alloys : (a) $Ni_{75}Al_{3.5}V_{21.5}$ and (b) $Ni_{75}Al_{10}V_{15}$ alloys

4 结 论

1) 根据 Khachaturyan 所给的占位几率公式进一步得到长程序参数的求值公式:

a) 对于 LI_2 相中的 Al 原子: $\eta_{\text{Al}} = \frac{P_{\text{Al}}^{\alpha}(r) - P_{\text{Al}}^{\beta}(r)}{P_{\text{Al}}^{\alpha}(r) + 3 \cdot P_{\text{Al}}^{\beta}(r)}$

b) 对于 DO_{22} 相中的 V 原子: $\eta_{\text{V}} = \frac{P_{\text{V}}^{\alpha}(r) - P_{\text{V}}^{\beta}(r)}{P_{\text{V}}^{\alpha}(r) + 3 \cdot P_{\text{V}}^{\beta}(r)}$

2) 先析出相为 DO_{22} 相时, Ni-Al 最近邻原子间作用能 $V_{\text{Ni-Al}}$ 增大, LI_2 相的孕育期缩短, 而 DO_{22} 相的孕育期变化不明显; Ni-V 最近邻原子间作用能 $V_{\text{Ni-V}}$ 增大, LI_2 相和 DO_{22} 相的孕育期均缩短。

3) 先析出相为 LI_2 相时, Ni-Al 最近邻原子间作用能 $V_{\text{Ni-Al}}$ 增大, LI_2 相和 DO_{22} 相孕育期均缩短; Ni-V 最近邻原子间作用能 $V_{\text{Ni-V}}$ 增大, LI_2 相孕育期变化不大, 而 DO_{22} 相的孕育期缩短。

[1] Chen L Q, Simmons J A. *Acta Metal Mater*[J], 1994, 42 (9): 2943

[2] Fumihiro Wakai, Naoya Enomoto, Hiroshi Ogawa. *Acta Materialia*[J], 2000, 48: 1297

[3] Li Xiaoling, Chen Zheng, Wang Yongxin *et al. Transactions of Materials and Heat Treatment*[J], 2004(5): 720

[4] Thornton K, Norio Akaiwa, Voorhees P W. *Acta Materials* [J], 2004, 52: 1353

[5] Norio Akaiwa, Voorhees P W. *Materials Science and Engineering*[J], 2000, 285: 8

[6] Chen L Q. *Acta Mater*[J], 1994, 42(10): 3503

[7] Poduri R, Chen L Q. *Acta Mater*[J], 1998, 46: 1719

[8] Khachaturyan A G. *Theory of Structural Transformations in Solids*[M]. New York: Wiley, 1983

参考文献 References

Phase-Field Simulation for the Effect of Atomic Interchange Energy on the Incubation Time of $\text{Ni}_{75}\text{Al}_x\text{V}_{25-x}$ Alloy

Xu Cong, Chen Zheng, Wang Yongxin, Zhong Hanwen, Sun Liyan, Miao Haichuan
(Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China)

Abstract: Based on the microscopic phase-field model, the effects of atomic interchange energy on the incubation time for $\text{Ni}_{75}\text{Al}_x\text{V}_{25-x}$ alloy have been researched, and the long range parameter's evaluation formula has obtained according to the formula for occupation probability by Khachaturyan. The experiment result shows that when the DO_{22} phase is deposited firstly, the first-nearest atomic interchange energy between Ni-Al (namely $V_{\text{Ni-Al}}$) increases, the incubation time of LI_2 phase is shortened, but the incubation time of DO_{22} phase has no obvious change; and the first-nearest atomic interchange energy between Ni-V (namely $V_{\text{Ni-V}}$) increases, the incubation time of LI_2 phase and DO_{22} phase is shortened. When the LI_2 phase is deposited firstly, the $V_{\text{Ni-Al}}$ increases, both the incubation time of LI_2 phase and DO_{22} phase are shortened, and the $V_{\text{Ni-V}}$ increases, the incubation time of LI_2 phase has no obvious change, and the incubation time of DO_{22} phase is shortened.

Key words: incubation time; atomic interchange energies; microscopic phase-field; $\text{Ni}_{75}\text{Al}_x\text{V}_{25-x}$ alloy

Biography: Xu Cong, Master, Department of Materials Science and Engineering, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, P. R. China, Tel: 0086-29-88474095, E-mail: xucong55555.student@sina.com