



相场法研究Fe-Cu-Mn-Al合金富Cu相析出机制

郭震 赵宇宏 孙远洋 赵宝军 田晓林 侯华

Phase field study of effect of Al on Cu-rich precipitates in Fe-Cu-Mn-Al alloys

Guo Zhen Zhao Yu-Hong Sun Yuan-Yang Zhao Bao-Jun Tian Xiao-Lin Hou Hua

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 70, 086401 (2021) DOI: 10.7498/aps.70.20201843

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201843>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

$\text{Ni}_{60}\text{Al}_{20}\text{V}_{20}$ 中熵合金沉淀过程微扩散相场法模拟

Microscopic phase-field simulation for precipitation process of $\text{Ni}_{60}\text{Al}_{20}\text{V}_{20}$ medium entropy alloy

物理学报. 2020, 69(14): 140201 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200154>

第一性原理研究Al-Cu-Li合金中T1相的腐蚀机理

Corrosion mechanism of T1 phase in Al-Cu-Li alloy: First-principles calculations

物理学报. 2020, 69(2): 027101 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191365>

Fe基体中包含Cu团簇的Fe-Cu二元体系在升温过程中结构变化的原子尺度计算

Atomic-scale simulation study of structural changes of Fe-Cu binary system containing Cu clusters embedded in the Fe matrix during heating

物理学报. 2017, 66(8): 086301 <https://doi.org/10.7498/aps.66.086301>

电磁悬浮条件下液态Fe50Cu50合金的对流和凝固规律研究

Fluid convection and solidification mechanisms of liquid Fe50Cu50 alloy under electromagnetic levitation condition

物理学报. 2017, 66(13): 136401 <https://doi.org/10.7498/aps.66.136401>

浓度相关的扩散系数对定向凝固枝晶生长的影响

Effect of concentration-dependent diffusion coefficient on dendrite growth in directional solidification

物理学报. 2019, 68(16): 166401 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190603>

时效Ag-7wt.%Cu合金的微观组织、电阻率和硬度

Microstructure, resistivity, and hardness of aged Ag-7wt.%Cu alloy

物理学报. 2017, 66(2): 027401 <https://doi.org/10.7498/aps.66.027401>

相场法研究 Fe-Cu-Mn-Al 合金富 Cu 相析出机制*

郭震 赵宇宏[†] 孙远洋 赵宝军 田晓林 侯华

(中北大学材料科学与工程学院, 太原 030051)

(2020 年 11 月 4 日收到; 2020 年 12 月 23 日收到修改稿)

基于 Ginzburg-Landau 理论采用连续相场法模拟了 Fe-15%Cu-3%Mn- x Al(质量分数 $x = 1\%$, 3% , 5%) 合金在 873 K 等温时效时纳米富 Cu 析出相沉淀机制及 Al 含量对富 Cu 相析出的阻碍效应. 通过计算成分场变量和结构序参数, 研究了富 Cu 析出相的形貌、颗粒密度、平均颗粒半径、生长和粗化动力学. 研究表明: 在时效早期阶段, 纳米富 Cu 相通过失稳分解机制析出, 由于原子扩散速率存在差异, 从而形成以富 Cu 相为核心的核壳结构. 随着时效时间延长, 富 Cu 相析出物结构由体心立方转变为面心立方. 其中 Al 和 Mn 原子在富 Cu 核外偏析形成 Al/Mn 簇, 可以将其视为阻碍富 Cu 析出相形成的缓冲层; 在沉淀过程中, 随着 Al 含量的增大, Al/Mn 金属间相促进了缓冲层的生长, 阻碍富 Cu 析出相的生长和粗化.

关键词: 相场法, Fe-Cu 合金, 富 Cu 析出相, 沉淀动力学**PACS:** 64.60.-I, 64.60.qe, 64.70.Nd**DOI:** 10.7498/aps.70.20201843

1 引言

核反应堆压力容器 (reactor pressure vessel, RPV) 是核电站唯一不可更换设备, 在高中子辐照下会析出大量纳米富 Cu 相 (Cu-rich precipitate, CRP), 可作为其他相形核中心, 导致 RPV 钢发生脆化, 影响其使用寿命^[1-6]. 研究发现, 通过添加不同合金元素 (Mn, Ni, Al 等), 可有效调节沉淀相微观结构, 以获得材料的最佳性能^[7,8]. Wen 等^[9]发现, 添加 Ni, Mn 和 Al 元素会影响富 Cu 相析出及有序 B2-Ni(Al, Mn) 壳的形成, B2 壳可缓和应变并阻止富 Cu 沉淀相与体心立方 Fe(bcc-Fe) 基体之间的相互扩散, 导致沉淀相粗化率降低. Miller 等^[10]研究发现, 与 Fe-Cu 合金中相比, Fe-Cu-

Mn 合金中析出相数量更多, 尺寸更小. Osamura 等^[11]研究表明, Fe-Cu 合金中添加 Mn 和 Ni 元素, 富 Cu 沉淀物周围形成了富集 Ni 和 Mn 的偏析层, 可促进富 Cu 相的沉淀反应. Shen 等^[12,13]发现, 在峰值硬度下, Fe-Cu-Ni-Al 合金中析出物由富 Cu 核与 NiAl 壳结构组成. NiAl 壳层可降低界面能及壳层中 Cu, Ni 和 Al 原子扩散速率, 阻止富 Cu 相生长和粗化. 随着时效时间延长, 核壳分解形成新的富 Cu 相和 NiAl 相, 这与 Wen 等^[9]和 Vaynman 等^[14]的核壳纳米结构机制相似. 迄今为止, 针对 Al, Mn 的添加如何影响富 Cu 相析出的详细机理尚不完全清楚, 有必要进一步研究 Fe-Cu-Mn-Al 合金中富 Cu 相析出机制及 Al 含量影响.

本工作基于课题组前期工作^[15-19], 采用相场法 (PFM)^[20-25], 耦合相图计算 (calculation of

* 国家自然科学基金 (批准号: 22008224, 52074246, 51774254, 51774253, 51804279, 51801189)、中央引导地方科技发展专项资金项目 (批准号: YDZX20191400002796)、山西省科技重大专项 (批准号: 20181101014, 20191102008, 20191102007)、山西省平台基地和人才专项 (批准号: 201805D211036)、山西省科技成果转化引导专项 (批准号: 201804D131039)、山西省青年科技研究基金 (批准号: 201801D221152) 和装备预研领域基金重点项目 (批准号: 61409230407) 资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: zhaoyuhong@nuc.edu.cn

phase diagram, CALPHAD) 方法导出的热力学数据 [26], 建立了 Fe-Cu-Mn-Al 合金相场模型, 模拟时效过程相分离和沉淀相形态演化, 讨论了 Al 含量对富 Cu 析出相的形貌、颗粒密度、平均颗粒半径、生长和粗化的影响规律.

2 相场控制方程

非线性成分守恒场变量的 Cahn-Hilliard 扩散方程 (1) 和结构序参数非守恒场变量的 Allen-Cahn 弛豫方程 [27](2) 为

$$\frac{\partial c_i(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \nabla \cdot \left\{ M_i \cdot \nabla \frac{\partial F}{\partial c_i(\mathbf{r}, t)} \right\} + \xi_{c_i}(\mathbf{r}, t), \quad (1)$$

$$\frac{\partial \eta(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -L_\eta \frac{\partial F}{\partial \eta(\mathbf{r}, t)} + \xi_\eta(\mathbf{r}, t), \quad (2)$$

局域成分场变量 $c_i(\mathbf{r}, t)$ ($i = 1, 2, 3, 4$, 分别代表 Fe, Cu, Mn, Al), 其中 $c_1 = 1 - c_2 - c_3 - c_4$. 结构序参量 $\eta(\mathbf{r}, t)$ 表示在空间坐标 \mathbf{r} 和时间 t 下 α 相 (bcc 结构) 和 γ 相 (面心立方 (fcc) 结构) 的结构转变情况, 通常取 $0 < \eta < 1$, $\eta = 0$ 表示 bcc 结构, $\eta = 1$ 表示 fcc 结构; $\xi_{c_i}(\mathbf{r}, t)$ 和 $\xi_\eta(\mathbf{r}, t)$ 是 Gauss 噪声项; L_η 是表征相结构转变的动力学系数; M_i 是原子扩散迁移率:

$$M_i(\eta, T) = c_{0i}(1 - c_{0i}) \times \left[(1 - \eta) \frac{D_i^\alpha(T)}{RT} + \eta \frac{D_i^\gamma(T)}{RT} \right], \quad (3)$$

式中, R 为气体摩尔常数, $8.314 \text{ J}/(\text{mol} \cdot \text{K})$; T 是热力学温度; c_{0i} 表示合金元素 i 的初始成分; $D_i^\alpha(T)$ 和 $D_i^\gamma(T)$ 分别为合金元素 i 在 bcc 结构和 fcc 结构中的互扩散系数:

$$D_i^\varphi(T) = D_i^{0,\varphi}(T) \exp\left(\frac{-Q_i^{0,\varphi}}{RT}\right), \quad (4)$$

式中, φ 表示 α 或 γ 相; $D_i^{0,\varphi}(T)$ 是合金元素 i 在 φ 相中的自扩散系数; $Q_i^{0,\varphi}$ 是合金元素 i 在 φ 相中的热扩散激活能 [28].

微观结构演化驱动力来自于自由能降低, 系统总自由能 F 为 [29]

$$F = \int \left\{ [1 - h(\eta)] [G^\alpha(c_i(\mathbf{r}, t), T) + YV_m \varepsilon_0^2(c_i)] + h(\eta) G^\gamma(c_i(\mathbf{r}, t), T) + Wg(\eta) + \frac{1}{2} \sum k_c (\nabla c_i)^2 + \frac{1}{2} \sum k_\eta (\nabla \eta)^2 \right\} dV, \quad (5)$$

式中, $\frac{1}{2} \sum k_c (\nabla c_i)^2$ 和 $\frac{1}{2} \sum k_\eta (\nabla \eta)^2$ 分别是成分和结构的梯度能函数, k_c 和 k_η 分别是成分和结构的梯度能量系数; $h(\eta)$ 和 $g(\eta)$ 是无量纲插值函数 [29], 其作用是限制结构序参数取值在 $[0, 1]$ 内, $h(\eta) = \eta^2(3 - 2\eta)$, $g(\eta) = \eta(1 - \eta)$; W 是双势阱高度, 通常取正数; Y 和 V_m 分别是平均刚度系数和摩尔体积, $\varepsilon_0(c_i)$ 是由于晶格错配而引起的本征应变能:

$$\varepsilon_0(c_i) = \sum_{i=2}^4 \delta_i (c_i - c_{0i}), \quad (6)$$

式中, δ_i 是晶格错配系数, $\delta_i = (a_i - a_1)/a_i$; a_1 表示基体的晶格常数, a_i 是第 i 组分的晶格常数. 表 1 [16] 为模拟参数.

表 1 相场模型参数表 [16]

| Parameter | Value | Unit |
|--|---|--|
| k_c, k_η | $k_c = 5.0 \times 10^{-15}$, | $\text{J} \cdot \text{m}^2/\text{mol}$ |
| | $k_c = 1.0 \times 10^{-15}$ | |
| V_m | 7.09×10^{-6} | m^3/mol |
| T | 873 | K |
| Y | 214 | GPa |
| $L_x \times L_y \times L_z$ | $64 \times 64 \times 64$ | nm^3 |
| W | 5.0×10^3 | J/mol |
| $D_i^{0,\varphi} (\varphi = \alpha, \gamma)$ | $D_{\text{Cu}}^{0,\alpha} = 4.7 \times 10^{-5}$, | m^2/s |
| | $D_{\text{Cu}}^{0,\gamma} = 4.3 \times 10^{-5}$ | |
| | $D_{\text{Mn}}^{0,\alpha} = 1.49 \times 10^{-4}$, | |
| | $D_{\text{Mn}}^{0,\gamma} = 1.78 \times 10^{-5}$ | |
| | $D_{\text{Al}}^{0,\alpha [31]} = 5.35 \times 10^{-4}$, | |
| | $D_{\text{Al}}^{0,\gamma [31]} = 2.20 \times 10^{-5}$ | |
| $Q_i^{0,\varphi} (\varphi = \alpha, \gamma)$ | $Q_{\text{Cu}}^{0,\alpha} = 2.44 \times 10^5$, | J/mol |
| | $Q_{\text{Cu}}^{0,\gamma} = 2.80 \times 10^5$ | |
| | $Q_{\text{Mn}}^{0,\alpha} = 2.63 \times 10^5$, | |
| | $Q_{\text{Mn}}^{0,\gamma} = 2.64 \times 10^5$ | |
| | $Q_{\text{Al}}^{0,\alpha [31]} = 2.71 \times 10^5$, | |
| | $Q_{\text{Al}}^{0,\gamma [31]} = 2.67 \times 10^5$ | |

注: k_c, k_η , 梯度能量系数; V_m , 摩尔体积; T , 热力学温度; Y , 平均刚度系数; L_x, L_y, L_z , 沿 x, y, z 轴的模拟区域宽度; W , 双势阱高度; $D_i^{0,\varphi}$, 扩散系数; $Q_i^{0,\varphi}$, 热扩散激活能.

(5) 式中, $G^\alpha(c_i(\mathbf{r}, t), T)$ 和 $G^\gamma(c_i(\mathbf{r}, t), T)$ 分别代表 α 和 γ 相的 Gibbs 自由能, 是关于 $c_i(\mathbf{r}, t)$ 和 T 的函数, 其表达式为

$$G^\varphi(c_i(\mathbf{r}, t), T) = \sum_i G_i^\varphi c_i + RT \sum_i c_{iIn} c_i + \sum_i \sum_{j>i} L_{i,j}^\varphi c_i c_j + \sum_i \sum_{j>i} \sum_{k>j} L_{i,j,k}^\varphi c_i c_j c_k, \quad (7)$$

其中, G_i^φ 是纯 i 元素 Gibbs 自由能^[30]; $L_{i,j}^\varphi$ 和 $L_{i,j,k}^\varphi$ 是相互作用系数.

基于相场动力学方程, 将距离、时间、能量分别无量纲化为 $b = L/N$ (其中, L 为模拟宽度, N 为网格数)、 $t = \frac{b^2}{D_{Cu}^\alpha} t^*$ (其中 t^* 是无量纲时间)、 RT 形式. 模拟了 873 K 时, Fe-15%Cu-3%Mn-1%Al 合金中富 Cu 析出相的析出机制以及不同 Al 含量 ($x = 1\%, 3\%, 5\%$) 下富 Cu 析出相的动态演化规律.

3 计算结果与讨论

3.1 沉淀相微结构演化过程

图 1 为 Fe-15%Cu-3%Mn-1%Al 合金在 873 K 时效时的相分离三维原子演化图. 随着时效时间延长, 分别用 Fe (图 1(a1)—(d1))、Cu (图 1(a2)—(d2))、Mn (图 1(a3)—(d3))、Al (图 1(a4)—(d4)) 来表示富 Cu 相析出过程, 对应色标在右侧给出. 对比图 1(a1)—(a4), 初始阶段过饱和固溶体, 高斯噪声相影响导致在 α -Fe 基体中产生小的随机成分起伏, 此时富 Cu 相开始形核, 如图 1(a2) 中绿色斑点区域, 而 Ni 与 Mn 原子尚未看到明显变化. 表明此时体系由 α -Fe 基体和共格富 Cu 相组成. $t^* = 18500$ 时, 浓度波逐渐分解, 形成水滴状富 Cu 沉淀相, 分散在合金中. 同时, Mn, Al 开始出现成分起伏, 向富 Cu 相中心偏聚, 如图 1(b1)—(b4)

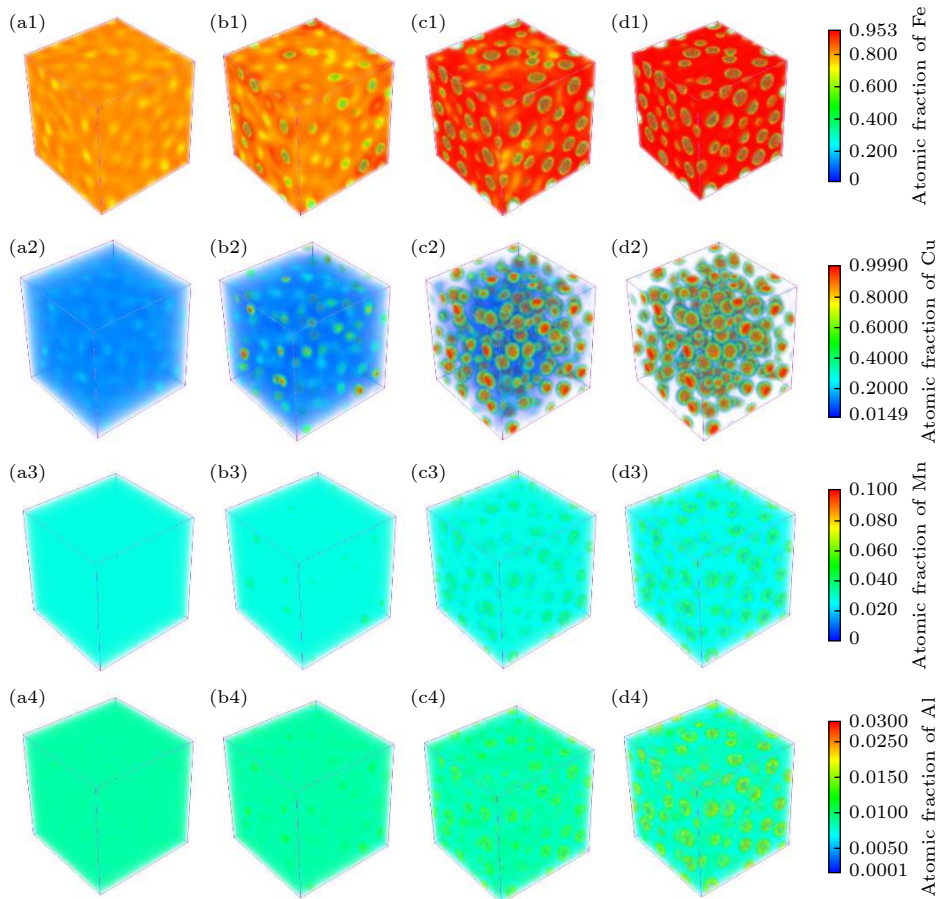


图 1 时效温度 873 K 时 Fe-15%Cu-3%Mn-1%Al 合金沉淀相三维演化相场模拟 (a1)—(a4) $t^* = 17000$; (b1)—(b4) $t^* = 18500$; (c1)—(c4) $t^* = 20000$; (d1)—(d4) $t^* = 22500$

Fig. 1. Three-dimensional phase-field simulation of precipitation phase of Fe-15%Cu-3%Mn-1%Al alloy when aged at 873 K: (a1)—(a4) $t^* = 17000$; (b1)—(b4) $t^* = 18500$; (c1)—(c4) $t^* = 20000$; (d1)—(d4) $t^* = 22500$.

所示. $t^* = 20000$ 时, 基体中球状富 Cu 相颗粒以 Ostwald 熟化机制进行粗化, 大颗粒长大、小颗粒消失. 同时, Mn, Al 从富 Cu 区域内扩散至富 Cu 相界面处, 这主要是由于富 Cu 相界面处存在较大共格畸变, 畸变大的区域易产生新的无畸变晶粒的核心, 导致 Mn, Al 在界面处聚集形成以富 Cu 相为核心, Mn, Al 为壳状物的核壳结构, 如图 1(a3)—(d3) 所示, 这与实验结果一致^[9].

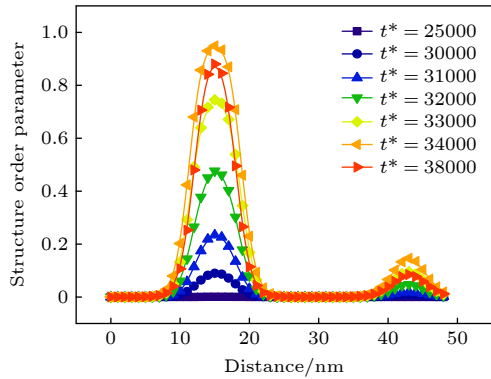


图 2 时效温度 873 K 时 Fe-15%Cu-3%Mn-1%Al 合金中富 Cu 相结构序参数演化曲线
Fig. 2. Evolution curves of Cu-rich phase structure order parameter in Fe-15%Cu-3%Mn-1%Al alloy when aged at 873 K.

图 2 为结构序参数随时间变化曲线, 其中 $\eta = 0$ 表示 bcc 结构, $\eta = 1$ 表示 fcc 结构. 当 $t^* = 25000$ 时, 结构序参数为零且基本未发生变化, 为 bcc 结构. 当 $t^* = 31000$ 时, 富 Cu 相结构序参数值达到 0.2 左右, 表明此时富 Cu 相开始由 bcc 向 fcc 转变. 当 $t^* = 33000$ 时, 结构序参数值超过 0.6, 表明此时富 Cu 相已基本转变为 fcc 结构.

3.2 Al 含量对富 Cu 相的影响

图 3 为时效温度为 873 K 时 Fe-15%Cu-3%Mn- x Al ($x = 1\%, 3\%, 5\%$) 合金三维富 Cu 相演化图. 对比图 3(a1)—(a3), $t^* = 21000$, $x = 1\%$ 时, 纳米富 Cu 相析出颗粒数量最多, $x = 3\%$ 次之, $x = 5\%$ 最少, 表明 Al 含量增大对抑制富 Cu 相的生长和粗化. B2 结构的 Al/Mn 相由于具有较小晶格失配, 降低 Fe 基体/富 Cu 相界面的界面能和晶格应变能而起缓冲层作用, 导致富 Cu 相生长缓慢. 因此 Cu, Mn 和 Al 原子通过 B2 结构 Al/Mn 相的扩散比通过 Fe 基体的扩散速率慢. 如图 3 所示, 在相同时效时间内, $x = 1\%$ 的富 Cu 析出相的颗粒尺寸始终大于 $x = 3\%$ 和 $x = 5\%$.

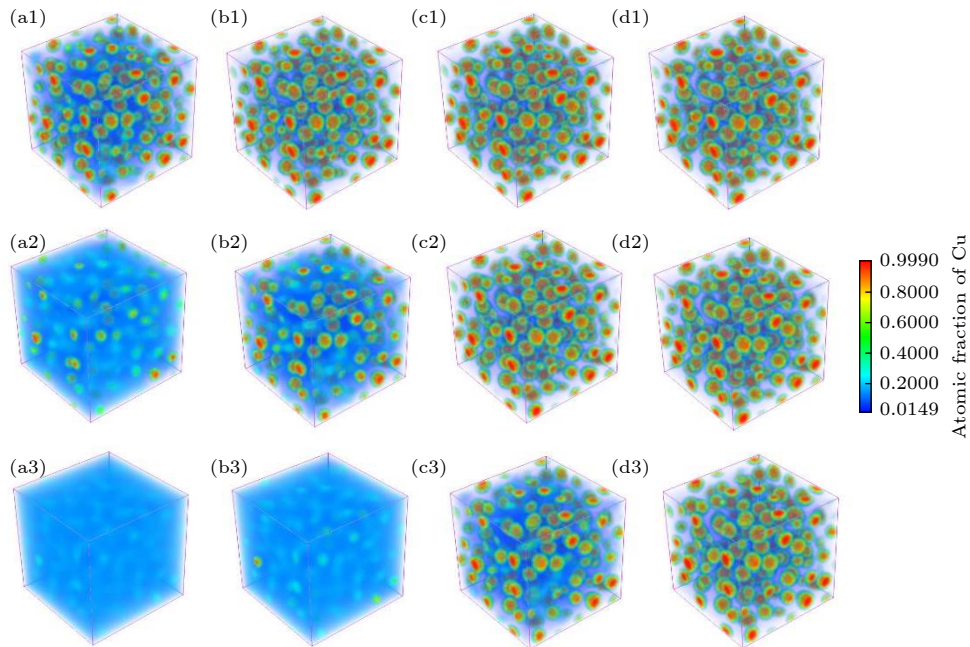


图 3 时效温度为 873 K 时 Fe-15%Cu-3%Mn- x Al 合金三维富 Cu 相演化相场模拟 (a1)—(d1) $x = 1\%$; (a2)—(d2) $x = 3\%$; (a3)—(d3) $x = 5\%$; (a1)—(a3) $t^* = 21000$; (b1)—(b3) $t^* = 22000$; (c1)—(c3) $t^* = 25000$
Fig. 3. Three dimensional evolution diagrams of Cu rich phase in quaternary alloy Fe-15%Cu-3%Mn- x Al alloy aged at 873 K: (a1)—(d1) $x = 1\%$; (a2)—(d2) $x = 3\%$; (a3)—(d3) $x = 5\%$; (a1)—(a3) $t^* = 21000$; (b1)—(b3) $t^* = 22000$; (c1)—(c3) $t^* = 25000$.

4 讨 论

时效温度 823 K 时, Fe-15%Cu-3%Mn- x Al ($x = 1\%, 3\%, 5\%$) 合金中富 Cu 析出相 Gibbs 自由能随时间变化曲线如图 4 所示, Gibbs 自由能在初始阶段几乎保持不变, 然后随时效时间延长呈下降趋势. 当 Al 含量为 1% 时合金 Gibbs 自由能高于 3% 和 5% 时的情况, 表明随 Al 含量增大, B2 结构 Al/Mn 壳层通过降低壳层中的 Cu, Mn 和 Al 原子的界面能和扩散速率, 富 Cu 相析出减缓, 析出所需自由能增多, Gibbs 自由能降低, 这与图 3 结果吻合. 在自由能下降阶段存在突起, 由于 Ostwald 机制, 富 Cu 析出相中小颗粒析出后分解, 释放能量 [3,15], 使 Gibbs 自由能曲线出现拐点, 形成突起. Al 含量越高, Gibbs 自由能曲线出现拐点时间越晚, 富 Cu 析出相中小颗粒分解时间越晚.

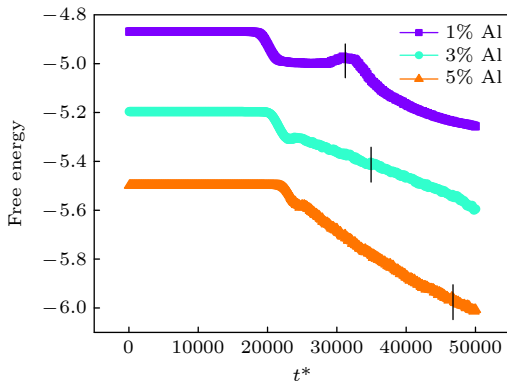


图 4 时效温度 873 K 时 Fe-15%Cu-3%Mn- x Al ($x = 1\%, 3\%, 5\%$) 合金 Gibbs 自由能随时间变化曲线

Fig. 4. Gibbs free energy curves in Fe-15%Cu-3%Mn- x Al ($x = 1\%, 3\%, 5\%$) alloy when aged at 873 K.

图 5 为时效温度 873 K 时, Fe-15%Cu-3%Mn- x Al ($x = 1\%, 3\%, 5\%$) 合金中富 Cu 析出相颗粒密度随时间变化曲线. 在时效初期失稳阶段, 颗粒密度迅速增加, 然后在 Al 含量分别为 1%, 3%, 5% 条件下, 富 Cu 相颗粒密度分别在 $t^* = 23800, 25900, 29300$ 开始降低. 这是 Al, Mn 的加入, 降低的界面能和弹性应变能, 升高的化学成分驱动力造成了析出相所需的临界形核能量降低, 符合 Mn 和 Al 可以提高富 Cu 相的成核速率这一事实 [15]. Fe-15%Cu-3%Mn- x Al 合金中 Al 含量越高, 富 Cu 析出相数量越少, 即 Al 含量越高, 越促进 Mn 原子在靠近富 Cu 析出相界面处偏析, 形成核壳结构,

从而降低了富 Cu 析出相生长和粗化速率, 这与图 3 结果一致.

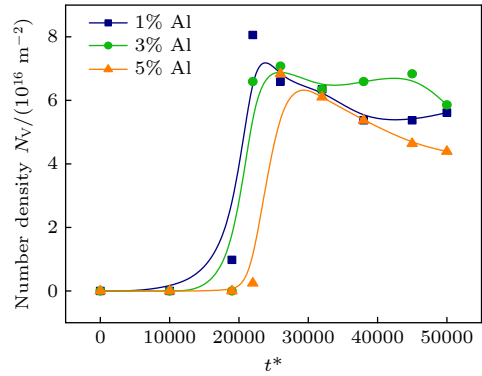


图 5 时效温度 873 K 时 Fe-15%Cu-3%Mn- x Al ($x = 1\%, 3\%, 5\%$) 合金中富 Cu 析出相颗粒密度随时间变化曲线

Fig. 5. Curves of Cu-rich precipitate phase particle density in Fe-15%Cu-3%Mn- x Al ($x = 1\%, 3\%, 5\%$) alloy aged at 873 K.

图 6 为时效温度为 873 K 时, Fe-15%Cu-3%Mn- x Al ($x = 1\%, 3\%, 5\%$) 合金中富 Cu 析出相平均颗粒半径随时间变化曲线. 可以看出, 时效早期沉淀相析出阶段, Al 含量分别为 1%, 3%, 5% 时的 $\langle r \rangle$ 保持不变, 且为 0. 这是因为孕育期阶段尚未发生相分离, 所以平均粒径为 0. 随后生长阶段内, 富 Cu 相从 α -Fe 基体中析出, 发生相分离, 由于合金元素在系统中弥散分布, 并且偏析程度较低, $\langle r \rangle$ 开始变大. 其次, 这一阶段持续时间随着 Al 含量增大而延长表明: Al 含量越高, Al 与 Cu 之间存在的协同作用增强, 表现为 $x = 5\%$ 时上升斜率大于 $x = 1\%$. 这也可以通过能量变化分析得到验证, 说明 Al/Mn 相阻碍富 Cu 相析出. 粗化阶段中由于发

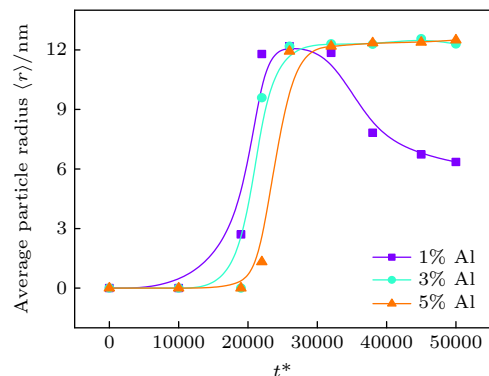


图 6 时效温度 873 K 时 Fe-15%Cu-3%Mn- x Al ($x = 1\%, 3\%, 5\%$) 合金富 Cu 析出相平均颗粒半径随时间变化

Fig. 6. Average particle radius of Cu-rich precipitates in Fe-15%Cu-3%Mn- x Al ($x = 1\%, 3\%, 5\%$) alloy aged at 873 K.

生 Ostwald 粗化, 较大颗粒合并后长大, 较小颗粒分解. 在这一阶段, Al 含量增加会抑制富 Cu 相生长, 较小颗粒消失越慢, 富 Cu 相的粗化速率越缓慢, $\langle r \rangle$ 变化越平稳.

5 结 论

结合 CALPHAD 热力学数据, 建立 Fe-Cu-Mn-Al 合金相场模型研究富 Cu 相析出机制及 Al 含量影响, 主要结论如下.

1) 富 Cu 相通过失稳分解机制析出并随机分布于铁基体中, 具有核-壳分层结构, 随时效时间延长, 富 Cu 相由 bcc 转变为 fcc 结构. Al 和 Mn 原子在富 Cu 核外偏析形成 Al/Mn 壳层, 抑制富 Cu 析出相进一步扩散生长, 可将其视为阻碍富 Cu 析出相形成的缓冲层, 影响富 Cu 相析出.

2) 在时效温度 823 K 下, Fe-15%Cu-3%Mn- x Al ($x = 1\%, 3\%, 5\%$, 质量分数) 合金中, B2-AlMn 金属间相的形成阻止富 Cu 相分离和粗化; 随着 Al 含量增大, Al/Mn 金属间相缓冲层抑制富 Cu 相进一步扩散生长和粗化的程度增强.

参考文献

- [1] Zhu J M, Zhang T L, Yang Y, Liu C T 2019 *Acta Mater.* **166** 560
- [2] Han G, Shang C J, Misra R D K, Xie Z J 2019 *Physica B* **569** 68
- [3] Li B Y, Zhang L, Li C L, Li Q L, Chen J, Shu G G, Weng Y Q, Xu B, Hu S Y, Liu W 2018 *J. Nucl. Mater.* **507** 59
- [4] Li B Y, Hu S Y, Li C L, Li Q L, Chen J, Shu G G, Jr C H, Weng Y Q, Xu B, Liu W 2017 *Model. Simul. Mater. Sc.* **25** 6
- [5] Lv G C, Zhang H, He X F, Yang W, Su Y J 2016 *Aip Adv.* **6** 045004
- [6] Jiao Z B, Luan J H, Miller M K, Chung Y W, Liu C T 2017 *Mater. Today* **20** 142
- [7] Shu S P, Wells P B, Almirall N, Odette G R, Morgan D D 2018 *Acta Mater.* **157** 298
- [8] Odette G R, Liu C L, Wirth B D 1996 *MRS Online Proceedings Library Archive* **439** 457
- [9] Wen Y R, Hirata A, Zhang Z W, Fujita T, Liu C T, Jiang J H, Chen M W 2013 *Acta Mater.* **61** 2133
- [10] Miller M K, Wirth B D, Odette G R 2003 *Mater. Sci. Eng. A* **353** 133
- [11] Osamura K, Okuda H, Asano K, Furusaka M, Kishida K, Kurosawa F, Uemori R 1994 *ISIJ Int.* **34** 346
- [12] Shen Q, Wang X J, Zhao A Y, He Y F, Fang X L, Ma J R, Liu W Q 2016 *Acta Metall. Sin.* **52** 513 (in Chinese) [沈琴, 王晓姣, 赵安宇, 何益锋, 方旭磊, 马佳荣, 刘文庆 2016 *金属学报* **52** 513]
- [13] Shen Q, Xiong X, Li T, Chen H, Cheng Y M, Liu W Q 2018 *Mater. Sci. Eng. A* **723** 279
- [14] Vaynman S, Isheim D, Kolli R P, Bhat S P, Seidman D N, Fine M E 2008 *Metall. Mater. Trans. A* **39** 363
- [15] Sun Y Y, Zhao Y H, Zhao B J, Yang W K, Li X L, Hou H 2019 *J. Mater. Sci.* **54** 11263
- [16] Zhao B J, Zhao Y H, Sun Y Y, Yang W K, Hou H 2019 *Acta Metall. Sin.* **55** 593 (in Chinese) [赵宝军, 赵宇宏, 孙远洋, 杨文奎, 侯华 2019 *金属学报* **55** 593]
- [17] Wen Z Q, Zhao Y H, Hou H, Wang B, Han P D 2017 *Mater. Design* **114** 398
- [18] Huang Z W, Zhao Y H, Hou H, Wang Z, Mu Y Q, Niu X F, Han P D 2011 *Rare Metal Mat. Eng.* **12** 2136
- [19] Tian X L, Zhao Y H, Tian J Z, Hou H 2018 *Acta Phys. Sin.* **67** 230201 (in Chinese) [田晓林, 赵宇宏, 田晋忠, 侯华 2018 *物理学报* **67** 230201]
- [20] Chen L Q 2002 *Annu. Rev. Mater. Res.* **32** 113
- [21] Zhao Y H, Tian X L, Zhao B J, Sun Y Y, Guo H J, Dong M Y, Liu H, Wang X J, Guo Z H, Umar A, Hou H 2018 *Sci. Adv. Mater.* **10** 1793
- [22] Hou H, Zhao Y H, Zhao Y H 2009 *Mater. Sci. Eng.* **499** 204
- [23] Kuang W W, Wang H F, Li X, Zhang J B, Zhou Q, Zhao Y H 2018 *Acta Mater.* **159** 16
- [24] Zhao Y H, Zhang B, Hou H, Chen W P, Wang M 2019 *J. Mater. Sci. Technol.* **35** 1044
- [25] Zhang J B, Wang H F, Kuang W W, Zhang Y C, Li S, Zhao Y H, Herlach D M 2018 *Acta Mater.* **148** 86
- [26] Cahn J W 1961 *Acta Metal.* **9** 795
- [27] Zhao Y H, Wang S, Zhang B, Yuan Y, Guo Q W, Hou H 2019 *J. Solid State Chem.* **276** 232
- [28] Koyama T, Hashimoto K, Onodera H 2006 *Mater. Trans.* **47** 2765
- [29] Koyama T, Onodera H 2005 *Mater. Trans.* **46** 1187
- [30] Dinsdale A T 1991 *Calphad* **15** 317
- [31] Bergner D, Khaddour Y 1993 *Defect Diffus Forum* **6** 95

Phase field study of effect of Al on Cu-rich precipitates in Fe-Cu-Mn-Al alloys*

Guo Zhen Zhao Yu-Hong[†] Sun Yuan-Yang Zhao Bao-Jun
Tian Xiao-Lin Hou Hua

(School of Material Science and Engineering, North University of China, Taiyuan 030051, China)

(Received 4 November 2020; revised manuscript received 23 December 2020)

Abstract

Low carbon steel plays an important role in many applications due to its high strength. Its high strength comes from the strengthening effect of nano-Cu-rich phase precipitates. In order to effectively adjust the microstructure of Cu-rich phase precipitates and obtain Fe-Cu-based steel with the best properties by adding different alloying elements (Mn, Al), it is necessary to understand the precipitation process of Cu particles. In this paper, based on the Ginzburg-Landau theory, the previous phase field model is modified, and the continuous phase field method is used to simulate the precipitation mechanism of nanometer Cu-rich precipitates and the inhibiting of the effect of Al content on Cu-rich precipitates of Fe-15%Cu-3%Mn- x Al ($x = 1\%$, 3%, 5% mass fraction) alloy at 873 K isothermal aging. Combining with the free energy derived from thermodynamics database, the microstructure evolution corresponds to the real alloy system. By calculating the composition field variables and structural order parameters, the evolution of phase separation and precipitated phase morphology in aging process are simulated. Moreover, the influence law of morphology, quantity density, average particle radius, growth and coarsening of Cu-rich precipitated phase are discussed. The results show that in the early stage of aging process, the nano-Cu-rich phase precipitates through the spinodal decomposition mechanism, and is randomly distributed in the iron matrix. Furthermore, due to the difference in atomic diffusion rate, the core-shell structure with Cu-rich phase as a core is formed. With the aging time extending, the structure of Cu-rich phase precipitates changes from bcc to fcc. Because of the synergistic effect between Al and Cu, the diffusion of Cu is slowed down. Besides, with the Al and Mn atoms precipitating, Al/Mn clusters are segregated around the Cu-rich precipitates, forming the Al/Mn intermetallic core-shell structure, and gradually wrapping the Cu-rich phase uniformly. During the evolution of the precipitation stage, the Al/Mn clusters are isolated around the Cu-rich precipitation phase, forming a gradually uniform Al/Mn intermetallic phase core shell structure covering the Cu-rich phase, which is to hinder the buffer layer from forming in the precipitation stage of the reservoir. In addition, with the Al content increasing, the Al/Mn intermetallic phase promotes the growth of the buffer layer and hinders the Cu-rich precipitate phase from growing and coarsening.

Keywords: phase field method, Fe-Cu alloy, Cu-rich precipitation phase, coarsening kinetics

PACS: 64.60.-I, 64.60.qe, 64.70.Nd

DOI: 10.7498/aps.70.20201843

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 22008224, 52074246, 51774254, 51774253, 51804279, 51801189), the Guiding Local Science and Technology Development Projects by the Central Government, China (Grant No. YDZX20191400002796), the Science and Technology Major Project of Shanxi Province, China (Grant Nos. 20181101014, 20191102008, 20191102007), the Platform and Talent Project of Shanxi Province, China (Grant No. 201805D211036), the Transformation of Scientific and Technological Achievements Special Guide Project of Shanxi Province, China (Grant No. 201804D131039), the Youth Science and Technology Research Foundation of Shanxi Province, China (Grant No. 201801D221152) and the Key Project of Equipment Pre-research Foundation, China (Grant No. 61409230407).

[†] Corresponding author. E-mail: zhaoyuhong@nuc.edu.cn