

基于第一性原理的5083铝合金第二相理化性质研究

许磊¹, 方志杰¹, 付向辉¹, 李江宇¹, 汪育晶¹, 黄文辉²

¹广西科技大学机械与汽车工程学院, 广西 柳州

²广西广投柳州铝业股份有限公司, 广西 柳州

收稿日期: 2024年3月28日; 录用日期: 2024年5月21日; 发布日期: 2024年5月29日

摘要

为揭示5083合金第二相对合金性能影响机理, 本文采用相图计算的方式, 研究了5083合金中潜在的第二相种类及数量, 并在此基础上, 通过量子力学计算的方法, 系统探究了合金中潜在在各相的弹性常数以及 α -Al基体间费米能差值等理化性质。研究结果表明合金中潜在在第二相主要有 β -Al₃Mg₂、Al₆Mn、T-AlCuMgZn、E-AlCrMgMn、Mg₂Si、Al₃M₂O₂₂及Al₃Fe, 其体模量从大到小排布顺序为Al₃Ti、Al₆Mn、Al₃Fe、E-AlCrMgMn、T-AlCuMgZn、Mg₂Si及 β -Al₃Mg₂, 剪切模量亦类同, 除Mg₂Si与 β -Al₃Mg₂互换位置。合金中与 α -Al基体腐蚀电位差异大小排布顺序为Mg₂Si、Al₃Fe、Al₆Mn、T-AlCuMgZn、E-AlCrMgMn、 β -Al₃Mg₂以及Al₃Ti, 各相与 α -Al基体间形成微腐蚀电池能力依次减弱。

关键词

5083铝合金, 第二相, 相图计算, 第一性原理计算

Study on the Physical and Chemical Properties of the Second Phase of 5083 Aluminum Alloy Based on the First Principles Calculation

Lei Xu¹, Zhijie Fang¹, Xianghui Fu¹, Jiangyu Li¹, Yujing Wang¹, Wenhui Huang²

¹School of Mechanical and Automotive Engineering, Guangxi University of Science and Technology, Liuzhou Guangxi

²Guangxi GIG Liuzhou Aluminum Co., Ltd., Liuzhou Guangxi

Received: Mar. 28th, 2024; accepted: May 21st, 2024; published: May 29th, 2024

文章引用: 许磊, 方志杰, 付向辉, 李江宇, 汪育晶, 黄文辉. 基于第一性原理的 5083 铝合金第二相理化性质研究[J]. 材料科学, 2024, 14(5): 679-687. DOI: 10.12677/ms.2024.145074

Abstract

This study investigates the impact of the second phase on the properties of 5083 alloy by employing phase diagram calculations to analyze the types and quantities of the second phase present. Utilizing quantum mechanics calculations, the elastic constants of potential phases in the alloy and the Fermi energy difference between the alloy and the α -Al matrix were examined. The findings reveal that the predominant second phases in the alloy consist of β -Al₃Mg₂, Al₆Mn, T-AlCuMgZn, E-AlCrMgMn, Mg₂Si, Al₃M₂Do₂₂, and Al₃Fe. The bulk modulus ranking from highest to lowest are Al₃Ti, Al₆Mn, Al₃Fe, E-AlCrMgMn, T-AlCuMgZn, Mg₂Si, and β -Al₃Mg₂, with a similar trend observed for the shear modulus, except for Mg₂Si and β -Al₃Mg₂ switching positions. The difference in corrosion potential between the phases and the α -Al matrix follows the order of Mg₂Si, Al₃Fe, Al₆Mn, T-AlCuMgZn, E-AlCrMgMn, β -Al₃Mg₂, and Al₃Ti. The ability to form micro-corrosion cells between each phase and the α -Al matrix gradually diminishes.

Keywords

5083 Aluminum Alloy, The Second Phase, Phase Diagram Calculation, The First Principles Calculation

Copyright © 2024 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

5083 合金属于 Al-Mg 系合金, 具有轻质、易成形、抗腐蚀等特性而被广泛应用于造船、集装箱以及新能源汽车等领域[1] [2]。与 Al-Cu、Al-Mg-Si、Al-Zn-Mg-Cu 等通过热处理析出强化不同, 5083 合金其生产过程不需进行固溶、淬火、时效等工序, 其主要通过固溶强化和形变强化[3] [4]。然而, 研究表明: 5083 合金中除 β 相对耐蚀性能具有重要影响外, 其它各相同样左右材料的微观组织, 进而影响合金服役性质[5] [6]。如 Mn 在铝基体中的极限固溶度为 1.8%, Al-Mg 合金中 Mn 含量通常低于 1%, 主要以 MnAl₆ 形式存在, 对合金再结晶起抑制作用, 同时能以(FeMn)Al₆、Al₁₂(FeMn)₃Si 等化合物形式溶解 Fe、Si 杂质, 降低 Fe、Si 对材料性能的不利影响, 但 Mn 含量的提高会降低材料塑性[7] [8]。Cr 一般以 Al₁₂Mg₂Cr 形式分布于合金中, 可抑制合金再结晶晶粒长大, 并提高材料耐蚀性能, 但 Cr 元素易与部分杂质元素形成粗大化合物[9]。Ti 元素在铸造过程中常以细化剂的方式加入, 可细化铸锭晶粒尺寸[10]。Al-Mg 合金中的 Fe、Si 元素通常为有害杂质, 对抗腐蚀性能、焊接性能等有特殊要求的材料, 需严格控制 Fe、Si 含量[11] [12]等。

为进一步提升 5083 合金耐蚀能力与力学性质, 部分学者采用合金成分优化设计、加工工艺调整以及热处理的方式, 研究了合金第二相与微观组织对合金服役性能影响规律, 为合金高性能 5083 合金生产提供了良好的理论支撑与技术方案[13] [14]。苏天等人通过研究 5083 合金成分变化对材料耐蚀性能的影响表明, Mn、Si 以及 Fe 元素的变化, 会在合金中相应生成不同含量的 Al₆Mn、Mg₂Si 以及 Al₃Fe 等, 各个相含量的变化, 会导致合金耐蚀能力出现差异[15]。涂杨帆对 5083 铝合金在不同模拟海水介质中的腐蚀行为的研究发现, Al (Fe, Mn)复合相会在服役过程中大量脱落, 使得合金的点蚀速率加快[16]。覃秋慧等人的研究显示, 合金中 β 相的含量以及分布均会影响合金的耐腐蚀性能, 且合金中随着第二相数量的增

多以及 β 相的连续分布出现, 其耐蚀能力愈发下降[17]。陈维等的研究则发现 Cu、Zn 元素的加入能显著提高合金的力学性能, 生成的 $MgZn_2$ 相能够降低基体电极电位差异, 提升材料耐蚀能力[18]。

上述相关研究均表明: 5083 合金中第二相的种类以及数量的差异, 会造成合金性质的不同。随着合金成分的变化以及加工工艺的不同, 5083 合金中第二相种类数量往往会发生明显改变。探明各第二相自身理化性质及其与基体间电极电位差异, 对于调控 5083 铝合金服役性能, 无疑具有重要的理论与应用价值。在本文中, 通过采用量子力学计算的方式, 对 5083 合金中潜在第二相的理化性质的计算, 明晰了各相形成热、结合能、弹性性质以及费米能, 为 5083 合金成分优化设计以及工艺指导提供理论支撑与工艺调控指引。

2. 研究模型与方法

2.1. 研究模型

文中研究的 5083 铝合金潜在第二相通过采用相图计算的方式确定, 计算后经文献查阅, 确定各相的空间点群号、点群、晶系、晶格参数以及各个原子占据位置, 并依据这些结构信息, 构建相应的晶体学模型。同时, 也对铝基体的基本性质进行了计算作为参照, 采用纯铝的晶格常数进行计算, 即 $a = 0.40495$ nm。

2.2. 计算方法

文中相图计算采用 JMatPro 软件的 AI 数据库计算完成, 量子力学计算则使用基于 Materials Studio 软件的 CASTEP 程序包进行[19]。在所有计算过程中, 采用超软赝势描述计算体系中离子和电子间的相互作用关系[20]并采用 BFGS 方法进行晶体的结构优化[21]。交换关联能和交换关联势采取 PBE 形式进行计算采用广义梯度近似 GGA 处理。能量的自洽循环计算收敛精度设置为 5×10^{-7} eV/atom, 模型中各原子之间的相互作用力小于等于 0.01 eV/nm, 公差偏移则不大于 $5.0e-4\text{\AA}$, 应力偏差小于等于 0.01 GPa, 计算过程中所采用截断能和 K 点的参数设置则根据计算体系变化, 各体系的计算均满足能量收敛性测试, 具体的相关参数设置见后述章节(3.2.2 节)。

3. 结果与讨论

3.1. 5083 合金潜在物相计算

5083 合金化学成分范围以及计算成分如表 1 所示, 通过热力学相图计算软件 JMatPro 计算了 5083 铝合金中相的种类以及相含量, 计算成分中 Fe、Si、Zn、Ti 以及 Cu 元素采用上限计算, 以充分反映合金中潜在的物相种类。

Table 1. Chemical composition range of 5083 aluminum alloy (mass fraction %)

表 1. 5083 铝合金化学成分范围(质量分数%)

Elements	Mg	Mn	Cr	Fe	Si	Zn	Ti	Cu	Others		Al
									Per	Total	
Standards	4.0~4.9	0.4~1.0	0.05~0.25	≤ 0.4	≤ 0.4	≤ 0.25	≤ 0.15	≤ 0.1	0.05	0.15	Bal.
Calculate	4.45	0.7	0.15	0.4	0.4	0.25	0.15	0.1			Bal.

图 1 为 JMatPro 相图计算结果(α -Al 未计入在内), 图 1(a)所示为该合金在 20~700°C 过程中所伴随的相变。图 1(b)为 5083 标准成分在室温状态下所含第二相的种类和含量。从图 1(a)中可以看出, 随着温度

的降低(横坐标从右至左),合金中先后出现大量的第二相,且第二相含量与种类均出现显著变化,其中变化最为显著的为 Al-Mg 合金中广泛存在的 β - Al_3Mg_2 相,随着温度的降低而逐渐增多,出现相同变化趋势的还有 T 相与 Al_3Fe 相。对合金在室温(25°C)状态下第二相种类含量的计算表明,5083 铝合金中除 α -Al 基体外含有的第二相主要有 β - Al_3Mg_2 、 Al_6Mn 、T-AlCuMgZn、E-AlCrMgMn、 Mg_2Si 、 $\text{Al}_3\text{M}_2\text{Do}_{22}$ 及 Al_3Fe 这几种。

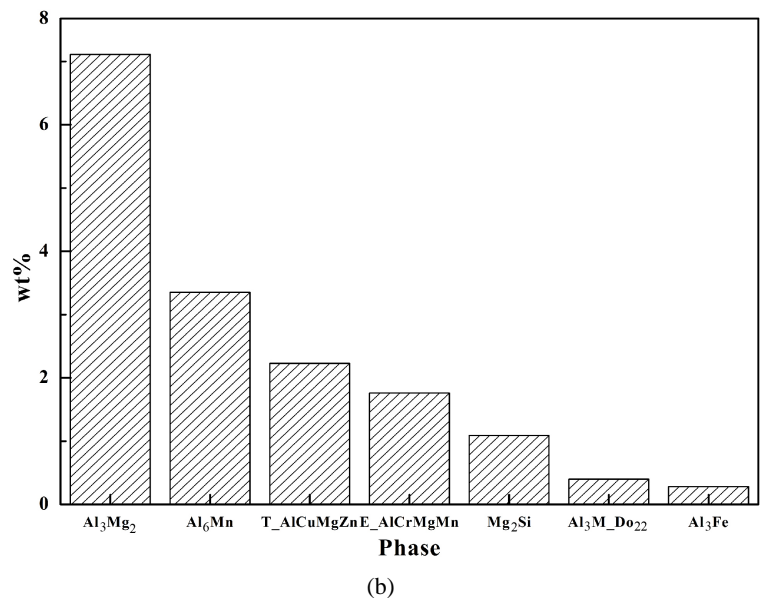
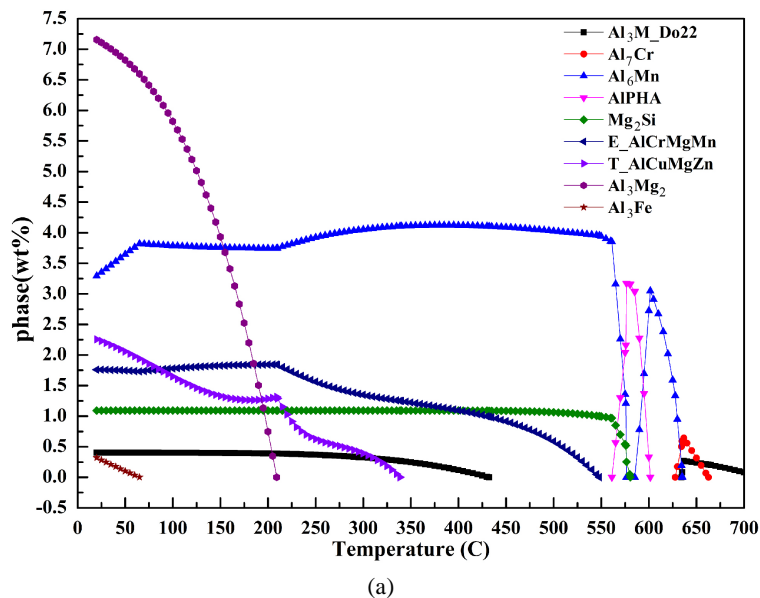


Figure 1. Calculation of theoretical components using JMatPro phase diagram (a) phase transformation during solidification, (b) content of each phase in the matrix at room temperature

图 1. 采用 JMatPro 相图计算理论成分。(a) 凝固过程中相变, (b) 室温时基体当中各个相的含量

各相的元素成分计算如表 2 所示,可以看出,除了 E-AlCrMgMn 相与 T-AlCuMgZn 相元素成分较为

复杂外, 其它几个相的合金元素均较为简单, 虽也有部分含有极微量的其它元素, 但基本能够确定各个相的具体化学结构。结合一些学者研究可知, 5083 合金中主要存在的第二相为 β - Al_3Mg_2 、 Al_6Mn 、 T-AlCuMgZn 、 E-AlCrMgMn 、 Mg_2Si 、 Al_3Ti 及 Al_3Fe 。E-AlCrMgMn 相为 $\text{Al}_{18}\text{Cr}_2\text{Mg}_3$, T-AlCuMgZn 相为 $\text{Mg}_{32}(\text{Al,Zn})_{49}$ 。

Table 2. Theoretically calculated content of main alloying elements in each phase (wt.%)

表 2. 理论计算各相主要合金元素含量(wt.%)

Phase	Al	Cr	Cu	Fe	Mg	Mn	Si	Ti	Zn
α -Al	99.65	*	*	*	0.35	*	*	*	*
Al_3Fe	59.18	0.01	*	40.68		0.14	*		
β - Al_3Mg_2	63.73		*		36.00				0.27
Al_6Mn	74.55	*	*	8.51	0.01	16.93			
$\text{Al}_3\text{MDO}_{22}$	62.84					*		37.16	
Mg_2Si					63.38		36.62		
E_AlCrMgMn	73.01	8.53			10.96	7.51			
T_AlCuMgZn	53.10		4.49		32.05				10.36

*极微量。

3.2. 5083 合金潜在物相性质计算

3.2.1. 潜在物相晶体结构信息

通过晶体学数据库 Find IT 以及相关文献查询所得各物相晶体结构信息(含空间点群、晶系、晶格常数等信息)如表 3 所示。根据各个第二相的晶体结构信息, 建立各相的晶体模型如图 2 所示。同时, 采用铝基体为参照, 建立了 α -Al 基体的相应晶体模型, 计算不考虑溶质元素固溶对基体晶体结构参数的影响, 整个计算中采用纯铝的晶格常数进行计算, 即 $a = b = c = 4.04 \text{ \AA}$ 。

Table 3. Point group number, point group, crystal system and lattice parameters of each potential second phase space

表 3. 各潜在第二相空间点群号、点群、晶系以及晶格参数

Phase	No.	Space group	Structure	Lattice demission \AA
α -Al	229	$\text{Im}\bar{3}\text{m}$	Cubic	$a = b = c = 4.04$
Al_3Fe	12	$\text{P6}_3/\text{mmc}$	Hexagonal	$a = 15.394, b = 8.024, c = 12.418$
β - Al_3Mg_2	141	$\text{I4}_1/\text{amd}$	Tetragonal	$a = b = 6.440, c = 19.21$
Al_6Mn	63	Cmcm	Orthorhombic	$a = 7.554, b = 6.468, c = 8.826$
Al_3Ti	139	$\text{I4}/\text{mmm}$	Tetragonal	$a = b = 3.84982, c = 8.63862$
Mg_2Si	225	$\text{Fm}\bar{3}\text{m}$	Cubic	$a = b = c = 6.385$
E-AlCrMgMn	227	$\text{Fd-}3\text{mS}$	FCC	$a = b = c = 14.514$
T-AlCuMgZn	204	$\text{Im-}3$	Cubic	$a = b = c = 1.416$

3.2.2. 弹性性能

通过调控合金中物相种类及数量以控制 5083 合金的服役性能是生产高性能合金板材的关键步骤。除

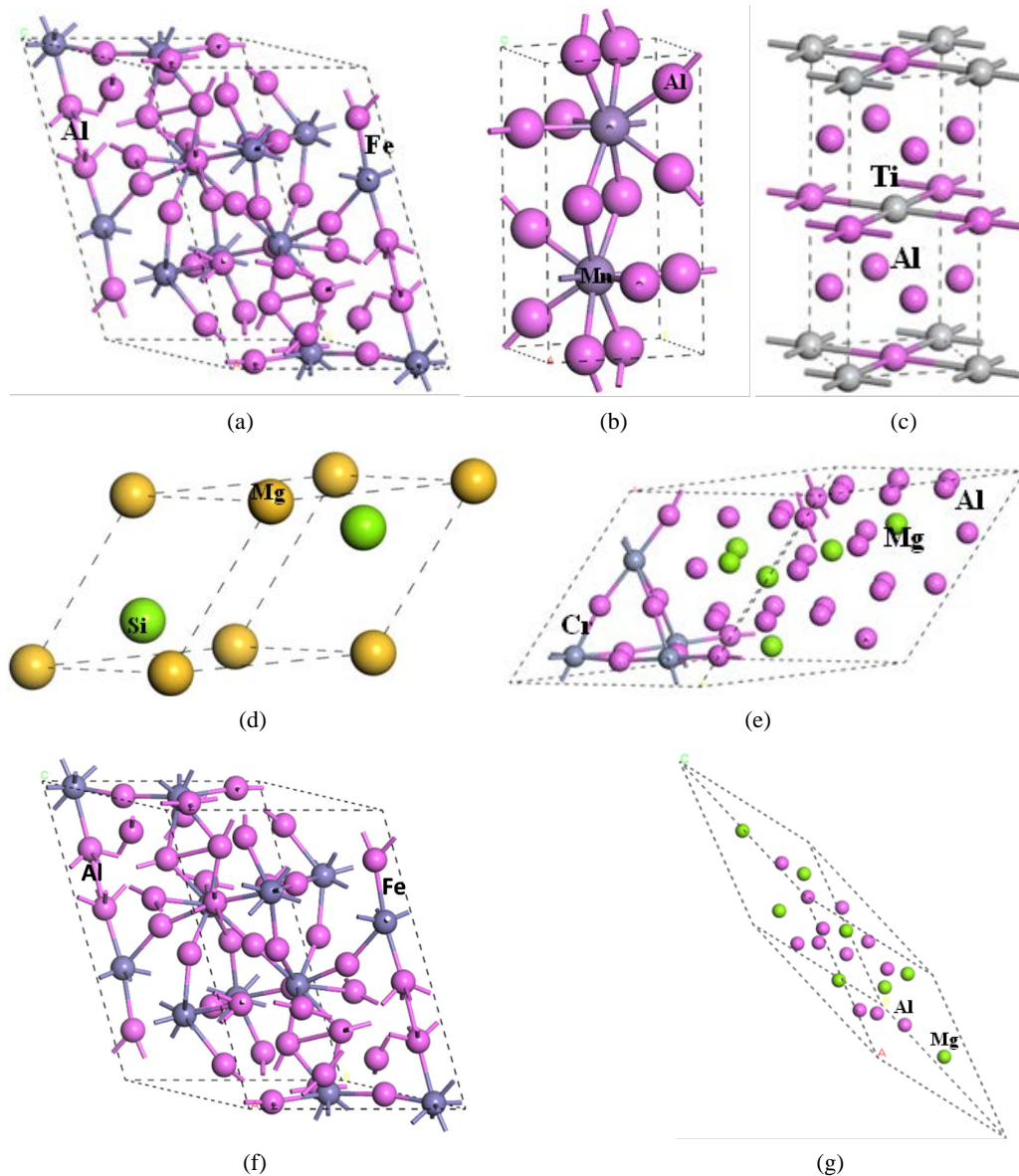


Figure 2. Schematic diagram of the potential phase crystal structure of 5083 alloy (a) Al_3Fe , (b) Al_6Mn , (c) Al_3Ti , (d) Mg_2Si , (e) E-AlCrMgMn, (f) T-AlZnMgCu, (g) $\beta\text{-Al}_3\text{Mg}_2$

图 2. 5083 合金潜在物相晶体结构示意图(a) Al_3Fe , (b) Al_6Mn , (c) Al_3Ti , (d) Mg_2Si , (e) E-AlCrMgMn, (f) T-AlZnMgCu, (g) $\beta\text{-Al}_3\text{Mg}_2$

基体与第二相界面微结构以及力学性能外，基体自身弹性性质也是影响材料服役性能的又一重要因素。

材料的弹性模量通常可以表征为材料在外力作用下产生单位弹性变形时对应的应力的值，弹性模量包括体模量(B)、剪切模量(G)和杨氏模量(E)，可以用来反映了材料抵抗变形的难易程度[22]。体模量大小与材料抵抗压缩变形能力呈正相关，具有大数值体模量的材料难以被压缩变形；而剪切模量常用来反应材料抵抗剪切变形的能力，数值越大则越难以发生剪切形变。杨氏模量为材料发生弹性形变时的应力与应变过程中纵向应力与发生的纵向应变之间的比值，数值越大的材料产生弹性变形所需的力也越大。材料的泊松比(ν)反映可用来反应材料的弹性性质，通常其值越大，弹性性能越好[23]。为判断某个物相的韧性/脆性，常用体模量与剪切模量的比值(B/G)来判定，当 B/G 值大于 1.75 时，材料表现为良好的韧

性,而小于 1.75 时,意味着材料更多的展现为脆性,且该值超过 1.75 越多,材料越脆[24]。各向异性因子(A)反应物相在不同方向理化性质的差异程度[25],其值偏离 1 越大,各向异性越强。

通过计算,5083 合金中各第二相的弹性性质如表 4 所示。可以看出,基体当中除 β -Al₃Mg₂ 和 Mg₂Si 外,其它各相的弹性模量均高于 α -Al 基体,尤其是 Al₆Mn 以及 Al₃Ti 这两个相,体模量 B、剪切模量 G 以及杨氏模量 E 值均明显大于 α -Al 基体对应数值。这表明当基体中出现这些第二相时,其自身往往会形成硬质点,尤其在材料的塑性形变过程中,调控该类相的占比对于材料性能的控制十分重要。大量研究表明:第二相与 α -Al 基体间的界面微观组织及性能对材料辅助性质具有重要影响外,第二相自身性质也是关键。当第二相强度大于 α -Al 基体时,位错往往只能绕过该相,且当位错运动至该相时,会由于第二相的反作用力而发生削弱,进而提升材料的形变抗力。

合金中潜在第二相体模量排布顺序为 Al₃Ti、Al₆Mn、Al₃Fe、E-AlCrMgMn、T-AlCuMgZn、Mg₂Si 及 β -Al₃Mg₂,而剪切模量从大到小的排布顺序为 Al₃Ti、Al₆Mn、Al₃Fe、E-AlCrMgMn、Mg₂Si、T-AlCuMgZn 及 β -Al₃Mg₂,与体模量的趋势基本一致,除了 Mg₂Si 和 T-AlCuMgZn 这两个相二者有互换。可以得知,在合金发生压缩形变时, β -Al₃Mg₂ 和 Mg₂Si 相会在 α -Al 基体之前发生形变,而其它潜在第二相则表现出较基体更强的抗压缩能力;而当合金发生剪切形变时, β -Al₃Mg₂ 相表现较 α -Al 基体较“软”,容易发生剪切变形外,其它相都会表现出较强的抗剪切形变能力。同时,从各第二相的各向异性表征参数 A 可以看出,除 β -Al₃Mg₂ 相值偏移 1 较大外,其它各相偏离值均较小,这意味着基体当中的各其它第二相形变向异性性能相对较小。

Table 4. Calculation parameters and the obtained elastic mechanical properties of the phases may present in 5083 aluminum alloy

表 4. 5083 铝合金主要第二相计算参数及弹性力学性质

Phase	Cut off energy/eV	K point	Elastic constants					
			B	G	E	ν	A	B/G
α -Al	540	15×15×15	78.47	22.99	76.44	0.66	6.24	3.41
β -Al ₃ Mg ₂	480	15×15×15	48.75	20.26	53.37	0.31	0.33	2.41
Al ₆ Mn	480	12×12×12	102.66	74.27	179.51	0.21	0.84	1.38
E-AlCrMgMn	450	12×12×12	82.86	50.66	126.25	0.25	1.17	1.64
T-AlCuMgZn	450	12×12×12	79.61	37.96	98.27	0.29	1.09	2.10
Mg ₂ Si	480	15×15×12	52.21	44.24	103.49	0.17	0.97	1.18
Al ₃ Ti	480	12×12×12	103.46	88.45	206.51	0.17	1.364	1.16
Al ₃ Fe	480	12×12×10	90.92	67.43	162.18	0.20	0.91	1.35

3.2.3. 各相与基体电化学势差

依据电子理论,电子的分布按照能量最低法则,即电子优先填充能量最低的能级,再依次填充能量较高的能级。费米能级代表电子占据能级的最高水平,处于费米能级的电子最为活跃,在腐蚀过程中优先失去,且费米能级越高,电子越优先失去。合金中含有多种平衡相,因此合金中必然存在费米能级差异的区域,费米能级高的区域为阳极,而费米能级低的区域为阴极,构成一个腐蚀电偶,并使得费米能级低的金属加速腐蚀,这正是合金电化学腐蚀的机理。由此可以得出以下关系:两个平衡相接触时,体系中化学成分不同区域的费米能级差值的大小反映电位差值的大小,且费米能值差值越大,电位差也越大。此外,由电子理论可知,在体系中,费米能级高的电子将向着费米能级低的区域移动,即通过降低体系的总能,最终使得能量平衡。

表5为各平衡相与 α -Al基体之间的费米能级差值,从中观察到,与 α -Al相费米能差值最大的是 Mg_2Si 相(3.66 eV/atom),而费米能差值最小的是 Al_3Ti 相,说明 Mg_2Si 相与基体间的电位差大于 Al_3Ti 相。当各平衡相在基体中析出时, Mg_2Si 相与基体电位差最高,最容易与基体构成微腐蚀原电池,且基体为阴极而平衡相 Mg_2Si 为阳极,电子从 Mg_2Si 相流向基体加速基体的腐蚀,降低基体合金的耐腐蚀能力。随着 Mg_2Si 相析出数量的增加,基体中微腐蚀原电池的数量随之增加,合金的耐蚀性能也随之下落。从表中还能够得到与 α -Al基体相比,费米能级差值也即这些相与基体发生电解腐蚀的难易程度顺序为: Mg_2Si 、 Al_3Fe 、 Al_6Mn 、T-AlCuMgZn、E-AlCrMgMn、 β - Al_3Mg_2 以及 Al_3Ti 。C Varge通过测量比较 Mg_2Si 、 Al_3Fe 和 Al_6Mn 相与基体的表面电位之差得出,这些第二相与基体的电位差从大到小依次为 Mg_2Si 、 Al_3Fe 、 Al_6Mn ,与本章的计算结果一致[26]。杨磊对Al-Mg-Zn合金中第二相的模拟研究得出T相的腐蚀电位低于 α -Al的腐蚀电位,二者腐蚀电位相差较小,也与本文计算结果一致[4]。因此本章通过第一性原理计算所得结果具有可靠性且为后续实验提供理论依据。

Table 5. Fermi energy of the second phase and its Fermi level difference with the α -Al phase
表 5. 第二相的费米能及其与 α -Al相费米能级差值

Phase	Fermi energy/eV	Fermi level difference with the α -Al phase/eV
α -Al	7.814	0
Al_3Ti	8.084	0.27
β - Al_3Mg_2	8.21	0.40
E-AlCrMgMn	7.404	0.41
T-AlCuMgZn	5.954	1.86
Al_6Mn	5.944	1.87
Al_3Fe	4.761	3.053
Mg_2Si	4.156	3.66

4. 结论

本文通过相图计算与量子力学计算的方式,系统研究了5083合金潜在物相种类以及各个物相理化性质,得到结论如下:

- 1) 5083合金中潜在物相及含量排布顺序为 β - Al_3Mg_2 、 Al_6Mn 、T-AlCuMgZn、E-AlCrMgMn、 Mg_2Si 、 Al_3Ti 及 Al_3Fe 。
- 2) 合金中潜在第二相体模量排布顺序为 Al_3Ti 、 Al_6Mn 、 Al_3Fe 、E-AlCrMgMn、T-AlCuMgZn、 α -Al、 Mg_2Si 及 β - Al_3Mg_2 ,剪切模量从大到小的排布顺序为 Al_3Ti 、 Al_6Mn 、 Al_3Fe 、E-AlCrMgMn、 Mg_2Si 、T-AlCuMgZn、 α -Al及 β - Al_3Mg_2 ;而除 β - Al_3Mg_2 相各向异性较大外,其它各相形变相异性较小。
- 3) 与 α -Al费米能差异大小排布顺序为 Mg_2Si 、 Al_3Fe 、 Al_6Mn 、T-AlCuMgZn、E-AlCrMgMn、 β - Al_3Mg_2 和 Al_3Ti ,各相与基体形成微腐蚀电池能力大小按照如此顺序排布。

基金项目

广西科技重大专项(编号:桂科AA23023028)。

参考文献

- [1] 张新明,邓运来. 新型合金材料——铝合金[M]. 北京:中国铁道出版社,2018.

- [2] 罗芬, 吴锡坤. 铝型材加工适用技术手册[M]. 长沙: 中南大学出版社, 2006: 447-453.
- [3] 王月, 吴庭翱. 含钕 Al-Mg 合金的抗应力腐蚀和剥落腐蚀性能研究[J]. 中国腐蚀与防护学报, 2005, 25(4): 218-221.
- [4] 杨磊. Zn 对 5083 高镁铝合金腐蚀性能的影响与 Al-Mg-(Zn)合金中第二相的模拟研究[D]: [硕士学位论文]. 长沙: 中南大学, 2012.
- [5] Choi, D.-H., Ahn, B.-W., Quesnel, D.J. and Jung, S.-B. (2013) Behavior of β Phase (Al_3Mg_2) in AA 5083 during Friction Stir Welding. *Intermetallics*, **35**, 120-127. <https://doi.org/10.1016/j.intermet.2012.12.004>
- [6] Goswami, R., Spanos, G., Pao, P.S. and Holtz, R.L. (2010) Precipitation Behavior of the β Phase in Al-5083. *Materials Science and Engineering: A*, **527**, 1089-1095. <https://doi.org/10.1016/j.msea.2009.10.007>
- [7] 赵婧婧. 5052 铝合金微合金化及均匀化退火工艺研究[D]: [硕士学位论文]. 重庆: 重庆大学, 2014.
- [8] Shuaib, A.N. (2002) Mechanical Properties of Al-2.5Mg-0.1Mn-Si-Cr-Fe Alloys. *Materials & Design*, **23**, 181-187. [https://doi.org/10.1016/S0261-3069\(01\)00067-X](https://doi.org/10.1016/S0261-3069(01)00067-X)
- [9] Lodgaard, L. and Ryum, N. (2000) Precipitation of Dispersoids Containing Mn and/or Cr in Al-Mg-Si Alloys. *Materials Science & Engineering: A*, **283**, 144-152. [https://doi.org/10.1016/S0921-5093\(00\)00734-6](https://doi.org/10.1016/S0921-5093(00)00734-6)
- [10] 尹奎波. Al-Mg 合金的晶粒细化研究[D]: [硕士学位论文]. 济南: 山东大学, 2005.
- [11] Conserva, M., Trippodo, R. and Donzelli, G. (1992) Aluminium and Its Applications. Edimet, Brescia.
- [12] 田荣璋, 王祝堂. 铝合金及其加工手册[M]. 长沙: 中南工业大学出版社, 2000.
- [13] 周庆波, 张宏伟, 刘科研, 等. 化学成分对 5083 铝合金性能的影响[J]. 轻合金加工技术, 2007, 35(10): 33-34.
- [14] 罗兵辉, 单毅敏, 柏振海. 退火温度对淬火后冷轧 5083 铝合金组织及腐蚀性能的影响[J]. 中南大学学报: 自然科学版, 2007, 38(5): 802-806.
- [15] 苏天, 赵艳君, 胡治流, 等. 5083 铝合金成分优化及耐腐蚀性能研究[J]. 有色金属工程, 2020, 10(7): 32-39.
- [16] 涂杨帆. 5083 铝合金在不同模拟海水介质中的腐蚀行为研究[D]: [硕士学位论文]. 济南: 山东建筑大学, 2017.
- [17] 覃秋慧, 韦昌, 冼满峰. 补充退火对船用 5083-H116 铝合金板材腐蚀和力学性能的影响[J]. 轻合金加工技术, 2021, 49(3): 31-36.
- [18] 陈维, 罗兵辉, 高阳, 等. 添加少量 Zn、Cu 的 5083 铝合金的力学和腐蚀性能[J]. 铝加工, 2018(1): 9-14.
- [19] Clark, S.J., Segall, M.D., Pickard, C.J., et al. (2005) First Principles Methods Using CASTEP. *Zeitschrift für Kristallographie*, **220**, 567-570. <https://doi.org/10.1524/zkri.220.5.567.65075>
- [20] Kresse, G. and Hafner, J. (1994) Norm-Conserving and Ultrasoft Pseudopotentials for First-Row and Transition Elements. *Journal of Physics: Condensed Matter*, **6**, 8245-8257. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/6/40/015>
- [21] Zope, R.R. and Mishin, Y. (2003) Interatomic Potentials for Atomistic Simulations of the Ti-Al System. *Physical Review B*, **68**, Article 024102. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.68.024102>
- [22] Gilman, J.J. and Roberts, B.W. (1961) Elastic Constants of TiC and TiB₂. *Journal of Applied Physics*, **32**, 1405. <https://doi.org/10.1063/1.1736249>
- [23] Mott, P.H., Dorgan, J.R. and Roland, C.M. (2008) The Bulk Modulus and Poisson's Ratio of "Incompressible" Materials. *Journal of Sound and Vibration*, **312**, 572-575. <https://doi.org/10.1016/j.jsv.2008.01.026>
- [24] Henann, D.L. and Anand, L. (2009) Fracture of Metallic Glasses at Notches: Effects of Notch-Root Radius and the Ratio of the Elastic Shear Modulus to the Bulk Modulus on Toughness. *Acta Materialia*, **57**, 6057-6074. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2009.08.031>
- [25] Daalderop, G.H., Kelly, P.J. and Schuurmans, M.F. (1990) First-Principles Calculation of the Magnetocrystalline Anisotropy Energy of Iron, Cobalt, and Nickel. *Physical Review B*, **41**, 11919-11937. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.41.11919>
- [26] Vargel, C. (2004) Preface to the Original French Edition. In: *Corrosion of Aluminium*, Elsevier, Amsterdam, 13-14. <https://doi.org/10.1016/B978-008044495-6/50003-3>