



镍基单晶高温合金中 γ' 相筏化行为的相场法研究进展

赵彦^{①②}, 张洪宇^①, 韦华^{①*}, 郑启^①, 金涛^①, 孙晓峰^①

① 中国科学院金属研究所, 沈阳 110016;

② 上海大学材料科学与工程学院, 上海 200072

* 联系人, E-mail: hwei@imr.ac.cn

2013-05-09 收稿, 2013-08-09 接受, 2013-11-20 网络版发表

国家重点基础研究发展计划(2010CB631200, 2010CB631206)和国家自然科学基金(50931004, 51071164, 51371173, U1037601, 50671102)资助

摘要 形核理论、相图计算(CALPHAD)数据库及微观弹塑性力学的发展, 使镍基单晶高温合金热处理、疲劳、蠕变等近工况条件下 γ' 相筏化行为的相场模拟成为可能. 基于镍基单晶高温合金 γ' 相筏化行为的实验研究进展, 结合相场法对 γ' 析出及筏化行为的组织模拟结果, 本文综述了相场模型研究镍基单晶高温合金中 γ' 筏化行为的主要研究进展.

关键词

单晶高温合金 γ' 筏化
相场
弹塑性力学

近 30 年来随着数学、物理、计算机科学在材料领域中的广泛应用, 通过计算模拟研究材料行为已经能够跨越从电子、原子尺度到连续介质尺度, 并逐步形成了一些体系较为完善、应用较为广泛的模拟方法和模型. 理论模型的创新、算法的不断改进以及实验手段的丰富使得材料的计算模拟越来越贴近真实的实验过程, 这为从理论上解释一些实验现象(如 γ' 筏化和粗化)、优化实验参数、预判材料服役行为和评价材料力学性能等提供了有力的工具.

镍基高温合金由于具有优异的高温力学性能和抗氧化腐蚀性能, 广泛用于制备涡轮发动机等先进动力推进系统的热端部件, 且已成为先进动力推进系统设计与制造的重大关键技术之一. 镍基单晶高温合金的微观组织主要由 γ' -Ni₃Al 和 γ -Ni 两相组成, 其中 γ 是基体相, γ' 在 γ 基体上共格析出, 是最重要的强化相. 合金服役过程中, 由于温度和应力的协同作用, 使 γ' 相沿某个方向发生定向粗化, 形成筏状组织, 显著降低合金高温力学性能, 故 γ' 筏化是高温合金性能退化的主要原因之一. 因此, 通过对 γ' 筏化行为的理论和实验研究, 对于阐明高温合金的失效机理是至关重要的. 镍基单晶高温合金 γ' 相筏化行为的组织模拟方法主要包括解析^[1]、相场法^[2]、Monte Carlo

法^[3]、有限元法^[4]等, 其中相场法由于在物理及力学模型方面的优势, 目前已成为研究 γ' 相筏化的主要模拟方法之一. 近些年, 随着相场法对晶体缺陷研究的逐步深入^[5-7], 使得 γ' 相筏化的研究也更加深入.

实验和模拟方法在探讨 γ' 析出和筏化行为时发现, γ' 微观形貌比较复杂: 形貌上, γ' 有圆形、方形、枝晶状、片状等^[8,9]; 尺寸上, 有过冷条件下析出尺寸相当的一次 γ' 相, 也有过冷条件下多次析出尺寸极不均匀的二次、三次 γ' 相^[10,11]; 此外, 外场作用下相邻 γ' 相粗化, 或 γ' 在长大过程中会劈裂成 3 块、4 块、8 块等^[12,13]; 体积分数上, 不同的热处理和外场作用下 γ' 相可能会产生总体积分数的增加或减少^[14], 这些微观形态上的复杂性不能够通过某种简单因素作用来解释, 可能涉及到温度场、塑性流变、力场、有序化、晶体缺陷等各方面因素的影响.

因此, 发展模拟方法对实验结果进行理论分析, 以及通过组织模拟预测不同服役条件下 γ' 的析出形态, 借此来预测其力学性能, 对节约实验成本、优化工艺、缩短合金研发周期等非常必要. 目前在研究 γ' 形貌的模拟方法中, 发展最好的是 Monte Carlo 方法^[2,15]和相场法^[3,16], 特别是相场法在解释 γ' 析出行为及筏化方面已取得了明显进展. 本文通过回顾 γ' 筏

引用格式: 赵彦, 张洪宇, 韦华, 等. 镍基单晶高温合金中 γ' 相筏化行为的相场法研究进展. 科学通报, 2013, 58: 3692-3703

Zhao Y, Zhang H Y, Wei H, et al. Progress of phase field investigations of γ' rafting in nickel-base single crystal superalloys (in Chinese). Chin Sci Bull (Chin Ver), 2013, 58: 3692-3703

化实验和模拟的研究历程, 简要综述近年来相场法在 γ' 析出及筏化方面的一些研究结果, 为进一步利用相场法研究 γ' 筏化行为提供参考。

1 相场法

相场法的基本思想是: 根据物理模型建立自由能泛函, 通过变分法求解动力学方程(如: Cahn-Hilliard 方程、Ginzburg-Landau 方程等), 并以矩阵形式表示序参数在场中的分布, 从而得到研究对象的动力学行为。相场法的优点在于能够通过自由能泛函的构建, 分别考虑影响研究对象动力学行为的各种因素, 并动态显示微观组织的演化行为, 从而通过所建立的模型, 分析导致组织演化行为的内在机制。相场方法能够研究力场^[14]、流场^[17]、材料本征缺陷^[18]等对组织形貌的影响, 而且在研究枝晶生长取向^[19]、位错分布^[20]、裂纹扩展^[21]、固态相变^[22]等方面的模拟结果已得到实验证实。

相场法的应用范围主要包括枝晶生长^[19]、固态相变^[22]、位错^[20]、马氏体^[23]、孪晶^[24]等。其中对 γ' 析出及筏化行为的探讨大致经历了从二元到多元, 从弹性模型到弹塑性模型, 从简单的等温过程到复杂的过冷行为的研究过程。特别是近几年, 微观弹塑性力学模型在相场中的应用, 进一步拓展了相场法的研究范围, 其模拟方法主要包括离散位错方法^[25]、有效塑性应变方法^[26]、黏塑性力学方法^[27,28]等。新发展的相场模型除了关注 γ' 筏化行为外, 也开始关注缺陷与 γ' 的相互作用, 如位错^[5]、微孪晶^[7]等对 γ' 相的剪切作用, 从而进一步深化对 γ' 相筏化机理的理解。

2 相场法对 γ' 析出行为的研究

相场法研究 γ' 形貌演化可分为两方面: 一方面是基于热处理过程中的 γ' 析出; 另一方面是基于合金服役过程中 γ' 的形变。相场法对热处理过程中 γ' 析出行为的研究内容主要包括 γ' 粗化、多元镍基单晶高温合金 γ' 析出和 γ' 析出的多模态。其中每个研究内容又是在相场方法与其他理论模型耦合基础上完成的, 如 γ' 筏化的相场研究是在微观弹塑性力学及位错理论基础上发展起来的; 多元镍基单晶高温合金 γ' 析出的相场研究是在相场方法和相图计算(Computer CALculation of PHase Diagram, CALPHAD)方法耦合基础上建立起来的; γ' 析出多模态相场研究是在形核理论基础上建立起来的。

γ' 筏化的相场研究大致经历了 2 个阶段: 第一个阶段是 γ' 筏化的弹性模型; 第二个阶段是 γ' 筏化的弹塑性模型。其中, γ' 筏化的弹塑性模型又可分为 2 类, 基于位错的弹塑性模型以及晶体塑性模型。每种模型均有各自的特点, 弹性模型较容易模拟外加力场、晶格错配和 γ'/γ 弹性模量差异对 γ' 筏化行为的影响, 而弹塑性模型中, 位错塑性模型则通过模拟位错来解释 γ' 筏化行为, 并对 γ 通道里的位错类型和分布进行了图形显示; 晶体塑性模型则是通过模拟 γ' 筏化演化过程来解释材料的力学行为。虽然对 γ' 筏化的研究已取得较大进展, 但该研究却一直局限在 Ni-Al 二元合金系。一方面是由于缺少模拟多元合金系所需的材料参数, 如晶格错配度、不同条件下原子的扩散系数等; 另一方面是由于现有参数在与相场模型的匹配性上存在问题, 如界面能的计算、计算的收敛性等方面, 这些都有赖于模型的进一步改进和发展。

在讨论 γ' 筏化问题之前, 先对多元镍基单晶高温合金 γ' 析出及 γ' 析出的多模态 2 个问题单独进行阐述, 因为这 2 个问题本身对完善相场法研究 γ' 筏化具有重要的推动作用; 之后将从实验和模拟的角度, 重点从相场法角度阐述 γ' 筏化的研究进展; 最后对 γ' 筏化行为的相场研究提出建议和思考。

2.1 多元镍基单晶高温合金 γ' 析出行为的研究进展

多元镍基单晶高温合金的模拟方法包括第一性原理^[29]、Monte Carlo 法^[15]、相场法^[16,30]等。虽然借助第一性原理和 Monte Carlo 分子动力学有助于获得合金 γ 相和 γ' 相的晶格常数进而得到两相的晶格错配度, 并且通过第一性原理还可以计算出合金基态的弹性常数, 但是, 第一性原理所能计算的体系较小, Monte Carlo 又十分依赖原子间作用势, 它们在多组元体系计算方面均受到限制。考虑到高温合金自身的复杂性, 热动力学模型将大大简化复杂原子构型沉淀相的模拟。近十几年来, 计算相图技术的发展以及镍基高温合金的热动力学数据的积累^[31-33], 使多元镍基高温合金 γ' 析出行为的动力学模拟成为可能。

Ni-Al 基单晶高温合金沉淀过程中, 在基体 γ 相中析出的 γ' 相均为面心立方(fcc)结构, γ 是以 Ni 为基的无序固溶体, γ' 为 Ni 占据 fcc 面心位置、Al 占据 fcc 顶角位置的 L1₂ 结构有序金属间化合物。相场模型中对这两相晶体结构通过 4 个场参数(1 个成分场参数和 3 个有序结构场参数^[34])进行表达。通过 4 个参数

所表达的自由能泛函作为相场法中热力学计算的输入, 求解与成分场演化相关的 Cahn-Hilliard 方程, 以及有序参数场演化相关的 Ginzburg-Landau 方程所构成的方程组, 即可得到场参数的演化。

一般情况下自由能泛函的构成主要包括化学自由能(体自由能)、界面能、弹性能等。化学自由能密度曲线为双势阱的形式, 一直以来化学自由能通过多项式的方式来表达^[22,35], 多项式中的系数通过数值拟合的方法得到。多项式对化学自由能表达虽然成功, 但仅是数学上的表示, 没有涉及材料热力学的物理本质。随着相图计算(Computer CALculation of PHase Diagram, CALPHAD)方法的发展^[30-33], 特别是通过其中的亚晶格模型表示多元合金溶质原子在晶格位置占位的热力学模型的建立, 借助 CALPHAD 方法得到的热力学数据, 并将其带入到相场模型中, 使得相场法模拟多元合金的析出行为成为可能。Zhu 等人^[36]首次通过把含亚晶格模型的相场方法应用到 Ni-Al 合金 γ' 的模拟中, 为 CALPHAD 方法与相场方法耦合模拟 γ' 析出开辟了先河。Wang 等人^[37]在此基础上把集团变分法(cluster variation method, CVM)计算的界面能、错配度等引入到相场方法中, 模拟了 γ' 的筏化。该工作为模拟多元镍基单晶高温合金 γ' 的析出提供了铺垫。Kitashima^[38]在 CALPHAD 与其他计算方法耦合的基础上, 提出模拟多元镍基高温合金 γ' 析出的相场方法。虽然 Kitashima 采用的模型是基于 Zhu 等人^[36]和 Wang 等人^[37]的工作, 但他将热力学模型拓展到多元体系, 并在此基础上, 计算了 Ni-Al-Re-Ta 四元系^[39]和 Ni-Al-Co-Cr-Mo-Re-Ta-W 八元系^[15]中 γ' 的析出及合金元素的成分分布和有序度, 图 1 为 Ni-Al-Co-Cr-Mo-Re-Ta-W 八元合金的相场模拟结果。虽然该模型能够获得合金元素的成分分布和有序度, 但目前只限制在一维条件下的 γ' 相析

出, 所计算的空间尺度也较小, 并且没有考虑到弹性场对合金元素扩散的影响。

2.2 不同过冷条件下的 γ' 的析出研究

通常相场法所研究的 γ' 析出都是在等温条件下进行的, γ' 形核过程只有一次, γ' 相的尺寸相差不大。在模拟过程中, 通过在方程中加入 Gauss 分布的 Langevin 扰动项使得 γ' 形核, 扰动项满足涨落-耗散定律^[40], 并在 γ' 形核之后去掉 Langevin 扰动项。该模拟结果虽然与实际等温情况下的形核过程相近, 但不能模拟不同过冷条件下的 γ' 多次析出过程。 γ' 多次析出^[11,12]与过冷度和过饱和度密切相关, 与相图中 γ 和 γ' 相线斜率相对应。为模拟合金时效过程中 γ' 多次析出行为, Simmons 等人^[41,42]通过发展 Poisson 种子算法, 并将多次形核理论引入到相场模型中。随后 Wen 等人^[43]把该算法应用到 γ' 相模拟中, 计算了 γ 通道中 γ' 颗粒的二次析出, 研究了不同冷却速度下的 γ' 析出行为(图 2)。Boussinot 等人^[44]应用该算法, 计算了多次形核过程中 γ' 析出的尺寸分布。通过他们的研究使得相场法模拟不同冷却速度下的 γ' 析出行为成为可能, 为近工程条件下 γ' 析出行为的模拟提供了重要参考。虽然 γ' 析出的多模态相场研究取得了一些进展, 但是模型中只讨论了成分场的形核驱动力, 许多重要的因素(如界面迁移率随温度的变化、不同冷速对 γ' 颗粒生长各向异性的影响等)没有考虑进去, 不过这些研究进展依然为近工程条件下 γ' 析出行为的模拟研究迈出了重要的一步。

3 γ' 筏化的研究进展

3.1 实验研究进展

γ' 是镍基单晶高温合金中最重要的强化相, 其筏化行为能显著影响合金的综合高温力学性能。因此,

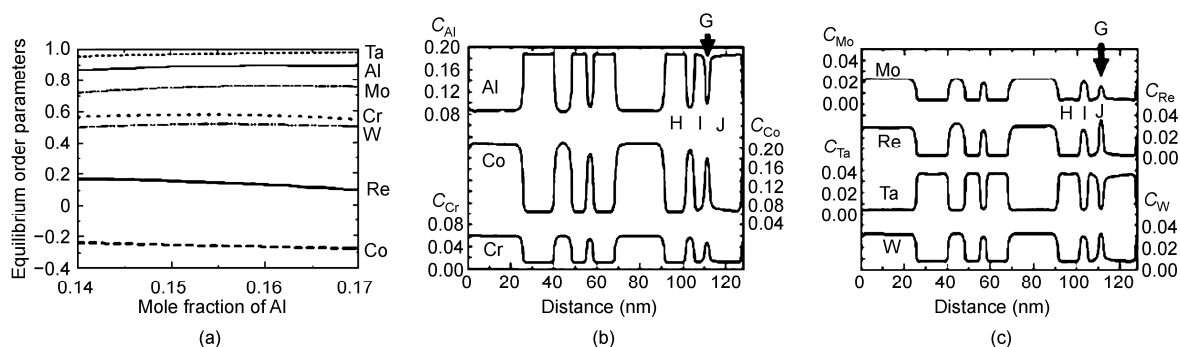


图 1 TMS-75 合金 1100℃时效过程中, 合金元素在 γ' 相中的(a)序参数平衡值(即有序度)以及(b), (c)成分分布^[15]

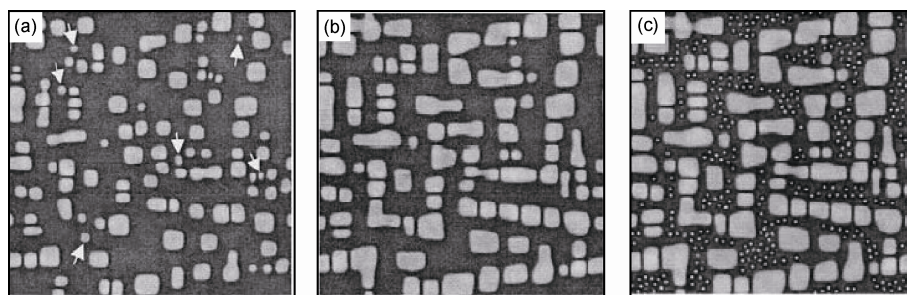


图2 1 K/ τ 冷速下的 γ' 析出形貌演化图^[43]
(a) $\tau=40$; (b) $\tau=150$; (c) $\tau=450$. τ 为约化时间步数

γ' 筏化的研究备受关注. 无论实验还是模拟研究, γ' 筏化的研究主要集中于 γ' 形筏取向和筏化的驱动力, 导致它们发生变化的因素主要包括: 外加应力、晶格错配及 γ' 相与 γ 相弹性模量差. 此外, 应变能的释放, 特别是位错对 γ' 筏化的影响也至关重要.

γ' 筏化的实验研究开始较早, 1971 年 Tien 和 Copley^[45]首次研究了 [001]取向镍基单晶合金中的 γ' 形筏现象, 发现 γ' 形筏不仅改变 γ' 形貌, 更重要的是, 能显著影响 γ/γ' 界面位错网形成及合金元素在该界面的分布, 故对合金力学性能具有重要影响^[46]. Pineau^[47]利用 Eshelby 理论预测了单轴应力条件下的 γ' 筏化, 并提出了著名的筏化预言图. 该图表示了纯弹性方法和各向同性近似条件下, 外加应力、晶格错配及 γ 基体和 γ' 析出相弹性模量差异对筏化方向的影响, 并强调 γ' 筏化方向取决于 γ' 析出相与 γ 基体间弹性常数差($c_{11}-c_{12}$)之间的比值. Carry 和 Strudel^[48]在研究单晶合金蠕变性能基础上, 推测 γ/γ' 界面处的位错可能通过攀移沿着 γ' 颗粒的边界运动, γ' 筏化方向与 γ/γ' 界面位错分布密切相关, 即在 γ' 定向形筏过程中未消失的 γ/γ' 界面是被塑性流变位错覆盖的界面, 表明塑性变形是导致 γ' 定向形筏的关键因素. Miyazaki 等人^[49]将 γ' 立方块的各向异性考虑到分析中, 通过能量计算与颗粒尺寸的比较研究了 γ' 筏化方向. Fredholm 和 Strudel^[50]根据筏状 γ' 的不同特征将其分为垂直于外加应力方向的 N 型筏和平行于外加应力方向的 P 型筏, 其中 N 型筏可能降低合金疲劳性能, P 型筏可能改善合金疲劳性能^[51]. Nathal 等人^[52]和 Schneider 等人^[53]在研究 CMSX-4 合金高温蠕变性能时指出, γ' 形筏后改变了 γ 与 γ' 连接方式, 使 γ 基体由包围 γ' 变为镶嵌在 γ' 中, 从而失去变形能力而易于断裂, 故 γ' 形筏会不同程度地降低合金蠕变强度. γ' 形

筏源于应力梯度导致合金元素的定向扩散, 即在应力梯度作用下, γ' 相形成元素(Al, Ti 和 Ta 等)和 γ 相形成的元素(Cr, Mo 等)沿相反方向扩散, 致使 γ' 沿特定方向生长且互相连接, 最终导致 γ' 形筏, 且因 γ' 形筏过程主要受固相扩散控制, 故其 γ' 形筏动力学呈非线性特征^[8,54]. Pollock 和 Argon^[55]在研究塑性变形和位错对 γ' 形筏作用时指出, γ' 定向形筏是通过 γ' 颗粒局部溶解和合金元素定向扩散实现的, 合金元素对蠕变过程中 γ' 形貌演化的影响主要表现在对 γ/γ' 晶格错配度和元素扩散速率的影响上, 其中 γ/γ' 界面共格应力是 γ' 定向形筏的主要驱动力, 同时蠕变过程中的位错攀移和滑移也促进合金蠕变, 进而加速 γ' 形筏^[56]. 尽管位错滑移后期形成的筏排组织封闭了位错运动的横向通道, 增加了蠕变抗力, 但形筏毕竟是 γ' 粗化的结果, 所以大多情况下对合金性能具有不利影响. Ignat 等人^[57]测试了 γ' 筏化与应力状态的关系并指出, 未释放的晶格错配所驱动的合金原子扩散削弱了错配位错的相互作用, 对于 N 型筏化, 合金原子扩散在平行于应力方向的 4 个面被激活; 对于 P 型筏化, 在垂直于应力方向的 2 个相反的面被激活. Matan 等人^[58]提出当塑性临界应变值超过 0.1% 时, 即使没有施加应力的试样, γ' 筏化仍将继续进行, 即当塑性应变达到临界应变值时, γ 通道内有较多的位错, 但位错之间相互缠结使得位错可动性变差, 当去掉外加应力时, 位错聚集在 γ/γ' 界面而不能消失, 故通过位错释放晶格错配使 γ' 筏化能够继续进行. Fahrman 等人^[59]通过实验测试 γ' 筏化方向与 γ 基体和 γ' 析出相弹性模量差之间的关系指出, 对于弹性模型, γ 与 γ' 弹性模量差的正负将决定 γ' 的筏化方向, 且 γ' 筏化方向依赖于 $\sigma(E_{\gamma}-E_{\gamma'})/\delta(E_{\gamma})^2$, 其中 σ 为应力大小, δ 为各向异性常数, $E_{\gamma'}$ 与 E_{γ} 分别为 γ' 相和 γ 相的弹性模量; 而对弹

-塑性模型, γ' 筏化方向只依赖于 $\sigma/\delta E_\gamma$.

Paris 等人^[8]观察到 γ' 筏化与位错网的形成是同时开始的, 表明 γ' 筏化的塑性驱动机制, 且这种滑移位错择优处于水平 γ 通道内, γ' 筏化行为由 3 个非线性行为组成. 第一阶段为均匀增加阶段; 第二阶段为快速增加阶段. 在扩散流作用下, 单个析出相 γ' 形成元素 Al, Ti, Ta 再分配所导致, 此时 γ' 析出相的扩散尺度大约是 100 nm; 第三阶段中, 由于驱动力减少, γ' 筏化速度减慢, γ/γ' 界面位错的出现改变了溶质原子的化学势梯度, 与连续的 γ/γ' 界面状态相比, γ/γ' 界面位错对 γ' 筏化过程至关重要. 从实验上讲, 完整连续的 γ/γ' 界面很难在长时间退火过程中或应力低于 40 MPa 的情况下保持, 这可能是由于 γ 通道内元素的非平衡分布和加热状态有利于位错运动所致.

3.2 计算机模拟研究进展

通过计算机模拟研究 γ' 筏化行为主要考虑两方面问题, 一方面是基于方法的选择, 如有限元^[60]、Monte Carlo 方法^[61]、相场方法^[37]等; 另一方面是基于模型的建立, 如热力学模型^[62]、力学模型^[37]、塑性流变模型^[25]等.

Socrate 和 Parks^[4]基于弹性能量分析, 在有限元模拟基础上指出, γ 形筏驱动力正比于外加应力、 γ/γ' 错配度大小以及 γ/γ' 两相弹性常数之差, 且 γ' 形筏能明显降低系统的能量. Matan 等人^[58]考虑到塑性变形对 γ' 形筏过程的影响, 借助于塑性变形模型, 通过数值模拟得到, γ' 形筏必然伴随塑性应变, 但 γ' 要显著形筏必须超过其临界应变变量. 在此基础上, Buffiere 和 Ignat^[63]提出了 γ' 形筏的位错判断准则, 即位错首先出现在能使 γ/γ' 错配应力松弛的 γ 通道中, 且在蠕变初始阶段, 通过 γ/γ' 界面扩展来降低其界面错配能, 促进 γ' 形筏, 进而降低整个系统的能量, 因此, 系统能量降低是 γ' 形筏的根本动力. 此外, Osawa 等人^[60]通过有限元模拟发现, 材料中位错分布有利于优化 γ 通道的方向.

Véron 等人^[46]利用三维模拟描述了 γ' 筏化过程的形貌和动力学行为, 认为蠕变过程中由位错所产生的各向异性晶格错配的松弛是筏化的驱动力, 并且计算了由成分梯度和塑性流变所导致的扩散流, 其中局部应力通过宏观外加应力和错配应力(它们依赖于位错的分布)来获得. 计算发现, 当由塑性应变导致的晶格错配被释放时, 大部分受载的 γ 通道将首先

经历塑性, 位错择优处于垂直于应力轴的通道界面. 实验结果显示, 拉伸实验中负错配度情况和压缩实验中正错配度情况下, 其实验结果和模拟结果相符, 即被位错填充的择优通道不仅依赖于载荷方向, 也依赖于晶格错配符号. Véron 等人^[46]同时认为, 弹性能密度的非均匀性驱动了不同类型通道的扩散流, 模拟结果显示, 对于拉伸实验, γ' 以 N 型筏化; 对于压缩实验, γ' 以 P 型筏化. 在更高的应力条件下, γ' 筏化将加速, 压缩过程中 γ' 筏化速度比拉伸过程慢 4 倍. 在此基础上, Véron 等人^[46]通过图表展示了 γ' 筏化方向与晶格错配和外加应力之间的关系, 遗憾的是, 该图在正错配度区域不能由实验证明, 其原因可能是 Véron 模型过多强调了塑性流对 γ' 筏化方向的影响. 进一步分析也表明, 在正错配度区域塑性流与原子扩散流作用相反, 实际上许多蠕变实验也证实, 只有当蠕变应变达到 0.2% 时, γ' 筏化才完成. 因此, 与原子扩散流对 γ' 筏化的影响相比, 塑性流的影响不是最重要的.

Nabarro^[62]提出一个计算 γ' 筏化热力学压力的物理模型, 获得的结果表明, 当塑性流变发生时, γ' 和 γ 相弹性常数之间的差异对 γ' 筏化的影响很小; 外加应力场只增加 γ 相的自由能, 通过计算焓变与 γ/γ' 界面的位移, 得出初始的化学热力学压力相当于 20 倍的纯弹性效应的热力学压力. 同时, 由体自由能引起的应力作用下的界面迁移可以忽视, 由体自由能引起的早期大的热力学压力不能对抗弹性效应的热力学压力(其随着界面迁移保持为常数), 因此, 实验很难证实该模型的结果. Nabarro 的模型也只考虑了一个 γ 通道和 γ' 相之间的平衡, 事实上不同种类的 γ 通道之间自由能的差异将使原子扩散流连续并且使 γ/γ' 界面向前移动, 另外, 仅从塑性的角度而言, 在一定应力条件下 γ 相体自由能变化的方向对垂直和平行于应力方向的通道是不同的. 如果假定局部晶格错配和溶质成分呈线性关系的话, Nabarro 模型中的一些推导将值得商榷.

Arrell 和 Vallés^[64]在计算 γ' 相每个立方面自由能密度基础上, 通过对比能量密度来预测 γ' 筏化的形貌, 但该模型没有考虑蠕变应力和 γ' 筏化过程中载荷的作用, 获得的界面能来自于界面位错对界面能的贡献. 模拟结果与负错配度合金中 γ' 筏化结果一致, 并解释了在 $E_\gamma > E_{\gamma'}$ 情况下 γ' 筏化的原因. Vallés 和 Arrell^[65]也通过 Monte Carlo 模拟再现了不同应力和

温度条件下的 γ' 筏化,但是该模型仍旧建立在不同密度的界面位错所引起的界面能的基础上,界面完全释放由晶格错配和载荷引起的应力。

Ohashi 等人^[66,67]根据 γ 通道内塑性应变分布,借助几何位错推导出了位错密度公式。随后通过考虑外加应力、晶格错配和位错所得到的应变能,获得了由 γ'/γ 界面纯刃型位错所建立的水平和垂直 γ 通道的应力场。水平和垂直 γ 通道的应变能密度差大约是 2 mJ/m^3 ,足以引起 γ' 筏化的扩散。模型尝试把塑性变形和几何位错分布连接起来,仅通过观察 Von-Mises 应力分布来分析 γ' 筏化更合理,但该模型仅考虑了[001]晶向排列的刃型位错,有一定的局限性。

Nabarro 等人^[1]考虑到单晶材料各向异性,借助 Eshelby 能量-动量张量分析方法得到了 γ' 筏化驱动力的解析解。结果表明, γ' 筏化驱动力正比于拉力、晶格错配和 γ'/γ 弹性模量差;当塑性应变超过一定值后,应力方向决定 γ' 筏化方向, γ' 析出相和 γ 基体的弹性模量之差是次要因素,这与 Socrate 和 Parks^[4]的 2D 分析结果一致。同时 Nabarro 等人^[1]也强调了蠕变过程中位错的重要性,证明如果只考虑弹性作用,在基体和析出相弹性常数相同情况下,外加应力不会驱动 γ' 筏化,即 γ' 筏化实际上是由外加载荷和内能增加之间的差异来驱动的。

3.3 相场弹性模型研究

相场法对 γ' 筏化行为的研究,应该追溯到微观弹性理论的建立,在 Khachaturyan^[68]的书中有详细总结。通过微观弹性理论能够解释弹性场与 γ' 析出相形貌之间的关系^[69],在此基础上,考虑到析出相和基体相之间弹性常数差异引起的非均匀弹性对析出相形貌的影响,Khachaturyan 等人^[70]将微观弹性理论扩展到非均匀弹性情况,非均匀弹性公式的推导为相场法模拟弹性情况下 γ' 筏化行为提供了理论依据。在非均匀弹性公式推导基础上,Chen 课题组^[71,72]发展了计算非均匀弹性的扰动迭代方法(perturb-iterative method)和共轭梯度方法(conjugate gradient method),显著推动了高阶精度的弹性场数值算法的研究进展;同时提出了求解相场动力学方程的半隐 Fourier 谱算法^[73,74],明显缩短了计算机计算所花的机时,并提高了计算精度。Wang 等人^[34,75],Rubin 和 Khachaturyan^[22]通过在相场模型中引入序参数,且考虑到合金原子的有序化,使 γ' 析出过程中形貌的演化更接近实验所

观察的结果,并成功解释了 γ' 析出过程中所发生的劈裂现象^[13],深入探明了有序化对 γ' 析出相形貌的影响,指出 γ' 在反相畴界面能大于界面能 0.5 倍时将发生劈裂。Li 和 Chen^[76]基于非均匀弹性理论,研究了外部载荷作用下 γ' 相的筏化行为。结果显示,外加力场方向对 γ' 筏化方向的影响至关重要,这与拉伸和压缩条件下的 γ' 筏化结果一致。此外,Yang 等人^[77]和 Wang 等人^[37]也分别通过相场方法对外加载荷作用下的 γ' 筏化方向进行了研究。

γ' 筏化的弹性模型在研究应力条件下 P 型和 N 型 γ' 筏化形貌特征时,不仅模拟结果得到了实验证实,且考虑到外加应力、晶格错配、 γ'/γ 晶格弹性模量差异对 γ' 筏化的影响,故弹性模型在研究 γ' 筏化方面具有明显的优势。值得注意的是,相场法的弹性模型把 γ' 筏化看成是应力诱导扩散的过程,所以没有考虑晶体缺陷,尤其是位错对 γ' 筏化的影响。正如 Véron 和 Bastie^[78]实验结果显示, γ' 筏化过程不仅要考虑原子扩散流,还要考虑塑性流变的影响,因此有必要发展 γ' 筏化的弹塑性模型。

3.4 相场法研究 γ' 筏化的弹塑性模型

实验中发现,在没有外加应力的作用下,当施加较大的变形时, γ' 也会发生自发筏化^[46,78],这表明 γ' 筏化本身与材料的塑性紧密相关。近几年随着相场理论的发展,开始引入相场的弹塑性模型^[10,25,79], γ' 筏化的弹塑性模型也由此得到发展。现阶段通过相场法研究 γ' 筏化的弹塑性模型分为 3 种:离散位错方法(discrete dislocation method, DDM)^[25,79]、有效塑性应变方法^[10]和黏塑性方法^[11,14]。其中,前 2 种模型属于 γ' 筏化的位错模型,从微观机制方面解释 γ' 筏化行为;后 1 种模型属于 γ' 筏化的黏塑性力学方法,该方法将从宏观力学实验获得的参数引入到相场模型中,借此来研究 γ' 筏化行为。

实验证实,位错与 γ' 筏化密切相关,且对 γ' 筏化有重要影响,Yeh 等人^[80]发现沿[001]方向施加应力,一段时间后位错将聚集在 $\langle 110 \rangle$ 方向的 $\{001\}\gamma/\gamma'$ 界面。Pollock 和 Argon^[55]发现对于负错配度的单晶高温合金,低温高应力拉伸时,位错更倾向于沿着水平 γ 通道进行滑移;高温低应力拉伸时,在平行于拉伸轴的 γ 通道内几乎没有位错的存在。Tetzlaff 和 Mughrabi^[81]工作进一步表明,当水平 γ 通道的位错到达 γ' 颗粒边界时,它们可能划过垂直通道,如果局部应力足够大,

在 γ/γ' 垂直通道内将建立一定的位错排列。

Lahrman 等人^[82]通过透射电子显微镜(TEM)观察到 γ' 周围位错网中 $1/2\langle 110 \rangle$ 刃型位错, Singh 等人^[83]发现 γ' 周围有绕过-滑移和攀移的位错网络重排, 也肯定了 γ 周围 $1/2\langle 110 \rangle$ 刃型位错占优的特征. Reed 等人^[84]通过 TEM 观察也提出所谓的多边形和方形位错网, 并在实验中发现, CMSX-4 合金在 $1150^\circ\text{C}/100\text{ MPa}$ 条件下蠕变 10 h 后 γ' 快速筏化, 并观察到蠕变硬化现象. 蠕变速率降低的可能原因是由于 γ' 筏状结构的形成, 减小了垂直通道宽度, 阻碍了 $\{111\}\langle 110 \rangle$ 位错的滑移和攀移. Reed 等人^[84]的实验结果与 Lahrman 等人^[82]对位错网络的解释不同, Lahrman 等人^[82]认为位错的形成是由于 $[001]$ 蠕变载荷, 而不是过时效热处理, 虽然两者均出现了相似的位错网络, 但 Lahrman 等人^[82]证明, 过时效试样的位错网可能与外加应力下形成的位错网是不同的. Pollock 和 Argon^[56]在研究 $850^\circ\text{C}/552\text{ MPa}$ CMXS-3 合金蠕变行为时, 将其蠕变过程分为 3 个阶段: 孕育期阶段, 即有初生位错增加; 随后位错网络开始形成; 最后位错切过 γ' 相导致合金失效, 并解释了各个阶段位错的形貌和演化过程. Keller 等人^[85]通过 TEM 分析 (001) 拉伸蠕变 γ/γ' 界面位错网络发现, 位错位于平行于蠕变应力的析出面, 垂直于蠕变应力面上的位错释放黏性应变, 从而加剧黏性应变. Probst-Hein 课题组^[86,87]借助离散位错方法(DDM)估算不同 γ 通道中的位错密度, 借此来研究位错密度对 γ' 体积分数和晶格错配的影响. 结果表明, 晶格错配将吸收位错环, 同时使相同的位错环难以进入另一种 γ 通道. 在此基础上, 通过相场方法模拟^[88], 解释了由于晶格错配和外部载荷方向对位错通道的择优性选择.

相场位错方法首先由 Léonard 和 Desai^[89]提出, 但对 γ' 筏化的研究则起源于 DDM 方法的建立^[25,79,90]. 相场位错方法首先用到解释 γ' 筏化, 最初的想法是通过把位错方法和溶质扩散 2 种相场方法进行耦合, 从而形成了相场的离散位错方法. Zhou 等人^[25]最早提出计算 γ' 筏化的离散位错方法, 通过溶质再分配的化学梯度势来得到位错构型和溶质再分配, 其中溶质再分配的化学梯度势由 γ/γ' 微观结构、通道位错、外加应力 3 部分组成, γ/γ' 微观结构和外加应力控制位错的演化. 该方法把溶质场和位错场同时考虑到相场模型中, 溶质场中体自由能和界面能与一般的相场模型相同, 位错场通过多个序参数表达, 并考虑每

个滑移系对系统能量的贡献. 此外, 总的弹性应变能由内应力、通道位错所形成的应力场和外加应力 3 部分组成. 借助该模型可以得到 γ 通道中位错的构型、密度以及溶质原子的再分配. 该模型的优点是把位错对筏化的贡献考虑进模型, 并能通过模拟计算出 γ 通道中位错的构型和密度, 但目前该模型没有考虑有序化和多种滑移系对 γ' 筏化的影响, 所计算的位错构型比较简单. 图 3 为通过该方法模拟得到结果, 图 3(b)显示了 γ' 最终连接成板条状, 即 N 型筏化. 该模型主要关注的是每个位错对 γ' 筏化的贡献, 故称此方法为离散位错方法. 利用该方法的模拟结果, 证实了 γ' 筏化与 γ'/γ 界面位错的类型和分布有关, 同时晶格错配符号和载荷方向决定 γ 通道中位错的构型.

Zhou 等人^[26]建立了另一种模拟 γ' 筏化的弹塑性模型, 即有效塑性应变方法. 但该模型没有考虑每个位错对 γ 通道塑性应变的贡献, 而是将从实验获得的位错密度带入到相场模型中, 用等效应变作为 γ 通道的塑性应变. 有效塑性应变方法与离散位错方法的差异在于, 有效塑性应变方法不考虑单个位错的作用, 因此不能表示位错的构型和排列; 有效塑性应变方法仅把位错对 γ 通道塑性应变考虑到自由能泛函中, 没有考虑它对体自由能及界面能的影响. 但该模型的优点在于模型简单, 容易分析 γ 通道塑性应变对筏化的影响. Zhou 等人^[26]利用有效塑性应变方法分析了 γ' 和 γ 相弹性模量差异和通道塑性位错对 γ' 筏化的影响, 结果表明, 在 γ' 筏化初期 γ' 和 γ 相弹性模量的差异驱动 γ' 筏化, 到后期主要是通道中位错所导致的塑性驱动 γ' 筏化, 同时模拟显示 P 型筏化比 N 型筏化速度快.

相场黏塑性模型是一种模拟 γ' 筏化的唯象模型, 最早由 Ubachs 等人^[91]在研究焊料合金黏塑性行为时提出. Uehara 等人^[92]和 Guo 等人^[93]分别通过弹塑性

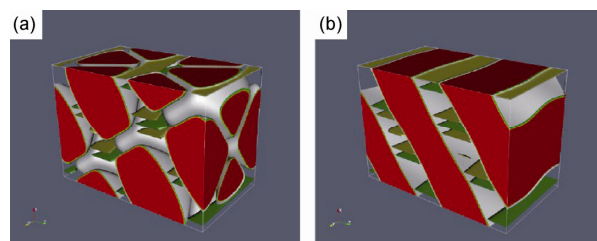


图 3 0.3%晶格错配 152 MPa $[001]$ 方向拉伸下 γ' 相 N 型筏化的演化过程^[25]

(a) $t=7.2\text{ h}$; (b) $t=10.7\text{ h}$. γ 通道中的阴影面为位错的滑移面

模型研究了晶粒的生长行为和缺陷周围的应力分布; Gaubert 等人^[14]利用黏塑性模型探讨了高温合金蠕变过程中的 γ' 筏化行为. 该模型获得的 γ' 筏化形貌与实验结果一致, 解释了反向畴界粗化, 阐明了合金蠕变过程中应变取向的规律. 该模型的基本思想是: 在相场弹性模型基础上, 不改变体自由能和界面能, 但微观力场对自由能的贡献被划分为弹性能和黏塑性能 2 部分, 将其引入相场模型来探究 γ' 筏化过程中成分场、有序参数场以及应力场的影响. 模型中的弹性应变由总应变减去内应力引起的应变和塑性应变引起的应变之和得到, 根据弹性应变得到弹性应变能, 其中塑性应变以切应变引起的晶体滑移组成, 滑移系在镍基单晶高温合金中由 12 个八面体、12 个十二面体、6 个六面体滑移系组成, 在目前的研究中只考虑了八面体的 12 个滑移系, 切应变由 Norton 流法则得到, 并考虑到等向强化和随动硬化对剪切应变的影响. 黏塑性能只考虑随动硬化对自由能的影响. 由于该模型是唯象模型, 模型中选取的参数依赖于蠕变和疲劳实验或者有限元计算. 该模型的优点在于与实验结果符合很好, 且能够把宏观加载与 γ' 筏化行为相结合, 但其模拟结果在很大程度上依赖于唯象参数的选取, 并且由于该模型基于相场连续模型, 所以蠕变条件下塑性应变只能模拟蠕变的前 2 个阶段, 此外该模型在解释筏化微观机制方面不如位错模型好. 图 4 给出了不同相场模型对 γ' 形貌及与蠕变实验结果的对比, 不难看出, 相场弹塑性模型得到的 γ' 筏化形貌的模拟结果与实验结果匹配更好, 且形貌非常相近, 故证明了该模型的正确性.

4 相场法研究 γ' 筏化的展望

尽管相场方法在研究镍基单晶高温合金中 γ' 筏

化方面取得明显进展, 但通过相场法研究 γ' 筏化目前还主要处于热力学和力学模型的建立阶段. 作者认为, 多元合金热力学数据的积累是相场法工程应用的基础; 同时, 非平衡热力学条件在相场方程和自由能泛函中表达形式的优化对模拟复杂热处理条件下的 γ' 析出行为也十分重要; 此外, 针对不同成分合金, 获得如 γ 和 γ' 相晶格常数及弹性常数、位错运动及其相互作用机理等微纳观尺度的结构和力学信息, 对相场法研究 γ' 筏化行为至关重要. 因此, 通过相场法实现工程应用中 γ' 筏化行为的再现, 仍旧是较为长远的过程, 需要数据的积累和模型的优化. 为此需要面对以下的挑战:

(1) 完善平衡热力学数据库, 进一步改进非平衡热力学模型. 目前通过相场方法研究非平衡条件下的相场热力学模型, 仅处于模型简单修正阶段, 还没有从根本上建立适合于相场模拟的非平衡热力学模型.

(2) 多元合金弹塑性模型的建立. 不同合金元素对 γ' 筏化过程中晶格错配度、界面能释放、位错阻碍、基体塑性流变等的影响是不同的, 有必要把这些因素综合考虑到弹塑性模型中, 从而改进相场模型.

(3) 扩散流场下 γ' 生长行为的模拟. γ' 的形貌不单是球形、立方形, 还会有枝晶状, 说明 γ' 的生长与扩散流密切相关, 现阶段流场模型应用到凝固过程的枝晶生长中, 是否也可以应用到固态相变中, 有待进一步商榷.

通过前人研究工作的总结, 提以下几点工作展望:

(1) 多元镍基单晶高温合金二维、三维的相场模拟. 现阶段多元镍基单晶高温合金的相场模拟仅能模拟一维情况, 高维模拟还没有实现, 二维和三维的模拟将更容易观察 γ' 的形貌演化, 特别是其界面

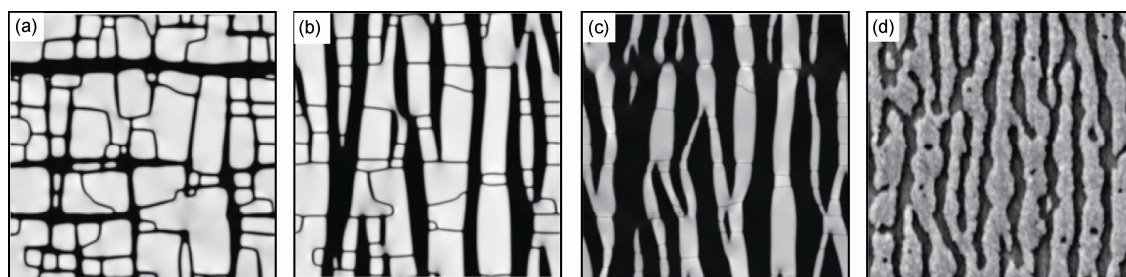


图 4 $\text{Ni}_{82}\text{Al}_{18}$ 合金不同条件下 γ' 形貌的对比^[14]

(a) 950℃时效的相场模拟结果; (b) 950℃, 300 MPa 蠕变的相场弹性模型的模拟结果; (c) 950℃, 300 MPa 蠕变的相场弹性模型的模拟结果; (d) 实验结果

行为.

(2) 将不同冷速及复杂热处理条件下多元镍基单晶高温合金 γ' 形貌的演化考虑到模型中,更好地探究外场作用下 γ' 筏化行为.

(3) 在二元黏塑性相场法研究 γ' 筏化的基础上,借助黏塑性力学思路,开展三元镍基高温合金黏塑性条件下 γ' 筏化行为的研究.

5 结束语

热力学模型的进一步修正、CALPHAD 方法在相场中的广泛应用以及弹塑性力学模型在相场法中的

完善,将为相场法研究镍基单晶高温合金中 γ' 筏化行为提供更广阔的前景.通过耦合 CALPHAD 方法与相场方法,并将热动力学模型应用到相场方法中,可以解决多组元系统复杂热处理条件下的 γ' 析出问题,使得相场法模拟近工况条件下镍基单晶高温合金 γ' 筏化行为成为可能,形核理论在相场模型中的应用将为模拟不同热处理条件下的 γ' 析出提供动力.综合应用弹塑性模型、计算相图方法、形核理论等将为实现镍基单晶高温合金从前期热处理到后期蠕变、疲劳条件下的 γ' 形貌演化及筏化行为的研究提供有力的技术支撑.

参考文献

- 1 Nabarro F R N, Cress C M, Kotschy P. The thermodynamic driving force for rafting in superalloys. *Acta Mater*, 1996, 44: 3189–3198
- 2 Véron M, Brechet Y, Louchet F. Directional coarsening of Ni-based superalloys: Computer simulation at the mesoscopic level. *Acta Mater*, 1996, 44: 3633–3641
- 3 Boussinot G, Bour Y L, Finel A. Phase-field simulation with inhomogeneous elasticity: Comparison with atomic-scale method and application to superalloys. *Acta Mater*, 2010, 58: 4170–4178
- 4 Socrate S, Parks D M. Numerical determination of the elastic driving force for directional coarsening in Ni-superalloys. *Acta Metall Mater*, 1993, 41: 2185–2209
- 5 Zhou N, Shen C, Mills M J, et al. Modeling displacive-diffusional coupled dislocation shearing of γ' precipitates in Ni-base superalloys. *Acta Mater*, 2011, 59: 3484–3497
- 6 Vorontsov V A, Shen C, Wang Y, et al. Shearing of γ' precipitates by a $\langle 1\ 1\ 2 \rangle$ dislocation ribbons in Ni-base superalloys: A phase field approach. *Acta Mater*, 2010, 58: 4110–4119
- 7 Kovarik L, Unocic R, Li J, et al. Microtwinning and other shearing mechanisms at intermediate temperatures in Ni-based superalloys. *Prog Mater Sci*, 2009, 54: 839–873
- 8 Paris O, Fahrman M, Fahrman E. Early stages of precipitate rafting in a single crystal Ni-Al-Mo model alloy investigated by small-angle X-ray scattering and TEM. *Acta Mater*, 1997, 45: 1085–1097
- 9 Gabb T P, Backman D G, Wei D Y, et al. γ' formation in a nickel-base disk superalloy. In: Pollock T M, Kissinger R D, Bowman R R, et al., eds. The 9th International Symposium on Superalloys, Champion, PA, 2000. Warrendale, PA: Minerals, Metals & Materials Society, 2000. 405–414
- 10 Radis R, Schaffer M, Albu M, et al. Multimodal size distributions of γ' precipitates during continuous cooling of UDIMET 720 Li. *Acta Mater*, 2009, 57: 5739–5747
- 11 Sarosi P M, Wang B, Simmons J P, et al. Formation of multimodal size distributions of γ' in a nickel-base superalloy during interrupted continuous cooling. *Scripta Mater*, 2007, 57: 767–770
- 12 Leo P H, Lowengrub J S, Jou H J. A diffuse interface model for microstructural evolution in elastically stressed solids. *Acta Mater*, 1998, 46: 2113–2130
- 13 Banerjee D, Banerjee R, Wang Y. Formation of split pattern of γ' precipitates in Ni-Al via particle aggregation. *Scripta Mater*, 1999, 41: 1023–1030
- 14 Gaubert A, Bouar Y L, Finel A. Coupling phase field and visco-plasticity to study rafting in Ni-base superalloys. *Philos Mag A*, 2010, 90: 375–404
- 15 Pareige-Schmuck C, Soisson F, Blavette D. Ordering and phase separation in low supersaturated Ni-Cr-Al alloys: 3D atom probe and Monte Carlo simulation. *Mater Sci Eng A*, 1998, 250: 99–103
- 16 赵彦, 陈铮, 王永欣, 等. 弹性应变能对 $\text{Ni}_{75}\text{Al}_{17}\text{Zn}_8$ 合金过渡有序行为影响的微观相研究. *科学通报*, 2010, 55: 182–187
- 17 Plapp M, Karma A. Eutectic colony formation: A stability analysis. *Phys Rev E*, 1999, 60: 6865–6889
- 18 Wang Y, Jin Y, Cuitino A, et al. A Phase field microelasticity theory and modeling of multiple dislocation dynamics. *Appl Phys Lett*, 2001, 78: 2324–2326
- 19 Athreya B, Goldenfeld N. Multiscale modeling of solidification: Phase-field methods to adaptive mesh refinement. *Int J Modern Phys B*, 2005, 19: 4525–4565

- 20 Hu S Y, Chen L Q. Solute segregation and coherent nucleation and growth near a dislocation—A phase-field model integrating defect and phase microstructures. *Acta Mater*, 2001, 49: 463–472
- 21 Miehe C, Welschinger F, Hofacker H. A phase field model of electromechanical fracture. *J Mech Phys Solids*, 2010, 58: 1716–1740
- 22 Rubin G, Khachaturyan A G. Three-dimensional model of precipitation of ordered intermetallics. *Acta Mater*, 1999, 47: 1995–2002
- 23 Yamanaka A, Yoshihiro T, Tomita Y. Elastoplastic phase-field simulation of martensitic transformation with plastic deformation in polycrystal. *Int J Mech Sci*, 2010, 52: 245–250
- 24 Clayton J D, Knap J. A phase field model of deformation twinning: Nonlinear theory and numerical simulations. *Phys D*, 2011, 240: 841–858
- 25 Zhou N, Shen C, Mills M J, et al. Phase field modeling of channel dislocation activity and γ' rafting in single crystal Ni-Al. *Acta Mater*, 2007, 55: 5369–5381
- 26 Zhou N, Shen C, Mills M, et al. Contributions from elastic inhomogeneity and from plasticity to γ' rafting in single-crystal Ni-Al. *Acta Mater*, 2008, 56: 6156–6173
- 27 Finel A, Le Bouar Y, Gaubert A, et al. Phase field methods: Microstructures, mechanics properties and complexity. *C R Phys*, 2010, 11: 245–256
- 28 Artemev A, Jin Y, Khachaturyan A G. Three-dimensional phase field model of proper martensitic transformation. *Acta Mater*, 2001, 49: 1165–1177
- 29 Gong X F, Yang G X, Fu Y H, et al. First-principles study of Ni/Ni₃Al interface strengthening by alloying elements. *Comput Mater Sci*, 2009, 47: 320–325
- 30 Kitashima T, Harada H. A new phase-field method for simulating γ' precipitation in multicomponent nickel-base superalloys. *Acta Mater*, 2009, 57: 2020–2028
- 31 Dupin N, Ansara I, Sundman S. Thermodynamic Re-assessment of the ternary system Al-Cr-Ni. *Calphad-Comput Coupling Ph Diagrams Thermochem*, 2001, 25: 279–298
- 32 Ansara I, Dupin N, Lukas H L, et al. Thermodynamic assessment of the Al-Ni system. *J Alloy Compd*, 1997, 247: 20–30
- 33 Kattner U R. The thermodynamic modeling of multicomponent phase equilibria. *JOM*, 1997, 49: 14–19
- 34 Wang Y, Banerjee D, Su C, et al. Field kinetic model and computer simulation of precipitation of L1₂ ordered intermetallics from fcc solid solution. *Acta Mater*, 1998, 46: 2983–3001
- 35 Vaithyanathan V, Chen L Q. 3D Simulation of coarsening of gamma-prime precipitates in a Ni-Al Alloy. In: Antonios G, Patrice E, Turchi A, et al., eds. *Nucleation and Growth Processes in Materials*, Boston, 1999. Massachusetts: MRS Press, 2000. 327–332
- 36 Zhu J, Liu Z, Vaithyanathan V, et al. Linking phase-field model to CALPHAD: Application to precipitate shape evolution in Ni-base alloys. *Scripta Mater*, 2002, 46: 401–406
- 37 Wang J C, Osawa M, Yokokawa T, et al. Modeling the microstructural evolution of Ni-base superalloys by phase field method combined with CALPHAD and CVM. *Comput Mater Sci*, 2007, 39: 871–879
- 38 Kitashima T. Coupling of the phase-field and CALPHAD methods for predicting multicomponent, solid-state phase transformation. *Philos Mag A*, 2008, 88: 1615–1637
- 39 Kitashima T, Wang J C, Harada H. Phase-field simulation with the CALPHAD method for the microstructure evolution of multi-component Ni-base superalloys. *Intermetallics*, 2008, 16: 239–245
- 40 Gunton J D, Miguel M S, Sahni S. *Phase Transitions and Critical Phenomena*. New York: Academic Press, 1983
- 41 Simmons J P, Chen C, Wang Y. Phase field modeling of simultaneous nucleation and growth by explicitly incorporating nucleation events. *Scripta Mater*, 2000, 43: 935–942
- 42 Simmons J P, Wen Y, Shen C, et al. Microstructural development involving nucleation and growth phenomena simulated with phase field method. *Mater Sci Eng A*, 2004, 365: 136–143
- 43 Wen Y H, Simmons J P, Shen C, et al. Phase-field modeling of bimodal particle size distributions during continuous cooling. *Acta Mater*, 2003, 51: 1123–1132
- 44 Boussinot G, Finel A, Le Bouar Y. Phase-field modeling of bimodal microstructures in nickel-based superalloys. *Acta Mater*, 2009, 57: 921–931
- 45 Tien J K, Copley S M. The effect of uniaxial stress on the periodic morphology of coherent gamma prime precipitates in nickel-base super alloy single crystals. *Metall Trans A*, 1971, 2: 215–219
- 46 Véron M, Bréchet Y, Louchet F. Strain induced directional coarsening in Ni based superalloys. *Scripta Mater*, 1996, 34: 1883–1886
- 47 Pineau A. Influence of uniaxial stress on the morphology of coherent precipitates during coarsening—Elastic energy considerations. *Acta Metall*, 1976, 24: 559–564
- 48 Carry C, Strudel J L. Apparent and effective creep parameters in single crystals of a nickel base superalloy—II. Secondary creep. *Acta Metall*, 1978, 26: 859–870

- 49 Miyazaki T, Nakamura K, Mori H. Experimental and theoretical investigations on morphological changes of γ' precipitates in Ni-Al single crystals during uniaxial stress-annealing. *J Mater Sci*, 1979, 14: 1827–1837
- 50 Fredholm A, Strudel J L. On the creep resistance of some nickel crystal. In: Gell M, Kortovich C S, Bricknell R H, et al., eds. The Proceeding of the 5th International Symposium on Superalloys, Champion, 1984. Champion: AIME Press, 1984. 211–220
- 51 Mughrabi H, Ott M, Tetzlaff U. New microstructural concepts to optimize the high-temperature strength of γ' -hardened monocrystalline nickel-based superalloys. *Mater Sci Eng A*, 1997, 234-236: 434–437
- 52 Nathal M V, MacKay R A, Miner R V. Influence of precipitate morphology on intermediate temperature creep-properties of a nickel-base superalloy single-crystal. *Metall Trans A*, 1989, 20: 133–141
- 53 Schneider W, Hammer J, Mughrabi H. Creep deformation and rupture behaviour of the monocrystalline superalloy CMSX-4—A comparison with the alloy SRR-99. In: Antolovich S D, Stusrud R W, Mackay R A, et al., eds. The Proceeding of the 7th International Symposium on Superalloys, Champion, PA, 1992. Warrendale, PA: Minerals, Metals & Materials Society, 1992. 589–598
- 54 Pearson D D, Lemkey F D, Kear B H. Stress coarsening of γ' and its influence of creep properties of a single crystal superalloy. In: Wloder S T, Danesi W P, Kent W B, et al., eds. The Proceeding of the 4th International Symposium on Superalloys. Champion: ASM Press, 1980. 513–520
- 55 Pollock T M, Argon A S. Directional coarsening in nickel-base single crystals with high volume fractions of coherent precipitates. *Acta Mater*, 1994, 42: 1859–1874
- 56 Pollock T M, Argon A S. Creep resistance of CMSX-3 nickel base superalloy single crystals. *Acta Metall Mater*, 1992, 40: 1–30
- 57 Ignat M, Bufere J, Chaix J. Microstructures induced by a stress gradient in a nickel-based superalloy. *Acta Metall Mater*, 1993, 41: 855–862
- 58 Matan N, Cox D C, Rae C M F, et al. On the kinetics of rafting in CMSX-4 superalloy single crystals. *Acta Mater*, 1999, 47: 2031–2045
- 59 Fahrman M, Hermann W, Fahrman E, et al. Determination of matrix and precipitate elastic constants in (γ - γ') Ni-base model alloys, and their relevance to rafting. *Mater Sci Eng A*, 1999, 260: 212–221
- 60 Osawa M, Shiraishi H, Yokokawa T, et al. 3D-FEM calculations of rafting in Ni-base superalloys based on high temperature elastic and lattice parameters. In: Green K A, Pollock T M, Harada H, et al., eds. The 10th International Symposium on Superalloys. Warrendale, PA: Minerals, Metals & Materials Society, 2004. 977–985
- 61 Lee J K. Coherency strain analyses via a discrete atom method. *Scripta Mater*, 1995, 32: 559–564
- 62 Nabarro F R N. The chemical driving force for rafting in superalloys. *Scripta Mater*, 1997, 37: 497–501
- 63 Buffiere J Y, Ignat M. A dislocation based criterion for the raft formation in nickel-based superalloys single crystals. *Acta Metall Mater*, 1995, 43: 1791–1797
- 64 Arrell D, Vallés J. Rafting prediction criterion for superalloys under a multiaxial stress. *Scripta Mater*, 1996, 35: 727–732
- 65 Vallés J, Arrell D. Monte Carlo simulation of anisotropic coarsening in nickel-base superalloys. *Acta Mater*, 42: 2999–3008
- 66 Ohashi T, Hidaka K, Saito M. Quantitative study of the plastic slip deformation and formation of internal stresses in Ni-base superalloys. *Mater Sci Eng A*, 1997, 238: 42–49
- 67 Ohashi T, Hidaka K, Saito M. Elastic stress in single crystal Ni-base superalloys and the driving force for their microstructural evolution under high temperature creep conditions. *Acta Mater*, 1997, 45: 1801–1810
- 68 Khachaturyan A G. *Theory of Structural Transformation in Solids*. New York: Wiley Press, 1983
- 69 McCormack M, Khachaturyan A G, Morris J W. A two-dimensional analysis of the evolution of coherent precipitates in elastic media. *Acta Metall Mater*, 1992, 40: 325–336
- 70 Khachaturyan A G, Semenovakays S, Tsakalakos T. Elastic strain energy of inhomogeneous solids. *Phys Rev B*, 1995, 52: 15909–15919
- 71 Hu S Y, Chen L Q. A phase-field model for evolving microstructures with strong elastic inhomogeneity. *Acta Mater*, 2001, 49: 1879–1890
- 72 Zhu J Z, Chen L Q, Shen J. Morphological evolution during phase separation and coarsening with strong inhomogeneous elasticity. *Model Simul Mater Sci Eng A*, 2001, 9: 499–511
- 73 Chen L Q, Shen J. Applications of semi-implicit Fourier-spectral method to phase field equations. *Comput Phys Commun*, 1998, 108: 147–158
- 74 Zhu J Z, Chen L Q. Coarsening kinetics from a variable-mobility Cahn-Hilliard equation: Application of a semi-implicit Fourier spectral method. *Phys Rev E*, 1999, 60: 3564–3572
- 75 Wang Y Z, Khachaturyan A G. Microstructural evolution during the precipitation of ordered intermetallics in multiparticle coherent system. *Philos Mag A*, 1995, 72: 1161–1171
- 76 Li D Y, Chen L Q. Shape evolution and splitting of coherent particles under applied stresses. *Acta Mater*, 1999, 47: 247–257
- 77 Yang P Y, Li S C, Zheng Z Q, et al. Precipitation and coarsening of coherent and ordered second phase during stress aging by using phase-field simulations. *Rare Metal Mater Eng*, 2007, 36: 1341–1345

- 78 Véron M, Bastie P. Strain induced directional coarsening in nickel based superalloys: Investigation on kinetics using the small angle neutron scattering (SANS) technique. *Acta Mater*, 1997, 45: 3277–3282
- 79 Rodney D, Bounar Y Le, Finel A. Phase field methods and dislocations. *Acta Mater*, 2003, 51: 17–30
- 80 Yeh A C, Rae C, Tin S. High temperature creep of Ru-bearing Ni-base single crystal superalloy. In: Green K A, Pollock T M, Harada H, et al., eds. *The 10th International Symposium on Superalloys*. Warrendale, PA: Minerals, Metals & Materials Society, 2004. 677–685
- 81 Tetzlaff U, Mughrabi H. Enhancement of the high-temperature tensile creep strength of monocrystalline nickel-base superalloys by pre-rafting in compression. In: Pollock T M, Kissinger R D, Bowman R R, et al., eds. *The 9th International Symposium on Superalloys*. Warrendale, PA: Minerals, Metals & Materials Society, 2000. 273–282
- 82 Lahrman D, Field R, Darolia R, et al. Investigation of techniques for measuring lattice mismatch in a rhenium containing nickel base superalloy. *Acta Metall*, 1988, 36: 1309–1320
- 83 Singh A K, Louat N, Sadanana K. Dislocation network formation and coherency loss around gamma-prime precipitates in a nickel-base superalloy. *Metall Mater Trans A*, 1988, 19: 2965–2973
- 84 Reed R, Matan N, Cox D, et al. Creep of CMSX-4 superalloy single crystals: Effects of rafting at high temperature. *Acta Mater*, 1999, 47: 3367–3381
- 85 Keller R, Maier H, Mughrabi H. Characterization of interfacial dislocation networks in a creep-deformed nickel-base superalloy. *Scripta Metall Mater*, 1993, 28: 23–28
- 86 Probst-Hein M, Dlouhy A, Eggeler G. Dislocation interactions in γ -channels between γ' -particles of superalloy single crystals. *Mater Sci Eng A*, 2001, 319–321: 379–382
- 87 Dlouhy A, Probst-Hein M, Eggeler G. Static dislocation interactions in thin channels between cuboidal particles. *Mater Sci Eng A*, 2001, 309–310: 278–282
- 88 Shen C. The fundamentals and applications of phase field method in quantitative microstructural modeling. Dissertation for Doctor Degree. Columbus: The Ohio State University, 2004
- 89 Léonard F, Desai R C. Spinodal decomposition and dislocation lines in thin films and bulk materials. *Phys Rev B*, 1998, 58: 8277–8288
- 90 Carry C, Dermarkar S, Strudel J, et al. Internal stresses due to dislocation walls around second phase particles. *Metall Mater Trans A*, 1979, 10: 855–860
- 91 Ubachs R L J M, Schreurs P J G, Geers M G D. Phase field dependent viscoplastic behaviour of solder alloys. *Int J Solids Struct*, 2005, 42: 2533–2558
- 92 Uehara T, Tsujino T, Ohno N. Elasto-plastic simulation of stress evolution during grain growth using a phase field model. *J Cryst Growth*, 2007, 300: 530–537
- 93 Guo X, Shi S, Zhang Q, et al. An elastoplastic phase-field model for the evolution of hydride precipitation in zirconium. Part II: Specimen with flaws. *J Nucl Mater*, 2008, 378: 120–125