

# Ni<sub>75</sub>Cr<sub>25-x</sub>Al<sub>x</sub> 合金中 L1<sub>2</sub> 相和 DO<sub>22</sub> 相形核 孕育期的微观相场模拟 \*

卢艳丽<sup>†</sup> 陈 铮 来庆波 张 静

(西北工业大学材料学院,西安 710072)

(2008 年 12 月 30 日收到,2009 年 1 月 17 日收到修改稿)

基于微观相场动力学模型,运用原子图像、平均长程序参数和平均成分偏离序参数,研究了 Al 浓度对 Ni<sub>75</sub>Cr<sub>25-x</sub>Al<sub>x</sub> 合金中 L1<sub>2</sub> 相和 DO<sub>22</sub> 相形核孕育期的影响以及孕育期与沉淀相析出顺序之间的关系.结果表明,L1<sub>2</sub> 相和 DO<sub>22</sub> 相的形核孕育期不仅与 Al 浓度有关,而且与两相析出的先后顺序密切相关.当 Al 浓度小于 7.5% 时,先析出相为 DO<sub>22</sub> 相,随着 Al 浓度的增大,DO<sub>22</sub> 相形核孕育期延长,后析出的 L1<sub>2</sub> 相的形核孕育期也延长,L1<sub>2</sub> 相的原子簇聚速度加快;当 Al 浓度大于 7.5% 时,先析出相为 L1<sub>2</sub> 相,随着 Al 浓度的增大,L1<sub>2</sub> 相的形核孕育期缩短,后析出的 DO<sub>22</sub> 相形核孕育期也缩短.当 Al 浓度为 7.5% 时,L1<sub>2</sub> 相和 DO<sub>22</sub> 相几乎同时析出,两者的孕育期没有明显的差别.

关键词:形核孕育期,序参数,沉淀,微观相场模拟

PACC:8130M,6470K,6150K

## 1. 引 言

形核孕育期在合金相变过程中起着重要的作用,由于它与沉淀相的析出顺序有着直接的关系,在很大程度上决定沉淀相的形貌,从而影响合金的许多性能,成为诸多学者研究的热点<sup>[1-4]</sup>.然而由于孕育期的时间非常短,难以用实验方法监测,利用计算机模拟孕育期具有实验手段无可比拟的优越性. Robson<sup>[5]</sup>利用 KWN 模型(Kampmann and Wagner numerical precipitation model)研究了二元合金中的形核过程与溶质过饱和度关系. Castro<sup>[6]</sup>利用相场法研究了匀相和异相成核过程中的孕育期. Kessler 等<sup>[7]</sup>利用 Monte Carlo 方法研究了二元面心立方合金中孕育期与过饱和度的关系.但是关于两相共存的三元沉淀体系以及包括复杂沉淀序列的沉淀体系的孕育期的研究尚未见报道.

基于 Ginzburg-Landau 动力学方程发展而来的微观相场动力学模型,对处于高度非平衡、非线性系统

的沉淀过程可以进行全过程描述<sup>[8]</sup>,该模型无须预先假设沉淀相的结构,可同时描述原子簇聚和有序化过程<sup>[9,10]</sup>. 本文采用微观相场动力学模型,模拟研究了 Ni<sub>75</sub>Cr<sub>25-x</sub>Al<sub>x</sub> 合金的形核孕育期,通过分析原子占位概率图像、平均成分偏离序参数和平均长程序参数,研究了 Al 浓度和沉淀相析出序列对 L1<sub>2</sub> 相和 DO<sub>22</sub> 相形核孕育期的影响规律.

## 2. 三元体系的微观相场动力学模型

微观相场动力学模型利用以原子占据晶格位置的概率来描述原子的组态和相形貌. 设  $P_A(r, t)$ ,  $P_B(r, t)$  和  $P_C(r, t)$  分别是 A 原子、B 原子和 C 原子在  $t$  时刻、占据  $r$  格点位置的概率,对于三元体系,由于  $P_A(r, t) + P_B(r, t) + P_C(r, t) = 1$ , 所以只需要两个方程便可描述沉淀过程. 假设以 A 原子和 B 原子的占位概率为两个独立变量,得到三元体系的微扩散方程为<sup>[11,12]</sup>

\* 国家自然科学基金(批准号:50071046,50875217)中国博士后科学基金(批准号:20070420218,200801437)和陕西省自然科学基金(批准号: SJ08-ZT05)资助的课题.

<sup>†</sup> E-mail: luyanli@nwpu.edu.cn

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

$$\frac{dP_B(r, t)}{dt} = \frac{1}{k_B T} \sum_{r'} \left[ L_{BA}(r - r') \frac{\partial F}{\partial P_A(r', t)} + L_{BB}(r - r') \frac{\partial F}{\partial P_B(r', t)} \right] + \xi(r, t). \quad (2)$$

这里,  $L_{\alpha\beta}(r - r')$  是与单位时间内一对原子  $\alpha$  和  $\beta$  在格点位置  $r$  和  $r'$  上的交换概率有关的常数 ( $\alpha, \beta = A, B$  或  $C$ );  $\xi(r, t)$  是热噪声项, 为均值为零的高斯

分布, 与时间、空间无关, 遵循所谓的涨落-耗散定理;  $F$  为体系的总自由能, 是晶格被占概率的函数, 在平均场近似下其表达式为

$$F = -\frac{1}{2} \sum_r \sum_{r'} [V_{AB}(r - r') P_A(r) P_B(r') + V_{BC}(r - r') P_B(r) P_C(r') + V_{AC}(r - r') P_A(r) P_C(r')] + k_B T \sum_r [P_A(r) \ln(P_A(r)) + P_B(r) \ln(P_B(r)) + P_C(r) \ln(P_C(r))], \quad (3)$$

式中  $V_{\alpha\beta}(r - r')$  为原子间有效作用能 ( $\alpha, \beta = A, B$  或  $C$ ).

有序相内的浓度和长程序参数均可由溶质原子的占位概率计算得到, 对每个格点最近邻和次近邻的原子占位概率进行平均, 可得该位置的浓度, 同样可通过原子占位概率求得长程序参数, 其数学表达式为<sup>[13]</sup>

$$\gamma(i, j) = \frac{P(i, j) - \alpha(i, j)}{\alpha(i, j) \cos((i + j)\pi)}, \quad (4)$$

式中,  $\gamma(i, j)$  为坐标  $(i, j)$  处的长程序参数,  $P(i, j)$  为溶质原子占位概率,  $\alpha(i, j)$  为局域浓度.

### 3. 模拟结果及分析

Pareige 等<sup>[14]</sup> 用 Monte Carlo 方法研究了 Ni-Cr-Al 合金中原子占位和替代规律, 得出该合金的三元相图上可能形成  $Ni_3Al-Ni_3Cr$  和  $Ni_3Al-Cr_3Al$  准二元区域. 本文以  $Ni_{75}Cr_{25-x}Al_x$  合金为研究对象, 其中 Al 的原子浓度的选取范围为 6%—14.5%, 时效温度为 923 K, 此时合金位于三元相图的  $\gamma + \gamma'$  两相区<sup>[15]</sup>, 从投影面上原子的不同排列形式可判断析出相的结构.

模拟图像以不同灰度值表示原子在格点占位概率高低, 黑色格点表示 Ni 原子, 白色格点表示 Cr 原子, 中间灰色格点表示 Al 原子. 因此, 图像中具有白色格点的区域为  $DO_{22}$  相, 灰黑色格点区域为  $L1_2$  相. 模拟图像采用  $128 \times 128$  格点, 在各个方向上运用周期性边界条件. 模拟中用时间步长来代替实际时间.

模拟的初始状态为无序过饱和固溶体, 在体系的初始状态, 耦合上热噪声项即可自发形核. 形核后去掉热起伏, 体系自由选择动力学路径.

#### 3.1. Al 浓度小于 7.5% 时的情形

图 1 为 Al 浓度小于 7.5% 时, 合金沉淀过程原子形貌演化图. 图 1(a)—(c) 为  $Ni_{75}Cr_{19.0}Al_{6.0}$  合金沉淀过程的情形. 从图 1(a) 可以看出, 时间步数为 10000 时, 无序基体中开始析出有序相, 从其结构可以判断该析出相为  $DO_{22}$  相. 随着时效的进行,  $DO_{22}$  相开始长大, 并且在反相畴界处 Al 原子开始偏聚, 析出  $L1_2$  相. 在沉淀过程中, 由于 Cr 原子的扩散, 部分  $DO_{22}$  相向  $L1_2$  相转变 (如图 1(b) 和 (c) 中箭头所指). 最终形成  $L1_2$  和  $DO_{22}$  两相共存的组织, 如图 1(b) 和 (c) 所示. 图 1(d)—(f) 和图 1(g)—(i) 分别是  $Ni_{75}Cr_{18.5}Al_{6.5}$  和  $Ni_{75}Cr_{18.0}Al_{7.0}$  合金的沉淀过程原子形貌演化图. 由此可以看出, 其演化过程与前一种合金类似, 也是先析出  $DO_{22}$  相, 随后析出  $L1_2$  相, 不同的是两相的形貌和数量有所不同.

由于沉淀过程中 Al 原子和 Cr 原子综合浓度 (integrated intensity) 的变化<sup>[14]</sup>, Cr 原子取代 Al 原子位置, 使部分  $DO_{22}$  相转变为  $L1_2$  相, 并与原来析出的  $L1_2$  结构的  $Ni_3Al$  共同形成  $L1_2$  相, 而在富 Cr 区, 仍然保留原来  $DO_{22}$  结构的  $Ni_3Cr$  相. 从晶体学角度看,  $DO_{22}$  结构属于  $L1_2$  结构的衍生有序结构, 二者较易互相转换<sup>[16]</sup>. 文献 [17, 18] 通过实验指出,  $DO_{22}$  结构是由  $L1_2$  结构转化而来,  $Ni_3Cr$  相结构为  $DO_{22}$ .

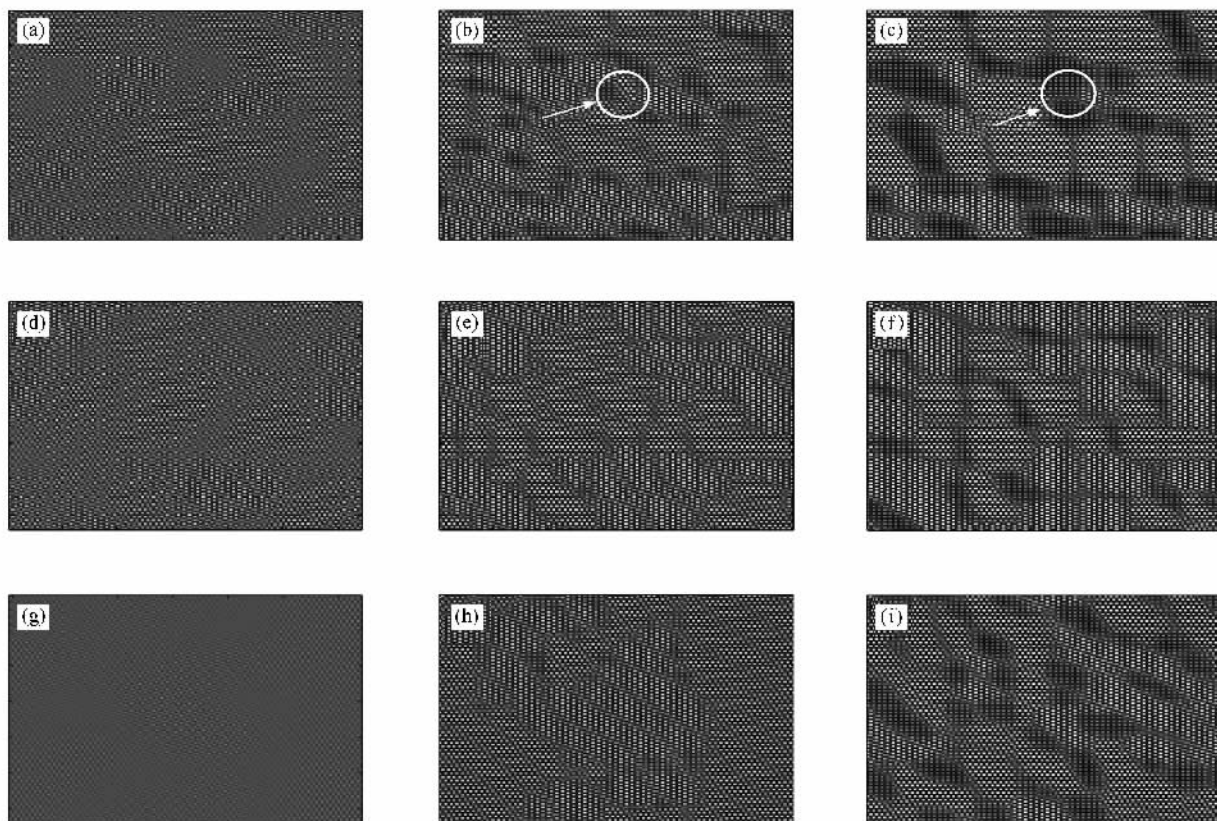


图1 当  $x < 7.5$  时,  $\text{Ni}_{75}\text{Cr}_{25-x}\text{Al}_x$  合金沉淀过程原子形貌演化图 (a)  $x = 6.0, t = 10000$  步, (b)  $x = 6.0, t = 20000$  步, (c)  $x = 6.0, t = 50000$  步, (d)  $x = 6.5, t = 10000$  步, (e)  $x = 6.5, t = 25000$  步, (f)  $x = 6.5, t = 50000$  步 (g)  $x = 7.0, t = 10000$  步, (h)  $x = 7.0, t = 20000$  步, (i)  $x = 7.0, t = 65000$  步

形核孕育期的作用是等待临界晶核的形成,亦即等待出现适当的能量起伏和浓度起伏,以满足形成一定尺寸晶核的要求.孕育期可以通过平均序参数得到.平均成分偏离序参数可通过对局部成分序参数与初始值的偏离取绝对平均得到.平均长程序参数可通过局部长程序参数取绝对平均得到.长程序参数和成分偏离序参数均为零的阶段为沉淀孕育期,此时基体中没有新相形成.

图 2 (a) 和 (b) 给出了  $\text{Ni}_{75}\text{Cr}_{19.0}\text{Al}_{6.0}$ ,  $\text{Ni}_{75}\text{Cr}_{18.5}\text{Al}_{6.5}$  和  $\text{Ni}_{75}\text{Cr}_{18.0}\text{Al}_{7.0}$  合金中  $\text{D}_{022}$  相的平均长程序参数和平均成分偏离序参数随时间的演化.曲线的演化趋势大概分为以下三个阶段:第一阶段是两者均为零的阶段,对应于孕育期;第二阶段是平均序参数快速上升期,对应于原子簇聚和有序化快速增长阶段;第三阶段是平均序参数缓慢上升期,对应于放慢的原子簇聚和有序化阶段,原因是距离平衡态越近,相变的驱动力越小.

从图 2 可以看出,  $\text{Ni}_{75}\text{Cr}_{19.0}\text{Al}_{6.0}$  合金中的  $\text{D}_{022}$  相大概在 3200 步时从无序基体中析出,  $\text{Ni}_{75}\text{Cr}_{18.5}\text{Al}_{6.5}$

合金中的  $\text{D}_{022}$  相大概在 3600 步时析出,  $\text{Ni}_{75}\text{Cr}_{18.0}\text{Al}_{7.0}$  合金中的  $\text{D}_{022}$  相大概在 4500 步时析出,即随着 Al 浓度的增大,先析出的  $\text{D}_{022}$  相的孕育期延长.

图 3 (a) 和 (b) 给出了  $\text{Ni}_{75}\text{Cr}_{19.0}\text{Al}_{6.0}$ ,  $\text{Ni}_{75}\text{Cr}_{18.5}\text{Al}_{6.5}$  和  $\text{Ni}_{75}\text{Cr}_{18.0}\text{Al}_{7.0}$  合金中  $\text{L}_{12}$  相的平均长程序参数和平均成分偏离序参数随时间的演化.曲线的演化趋势与  $\text{D}_{022}$  相类似,随着 Al 含量的增大,  $\text{L}_{12}$  相的孕育期反而有所延长.

当 Al 浓度小于 7.5% 时,先析出相为  $\text{D}_{022}$  相, Al 含量的增加抑制了  $\text{D}_{022}$  相的析出,使整个系统的稳定性增强,从而使整个沉淀体系保持成分均匀的时间延长,延长的幅度超过了 Al 含量增加对  $\text{L}_{12}$  相孕育期促进的幅度,所以整体上使后析出的  $\text{L}_{12}$  相的孕育期也延长.

### 3.2. Al 浓度等于 7.5% 时的情形

图 4 为  $\text{Ni}_{75}\text{Cr}_{17.5}\text{Al}_{7.5}$  合金沉淀过程原子形貌演化图.从图 4 可以看出,时间步数为 7500 时,基体中

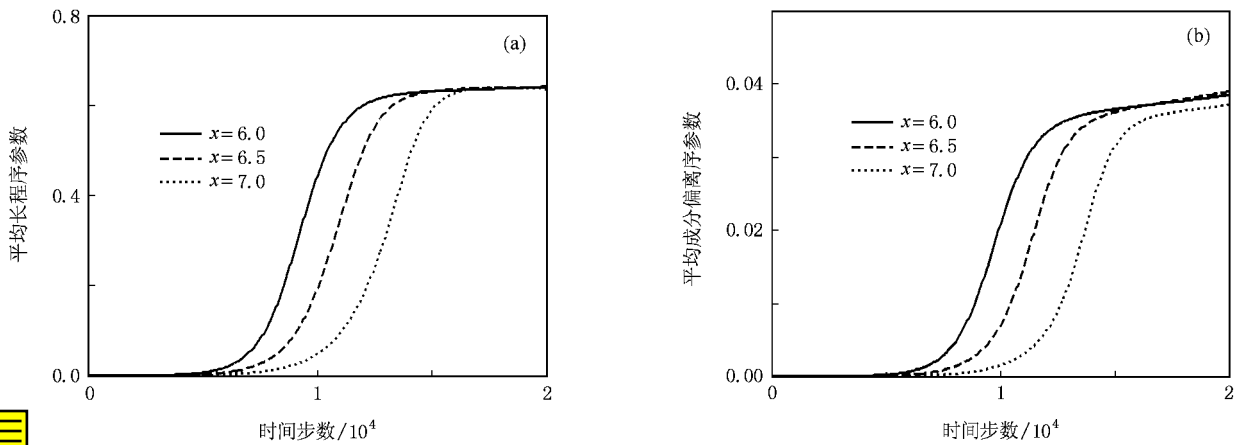


图 2 当  $x < 7.5$  时,  $\text{Ni}_{75}\text{Cr}_{25-x}\text{Al}_x$  合金中  $\text{DO}_{22}$  相平均长程序参数和平均成分偏离序参数随时间的变化 (a) 平均长程序参数, (b) 平均成分偏离序参数

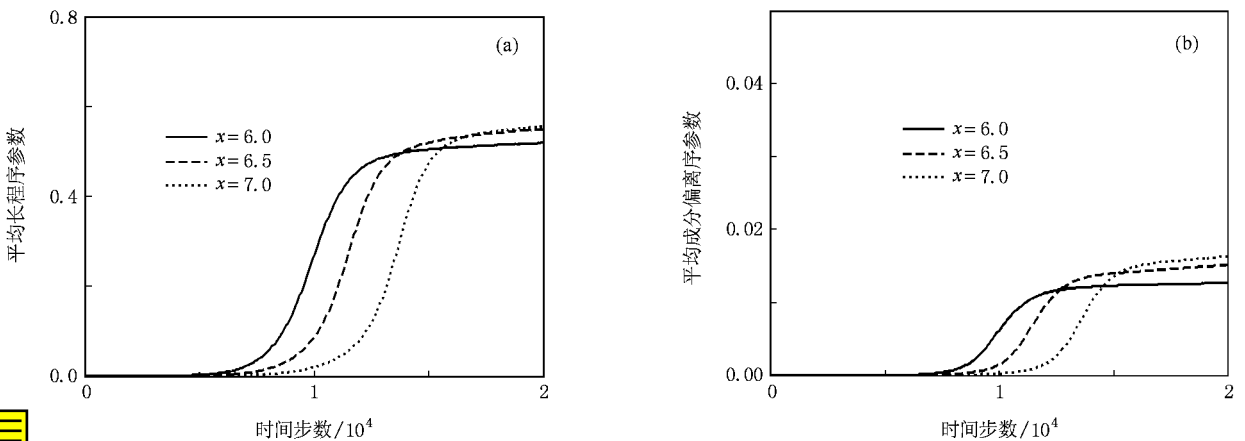


图 3 当  $x < 7.5$  时,  $\text{Ni}_{75}\text{Cr}_{25-x}\text{Al}_x$  合金中  $\text{L}_{12}$  相平均长程序参数和平均成分偏离序参数随时间的变化 (a) 平均长程序参数, (b) 平均成分偏离序参数

已经出现了微小的成分波动, 随着时效的进行, 原子在各个格点的占位概率进一步提高, 从原子排列方式看, 此时基体中的沉淀相既有  $\text{L}_{12}$  相, 又有  $\text{DO}_{22}$  相, 二者几乎同时析出. 之后, 沉淀相进一步长大, 如图 4(b) 和 (c) 所示.

图 5 给出了  $\text{Ni}_{75}\text{Cr}_{17.5}\text{Al}_{7.5}$  合金中  $\text{L}_{12}$  相和  $\text{DO}_{22}$

相平均长程序参数和平均成分序参数随时间的演化. 从图 5 可以看出, 沉淀开始的时候, 两相的序参数几乎重叠在一起, 序参数保持为零的时间基本相同, 说明两相的孕育期几乎完全相同. 之后序参数开始上升, 并出现了分歧和交叉现象, 说明在随后的形核和长大过程中, 两相的行为并不完全相同.



图 4  $\text{Ni}_{75}\text{Cr}_{17.5}\text{Al}_{7.5}$  合金沉淀过程原子形貌演化图 (a)  $t = 7500$  步, (b)  $t = 20000$  步, (c)  $t = 60000$  步

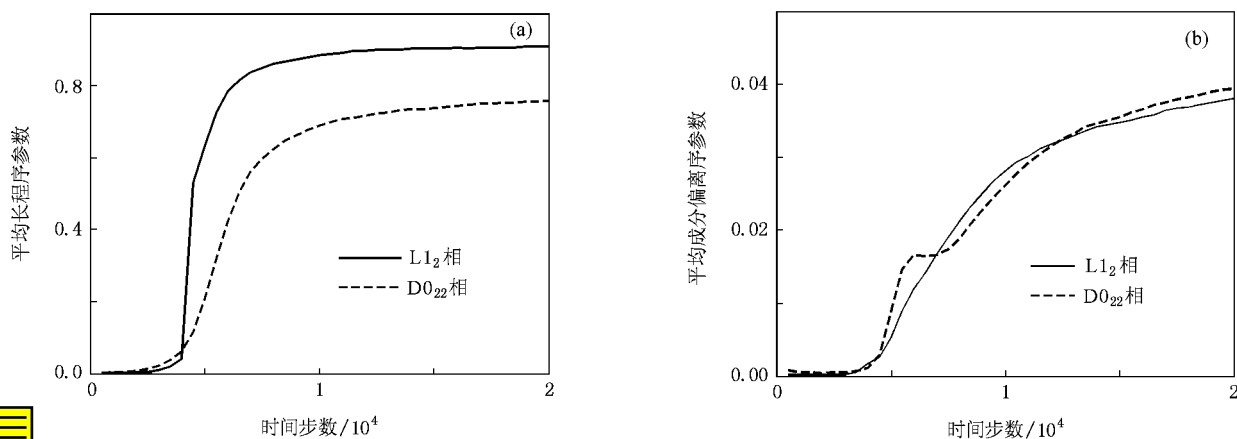


图5  $\text{Ni}_{75}\text{Cr}_{17.5}\text{Al}_{7.5}$  合金沉淀过程平均长程序参数和平均成分偏离序参数随时间的变化 (a)平均长程序参数,(b)平均成分偏离序参数

### 3.3. Al 浓度大于 7.5% 时的情形

图6为Al浓度大于7.5%时合金沉淀过程中原子形貌的演化.图6(a)~(c)为 $\text{Ni}_{75}\text{Cr}_{17.0}\text{Al}_{8.0}$ 合金沉淀过程的情形.从图6(a)可以看出,在时间步数为7000时,基体中出现了小岛状的沉淀相,小岛与小岛之间被无序界面隔开.随着时效的进行,无序界面

的厚度变窄,其所包围的有序相格点原子占位概率增大,可以看出先析出的沉淀相为 $\text{L}_{12}$ 相,随后在 $\text{L}_{12}$ 相的边界处开始析出 $\text{D}_{022}$ 相,如图6(b)和(c)所示.图6(d)~(f)和(g)~(i)分别是 $\text{Ni}_{75}\text{Cr}_{16.0}\text{Al}_{9.0}$ 和 $\text{Ni}_{75}\text{Cr}_{14.5}\text{Al}_{10.5}$ 合金沉淀过程的情形.由此可以看出,沉淀开始时基体中也出现了小岛状的沉淀相,与 $\text{Ni}_{75}\text{Cr}_{17.0}\text{Al}_{8.0}$ 合金不同的是,沉淀相开始析出的时

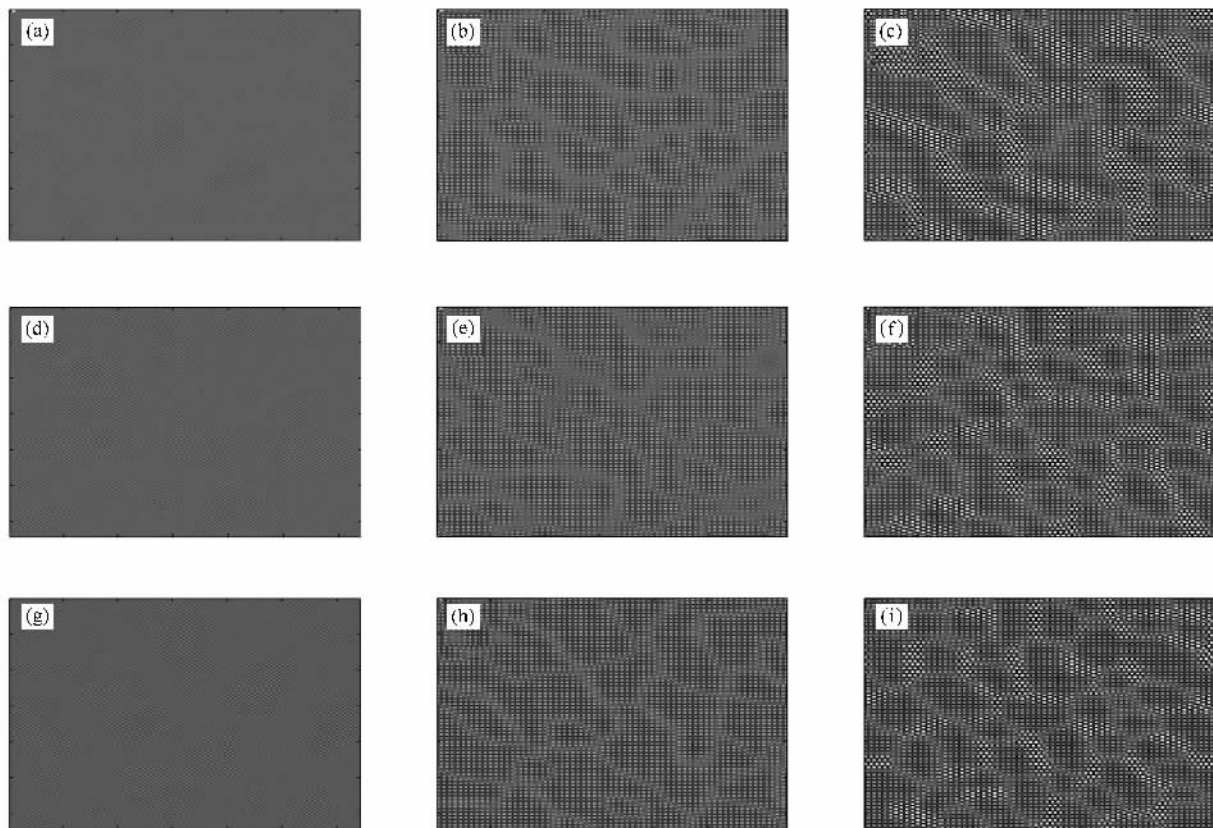


图6 当  $x > 7.5$  时,  $\text{Ni}_{75}\text{Cr}_{25-x}\text{Al}_x$  合金沉淀过程原子形貌演化图 (a)  $x = 8.0, t = 7000$  步, (b)  $x = 8.0, t = 9000$  步, (c)  $x = 8.0, t = 30000$  步, (d)  $x = 9.0, t = 5000$  步, (e)  $x = 9.0, t = 9000$  步, (f)  $x = 9.0, t = 20000$  步, (g)  $x = 10.5, t = 3500$  步, (h)  $x = 10.5, t = 8000$  步, (i)  $x = 10.5, t = 20000$  步

间、数量和形貌有所不同。

图 7 (a) 和 (b) 给出了  $\text{Ni}_{75}\text{Cr}_{17.0}\text{Al}_{8.0}$ 、 $\text{Ni}_{75}\text{Cr}_{16.0}\text{Al}_{9.0}$  和  $\text{Ni}_{75}\text{Cr}_{14.5}\text{Al}_{10.5}$  合金中  $\text{L}_{12}$  相的平均长程序参数和平均成分偏离序参数随时间的演化. 从图 7 可以看出, 随着 Al 浓度的增大,  $\text{L}_{12}$  相的孕育期缩短.

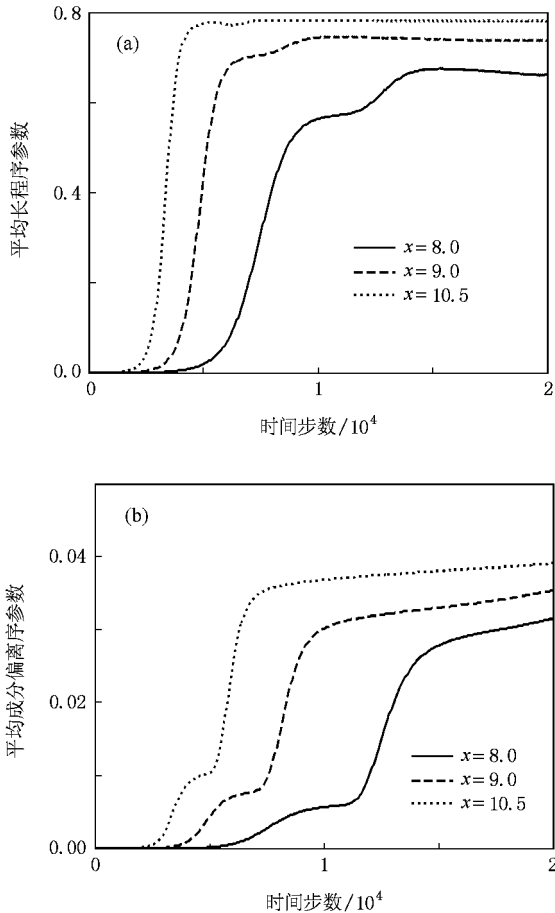


图 7 当  $x > 7.5$  时,  $\text{Ni}_{75}\text{Cr}_{25-x}\text{Al}_x$  合金中  $\text{L}_{12}$  相平均长程序参数和平均成分偏离序参数随时间的变化 (a) 平均长程序参数, (b) 平均成分偏离序参数

图 8 (a) 和 (b) 给出了  $\text{Ni}_{75}\text{Cr}_{17.0}\text{Al}_{8.0}$ 、 $\text{Ni}_{75}\text{Cr}_{16.0}\text{Al}_{9.0}$  和  $\text{Ni}_{75}\text{Cr}_{14.5}\text{Al}_{10.5}$  合金中  $\text{DO}_{22}$  相的平均长程序参数和平均成分偏离序参数随时间的演化. 从图 8 可以看出, 曲线变化趋势与该浓度下  $\text{L}_{12}$  相的变化趋势相似. 随着 Al 浓度的增大,  $\text{DO}_{22}$  相的孕育期也在缩短. 这是由于当先析出相为  $\text{L}_{12}$  相时, Al 含量的增加促进了  $\text{L}_{12}$  相的析出, 从而使整个沉淀体系保持成分均匀的时间缩短, 缩短的幅度大于其对  $\text{DO}_{22}$  相孕育期抑制的幅度, 所以整体上使后析出的  $\text{DO}_{22}$  相的孕育期也缩短.

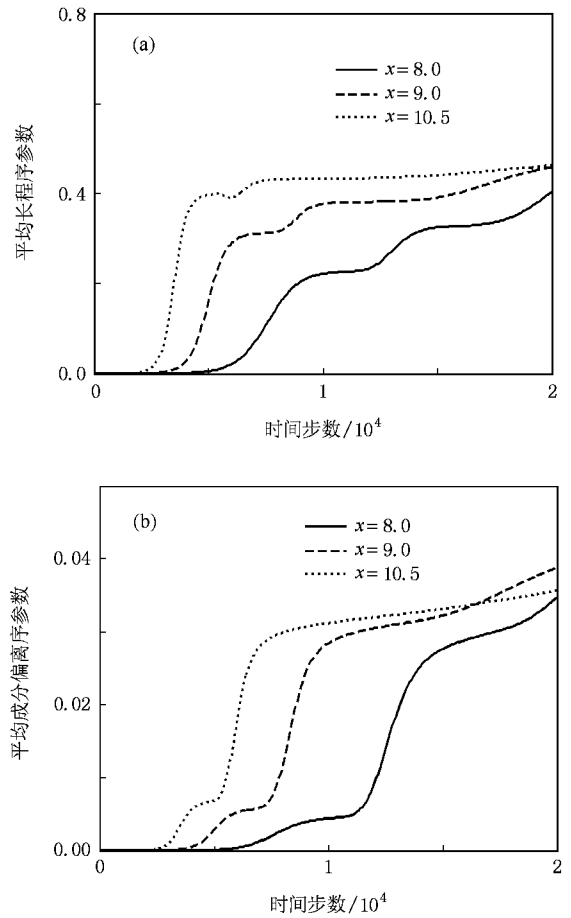


图 8 当  $x > 7.5$  时,  $\text{Ni}_{75}\text{Cr}_{25-x}\text{Al}_x$  合金中  $\text{DO}_{22}$  相平均长程序参数和平均成分偏离序参数随时间的变化 (a) 平均长程序参数, (b) 平均成分偏离序参数

对于 Ni-Cr-Al 合金, 当 Al 浓度较低时, 沉淀体系中先析出相为  $\text{DO}_{22}$  相, 此时随着 Al 浓度的增大,  $\text{DO}_{22}$  相的沉淀机制由等成分有序化和失稳分解机制逐渐向非经典形核长大和失稳分解的混合机制过渡, 从而使得其孕育期延长. 随着 Al 浓度的进一步增大, 先析出相转化为  $\text{L}_{12}$  相,  $\text{L}_{12}$  相的沉淀由开始时的非经典形核长大机制逐渐向非经典形核长大和失稳分解的混合机制过渡, 从而使得其孕育期缩短.

## 4. 结 论

本文运用微观相场动力学模型, 对 Ni-Cr-Al 合金早期沉淀过程的原子图像演化、沉淀序列、孕育期等进行了研究. 通过分析平均成分偏离序参数、平均长程序参数和原子图像, 得出如下结论: (1) Ni-Cr-Al 合金中  $\text{L}_{12}$  相和  $\text{DO}_{22}$  相形核孕育期不仅与合金的浓



度有关,而且与沉淀相的析出顺序密切相关。(2)当 Al 浓度小于 7.5% 时,先析出相为  $\text{D}_{0_{22}}$  相,随着 Al 浓度的增大, $\text{D}_{0_{22}}$  相形核孕育期延长,后析出的  $\text{L}_{1_2}$  相的形核孕育期也延长。(3)当 Al 浓度大于 7.5% 时,

先析出相为  $\text{L}_{1_2}$  相,随着 Al 浓度的增大, $\text{L}_{1_2}$  相的形核孕育期缩短,后析出的  $\text{D}_{0_{22}}$  相形核孕育期也缩短。(4)当 Al 浓度等于 7.5% 时, $\text{L}_{1_2}$  和  $\text{D}_{0_{22}}$  两相几乎同时析出,两相的形核孕育期没有明显的差别。

- 
- [ 1 ] Soisson F ,Martin G 2000 *Phys. Rev. B* **62** 203
- [ 2 ] Bos C ,Sietsma J ,Thijssse B J 2006 *Phys. Rev. B* **73** 104117
- [ 3 ] Clouet E ,Nastar M 2004 *Phys. Rev. B* **69** 064109
- [ 4 ] Yin Z M ,Pan Q L ,Zhang Y H ,Feng J 2000 *Mater. Sci. Eng. A* **280** 151
- [ 5 ] Robson J D 2004 *Acta Mater.* **52** 4669
- [ 6 ] Castro M 2003 *Phys. Rev. B* **67** 035412
- [ 7 ] Kessler M ,Dieterich W ,Majhofer A 2003 *Phys. Rev. B* **67** 134201
- [ 8 ] Khachaturyan A G 1983 *Theory of Structural Transformation in Solids* ( New York : Wiley ) p139
- [ 9 ] Chen L Q ,Khachaturyama A G 1991 *Acta Metall. Mater.* **39** 2533
- [ 10 ] Chen L Q ,Khachaturyama A G 1991 *Phys. Rev. B* **44** 4681
- [ 11 ] Poduri R ,Chen L Q 1998 *Acta Mater.* **46** 1719
- [ 12 ] Chu Z ,Chen Z ,Wang Y X ,Lu Y L ,Li Y S 2006 *Rare Met. Mater. Eng.* **35** 242 ( in Chinese ) [ 褚 忠、陈 铮、王永欣、卢艳丽、李永胜 2006 稀有金属材料与工程 **35** 242 ]
- [ 13 ] Li X L ,Chen Z ,Wang Y X 2006 *Rare Met. Mater. Sci. Eng.* **35** 352
- [ 14 ] Pareige C ,Soisson F ,Martin G ,Blavette D 1999 *Acta Mater.* **47** 1889
- [ 15 ] Soffa W A ,Laughlin D E 1989 *Acta Met.* **37** 3019
- [ 16 ] Dupin N ,Ansara I ,Sundman B 2001 *Calphad* **25** 279
- [ 17 ] Menand A ,Cadel E ,Pareige C ,Blavette D 1999 *Ultramicroscopy* **78** 63
- [ 18 ] Duval S ,Chambrland S ,Caron P 1994 *Acta Metall. Mater.* **42** 185

# Microscopic phase field simulation on the nucleation incubation period of $L1_2$ and $D0_{22}$ phases in $Ni_{75}Cr_{25-x}Al_x$ alloy<sup>\*</sup>

Lu Yan-Li<sup>†</sup> Chen Zheng Lai Qing-Bo Zhang Jing

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

( Received 30 December 2008 ; revised manuscript received 17 January 2009 )

## Abstract

Based on the microscopic phase field dynamic model , the effect of Al concentration on the nucleation incubation period of  $Ni_{75}Cr_{25-x}Al_x$  alloy and the relation between the incubation period and the precipitation sequence are investigated by using the atomic pictures , averaged long-range order parameters and averaged composition deviation order parameters. The simulation results show that the nucleation incubation periods of  $L1_2$  and  $D0_{22}$  phases are related not only to the Al concentration but also to the precipitation sequence. When the Al concentration is smaller than 7.5% , for the  $D0_{22}$  phase first precipitated from the matrix , its nucleation incubation period becomes longer with the increase of Al concentration , and so is the  $L1_2$  phase subsequently precipitated. When the Al concentration is larger than 7.5% , for the  $L1_2$  phase first precipitated from the matrix , its nucleation incubation period become shorter with the increase of Al concentration , so is for the  $D0_{22}$  phase subsequently precipitated. When the Al concentration is equal to 7.5% ,  $L1_2$  and  $D0_{22}$  phases both precipitate almost simultaneously , and there is no obvious difference between their nucleation incubation periods.

**Keywords** : nucleation incubation period , order parameters , precipitation , microscopic phase field simulation

**PACC** : 8130M , 6470K , 6150K

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China ( Grant Nos. 50071046 , 50875217 ) , the Science Foundation for Postdoctor of China ( Grant Nos. 20070420218 , 200801437 ) and the Natural Science Foundation of Shaanxi Province , China ( Grant No. SJ08-ZT05 ).

<sup>†</sup> E-mail : luyanli@nwpu.edu.cn