

Mg 和 Cu 在 Al-Zn-Mg 合金时效初期的 Monte Carlo 模拟

林柳秋, 荣 莉, 王 为, 聂祚仁

(北京工业大学 材料科学与工程学院, 北京 100124)

摘 要: 采用 Monte Carlo 方法模拟研究 Al-6Zn-(2Mg)和 Al-10Zn-1.9Mg-(1.7Cu)合金时效初期微观结构的演变过程, 并分析 Mg 和 Cu 的基本作用。结果表明: 时效初期, Al-6Zn 合金中的 Zn 原子有较强的团聚倾向, 形成了明显的 Zn 原子簇; 而在 Al-6Zn-2Mg 合金中出现明显的 Zn 原子簇、Zn-Mg 原子簇及少量的 Mg 原子簇。Mg 的作用是通过 Mg 和 Zn 原子间强烈的相互作用形成 Zn、Mg 原子交替排布的短程有序结构。含铜的 Al-10Zn-1.9Mg-1.7Cu 合金中, 不仅形成了 Zn 原子簇、Mg 原子簇和 Zn-Mg 原子簇, 还形成了少量 Zn-Cu 原子簇、Mg-Cu 原子簇和 Zn-Mg-Cu 原子簇。Cu 的存在促进 Zn 原子和 Zn-Mg 原子团簇化, 但对 Mg 原子的团簇化影响不大。

关键词: Al-Zn-Mg 合金; Monte Carlo 方法; 时效初期

中图分类号: TG146.2

文献标志码: A

Monte Carlo simulation of effect of Mg and Cu on precipitation of Al-Zn-Mg alloys during initial ageing stage

LIN Liu-qiu, RONG Li, WANG Wei, NIE Zuo-ren

(College of Materials Science and Engineering, Beijing University of Technology, Beijing 100124, China)

Abstract: The Monte Carlo method was applied to simulate the microstructural evolution of Al-6Zn-(2Mg) and Al-10Zn-1.9Mg-(1.7Cu) alloys during the initial ageing stage, and the effect of Mg and Cu was analyzed. The simulation results show that there are Zn clusters in Al-6Zn alloy during the initial ageing stage. while in Al-6Zn-2Mg alloy, there are distinct Zn clusters, Zn-Mg clusters and a spot of Mg clusters in the atom configurations. The effect of Mg is forming Zn-Mg short range order structure by strong interaction of Mg and Zn atom. In Al-10Zn-1.9Mg-1.7Cu alloy, there are distinct Zn clusters, Zn-Mg clusters and Mg clusters in the atom configurations. Furthermore, there are seldom Zn-Cu clusters, Mg-Cu clusters and Zn-Mg-Cu clusters. The presence of Cu stimulates the clustering of Zn and Zn-Mg, while has no significant influence on the clustering of Mg atom.

Key words: Al-Zn-Mg alloys; Monte Carlo method; initial ageing stage

采用直接的、动态的原子图像和基于统计的量化数据做支撑, 区分表象与本质因素对铝合金相变过程的影响, 是国际上重要的研究方向^[1], 但这方面的实验研究还比较缺乏。通过计算机模拟合金化元素对相变初期溶质原子分布形态的影响, 能够弥补实验观测手段的不足, 从而进一步深入理解合金化元素对铝合

金微观结构演变的影响与作用机理。Monte Carlo 方法作为探索原子分布的一种十分有效的方法^[2-4], 目前已成功地应用于模拟有序相的相转变、晶粒长大及铁磁相转变^[4-6]等方面。

Al-Zn-Mg 系合金是一种可热处理强化的铝合金, 微合金化处理是改善这类铝合金室温力学性能的有效

基金项目: 国家重点基础研究发展计划资助项目(2007CB613706); 北京工业大学博士科研启动基金资助项目(52009999200702)

收稿日期: 2011-02-14; **修订日期:** 2011-10-09

通信作者: 聂祚仁, 教授, 博士; 电话: 010-67391536; E-mail: zmie@bjut.edu.cn

方法之一。关于 Al-Zn-Mg 合金的微合金化, 研究者^[7-11]进行详细的实验研究与观察。Zn 和 Mg 在铝中有很高的固溶度, Zn 和 Mg 作为独立组元时时效硬化作用微弱, 而 Zn、Mg 共存时会形成一系列新相, 从而具有强烈的时效硬化效应^[12]。在 Al-Zn-Mg 合金中添加 Cu 可以部分地改变析出相的形状和成分^[13]。

Al-Zn-Mg-Cu 时效初期 GPI 区的脱溶行为^[2]及微量 Sc 和 Zr 对 Al-2.1Zn-1.4Mg 合金时效初期微结构演变的影响^[14]已有相关报道, 但 Mg 和 Cu 等合金元素对 Al-Zn-Mg 合金时效初期脱溶过程的影响未有相关报道。本文作者采用 Monte Carlo 方法对 Al-6Zn-(2Mg) 和 Al-10Zn-1.9Mg-(1.7Cu) 合金时效初期微观结构的演变过程进行了模拟研究, 分析 Mg 和 Cu 等合金化元素影响合金时效初期微结构的演变机理, 并与已有实验结果进行比较。

1 模拟方法

1.1 建模及算法

固溶淬火处理后的 Al-Zn-Mg 系合金从结构上看是典型的置换固溶体, 其时效过程的实质是溶质原子通过空位交换机制实现的扩散型相转变过程。尤其是在时效初期, 溶质原子的团簇化和原子短程有序化过程是被看作遵循经典的空位交换机制的^[15]。

本模拟通过 Monte Carlo 方法模拟合金中空位的随机游走过程来实现对时效初期微结构演变过程的研究。模拟中原子间的相互作用只计算最近邻原子的相互作用, 并采用纯铝在淬火温度(793 K)下的平衡空位浓度作为时效的空位浓度^[3]。模拟中所用到的晶格为 $50 \times 50 \times 50$ 的 FCC 晶格, 且采用周期性边界条件, 以保证在模拟过程中溶质原子数守恒。

空位的跃迁是一个概率过程, 为了建立原子迁移的数值模型, 需要获得空位迁移率, 然后利用这一概率数值判定溶质原子的迁移。空位迁移率取决于空位在迁移方向上与最近邻原子交换位置前后的能量差异 (dE), 为了反映 dE 如何影响空位的随机游走过程, 采用在铝合金时效初期微观结构演变的模拟中应用较多且较合理的 W ^[1, 3, 14-15]作为空位迁移的判据。 W 值根据 symmetrical solution 计算所得

$$W = \frac{\exp[-dE/(RT)]}{1 + \exp[-dE/(RT)]} \quad (1)$$

式中: dE 是空位迁移而引起的能量变化; R 为摩尔气

体常数。若 W 大于等于随机数 $X(0 \leq X < 1)$, 则空位与该溶质原子交换位置; 反之则不交换位置。

由(1)式知, 能量变化 dE 的计算是整个模拟计算的核心。由于模拟中仅考虑最近邻原子的相互作用, 因而 dE 就等于交换位置后空位和交换原子周围形成最近邻原子对的能量减去交换前它们的能量之和。

$$\Delta E = E_{\text{after}} - E_{\text{before}} = (\sum \varepsilon_{v(j)i} + \sum \varepsilon_{j(v)i'}) - (\sum \varepsilon_{v(v)i} + \sum \varepsilon_{j(j)i'}) \quad (2)$$

式中: E_{after} 为交换后的能量; E_{before} 为交换前的能量; $\sum \varepsilon_{v(j)i}$ 为交换后空位在 j 原子位置与最近邻原子形成空位原子对的能量和; $\sum \varepsilon_{j(v)i'}$ 为交换后 j 原子在空位位置与最近邻原子形成原子对的能量和; $\sum \varepsilon_{v(v)i}$ 为交换前空位与最近邻原子形成空位原子对的能量和; $\sum \varepsilon_{j(j)i'}$ 为交换前 j 原子与最近邻原子形成原子对的能量和。

1.2 原子相互作用参数的选定

由于原子对势适用于密堆结构, 且模拟中原子间的相互作用只考虑最近邻原子的相互作用, 因而本模拟选择简单对势来描述铝合金中原子间的相互作用势。原子相互作用能从已知的热力学或动力学数据^[16-18]中推导出来, 具体推导方法如下。

同种原子对之间的相互作用势^[19]可表示为

$$\varepsilon_{ii} = \frac{E_{\text{coh}}}{(Z/2)} \quad (3)$$

式中: E_{coh} 为基于挥发能的原子间的相互结合能; Z 为配位数。

根据经典理论, 异种原子对之间的相互作用能(ε_{ij})可由同种原子对之间的相互作用能数据修正而得出

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}(\varepsilon_{ii} + \varepsilon_{jj}) + \Delta\varepsilon \quad (4)$$

式中: $\Delta\varepsilon$ 为修正项, 它表示异种原子对之间的能量除了按照原子本身按均分原则所具有能量外, 还存在着异类原子之间由于电子结构的相互耦合而产生的一个新的波动值。

$$\Delta\varepsilon = \frac{RT_j^{\max} [\ln(1 - C_j^{\max}) - \ln C_j^{\max}]}{Z(1 - 2C_j^{\max})} \quad (5)$$

原子与空位的相互作用能(ε_{iv})^[20]关系式表达为

$$\varepsilon_{iv} = \frac{2E_v^F + Z\varepsilon_{ii}}{2Z} \quad (6)$$

式中: E_v^F 代表纯金属的空位形成能; $C_j^{\max}$ 代表 j 原子在合金中的最大浓度。

根据上述算法, 采用 Visual Fortran 6.5 开发基于 Windows 平台的模拟软件, 对 Al-Zn-Mg 合金进行模拟计算。

2 模拟条件

模拟的合金化学成分(质量分数, %): 合金 A: Al-6Zn; 合金 B: Al-6Zn-2Mg; 合金 C: Al-10Zn-1.9Mg; 合金 D: Al-10Zn-1.9Mg-1.7Cu。模拟的时效温度为 393K(120℃)。Monte Carlo 步数 4×10^6 次, 其间设置 13 个断点, 分别为: 10、100、1 000、 1×10^4 、 5×10^4 、 1×10^5 、 2×10^5 、 4×10^5 、 8×10^5 、 1×10^6 、 2×10^6 、 3×10^6 、 4×10^6 , 以观察在 393 K 时效条件下, 时效初期各个不同时段溶质原子的分布变化情况。

在本模拟中, 一个 MCs 定义为所有空位与最近邻原子间的一次交换。原子簇定义为含有 3 个或 3 个以上溶质原子的原子聚合体。定义原子簇尺寸为一个原子簇内所有的原子个数。

3 模拟结果及分析

结合 Al-Zn-Mg 系合金在 120℃ 下的等温截面相图, 可知在 Al-6Zn-(2Mg) 和 Al-10Zn-1.9Mg-(1.7Cu) 合金中, 可能存在的析出相主要有 η' 相(MgZn₂) 和 GP 区 (Zn、Mg 原子偏聚区)。时效初期, 溶质原子主要以同类原子团簇、复合原子团簇、短程有序结构等微观结构的形式存在。因此, 对 Al-Zn-Mg 系合金时效初期原子团簇、短程有序结构分布形态的研究工作主要集中在对 Zn 原子簇和 Zn-Mg 原子簇的研究上。

3.1 Al-6Zn-(2Mg)合金模拟结果分析

图 1 所示为 393 K 下蒙特卡洛步数(MCs)为 4×10^6 时 Al-6Zn-(2Mg)合金时效初期(001)面的溶质原子分布图。由图 1 可以发现, Al-6Zn 合金中的 Zn 原子有较强的团聚倾向, 形成了明显的 Zn 原子簇; 而在 Al-6Zn-2Mg 合金中, 形成了大量的 Zn 原子簇、Zn-Mg 原子簇及少量的 Mg 原子簇, 与 Chinh 用 3DAP 观察到的结果吻合^[13]。Zn 和 Mg 原子间强烈的相互作用促使形成了 Zn、Mg 原子交替排布的 Zn-Mg 原子簇。

图 2 所示为 Al-6Zn-(2Mg)合金时效初期的 Zn 原子簇、Mg 原子簇和 Zn-Mg 原子簇平均尺寸和密度变化曲线。图 3 所示为 Al 基体中剩余溶质原子浓度的演化曲线和 Zn、Mg 原子周围出现其他原子概率的变化曲线。结果表明: 时效初期, Al-6Zn 合金中 Zn 原子偏聚形成尺寸较大的 Zn 原子簇, 团簇尺寸在演化过程中随着蒙特卡洛步数的增加而增大, 尤其是在模拟后期, 团簇尺寸快速增大。在 Al-6Zn-2Mg 合金中, Mg 的加入对 Zn 原子的偏聚程度影响较大。不仅使 Zn 原子簇尺寸在模拟后期大于不含 Mg 合金的尺寸, 且由于 Zn 与 Mg 之间强烈的交互作用, 还形成了偏聚程度更剧烈的 Zn-Mg 原子簇。Zn-Mg 原子簇尺寸随着蒙特卡洛步数的增加而迅速增大, 且尺寸明显大于 Zn 原子簇尺寸, 这与图 3(b)所示的 Zn 和 Mg 原子之间存在着强烈交互作用, 形成大量 Zn-Mg 原子对有关。而由于 Mg-Mg 之间的结合能较小, Mg 原子簇尺寸较小且变化不大。Zn 原子簇密度变化趋势跟其平均尺寸变化趋势相同, Zn-Mg 原子簇密度随着蒙特卡洛步数的增加而增大, 增至最大值后又降低, 这是由于随蒙特卡洛步数增加及时效时间的延长, 原子簇尺寸长大、单位体积内原子簇数量减少所致^[21]。

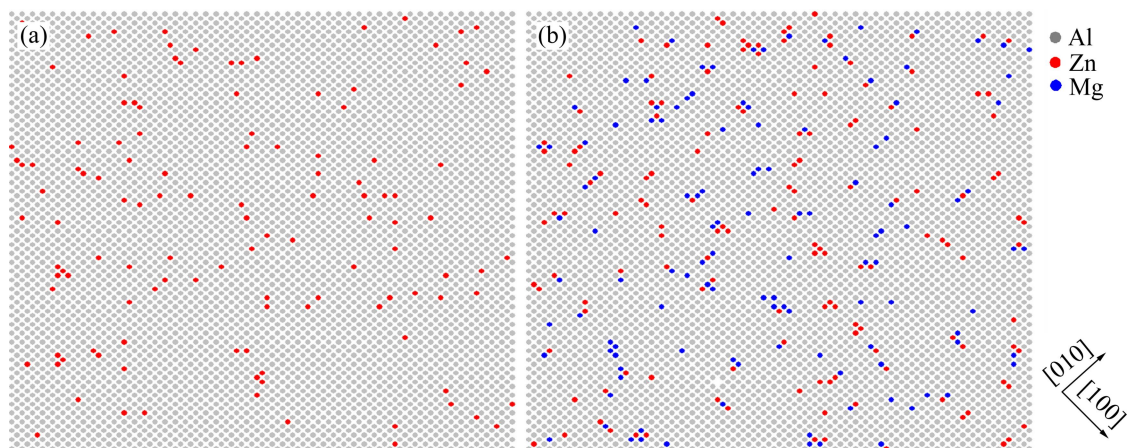


图 1 Al-6Zn(a)和 Al-6Zn-2Mg(b)合金时效初期(001)面的溶质原子分布图

Fig. 1 Typical atom configuration on one atom layer of (001) plane in Al-6Zn (a) and Al-6Zn-2Mg (b) alloy during initial stage of ageing

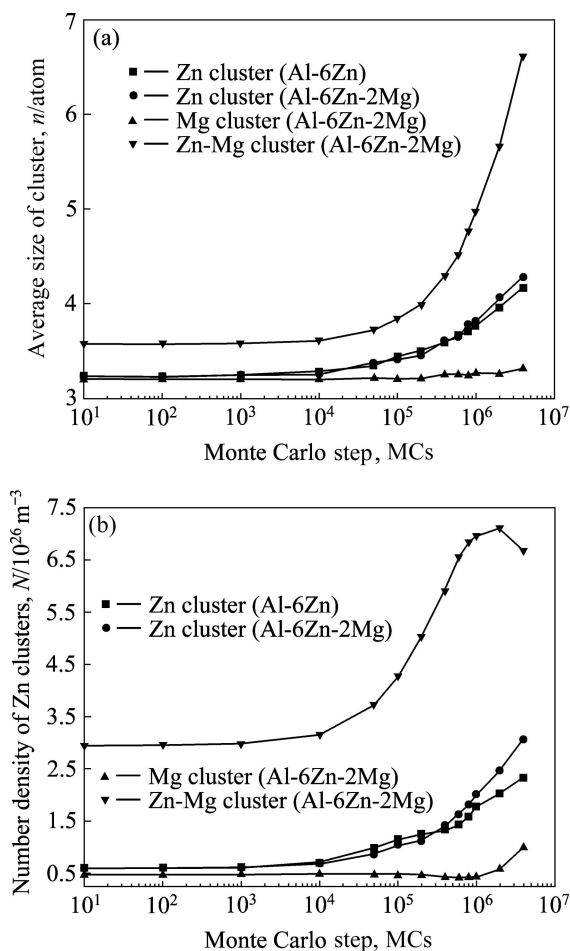


图2 Al-6Zn-(2Mg)合金时效初期原子簇平均尺寸和密度变化

Fig. 2 Average size(a) and number density(b) of clusters for Al-6Zn and Al-6Zn-2Mg alloy

在 Al-6Zn 合金中, 由于形成 Zn 原子簇, Al 基体中剩余的 Zn 原子浓度降低, 加入 Mg 之后, Al 基体中剩余 Zn、Mg 原子浓度急剧降低, 由于形成尺寸较大的 Zn 原子簇和 Zn-Mg 原子簇, 使得模拟后期 Al 基体中剩余 Zn 原子浓度比 Mg 原子浓度还低。从图 3(b)可以看出, 加入 Mg 之后, Zn 原子最近邻位置出现 Zn 原子的概率比 Al-6Zn 合金的稍大, 且出现 Mg 原子的概率随着蒙特卡洛步数的增加而迅速增大, 在模拟后期明显大于出现 Zn 原子的概率, 说明随着时间的延长, Zn-Mg 原子的团簇化倾向大于 Zn-Zn 原子的团簇化倾向。上述结果表明, Mg 的加入不仅促进 Zn 原子团簇的偏聚过程, 而且使合金形成了 Zn、Mg 原子交替排布的短程有序结构。

3.2 Al-10Zn-1.9Mg-(1.7Cu)合金模拟结果分析

图 4 所示为 393 K 下 MCs 为 4×10^6 时 Al-10Zn-

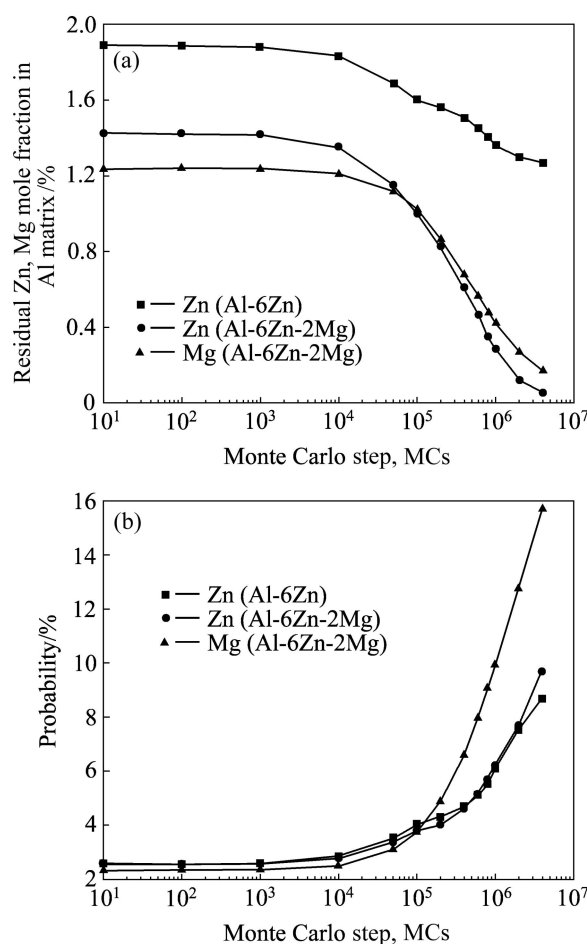


图3 Al 基体中剩余溶质原子浓度变化和 Zn 原子周围出现其他原子的概率

Fig. 3 Variation in residual Zn and Mg concentration in Al matrix(a) and probability of nearest neighbor atoms around Zn atom with MCs for Al-6Zn and Al-6Zn-2Mg(b)

1.9Mg-(1.7Cu)合金时效初期(001)面的溶质原子分布图。从图 4 中可以看到, 在 Al-10Zn-1.9Mg 合金中形成大量的 Zn 原子簇、Zn-Mg 原子簇及少量的 Mg 原子簇。而在 Al-10Zn-1.9Mg-1.7Cu 合金中, 由于 Cu 原子与 Zn、Mg 原子都有较强的相互作用, 不仅形成了 Zn 原子簇、Mg 原子簇和 Zn-Mg 原子簇, 还形成了少量 Zn-Cu 原子簇、Mg-Cu 原子簇和 Zn-Mg-Cu 原子簇。

图 5 所示为 Al-10Zn-1.9Mg-(1.7Cu)合金时效初期 Zn 原子簇和 Zn-Mg 原子簇平均尺寸和密度变化曲线。图 6 所示为 Al 基体中剩余浓度的演化曲线和 Zn、Mg 原子周围出现其他原子的概率变化曲线。结果表明: Al-10Zn-1.9Mg 合金中 Zn、Mg 原子在时效初期强烈的偏聚形成大尺寸的 Zn 原子簇和 Zn-Mg 原子簇及较小尺寸的 Mg 原子簇, 造成 Al 基体中剩余 Zn、Mg 原子浓度降低。加入 Cu 原子的 Al-10Zn-1.9Mg-

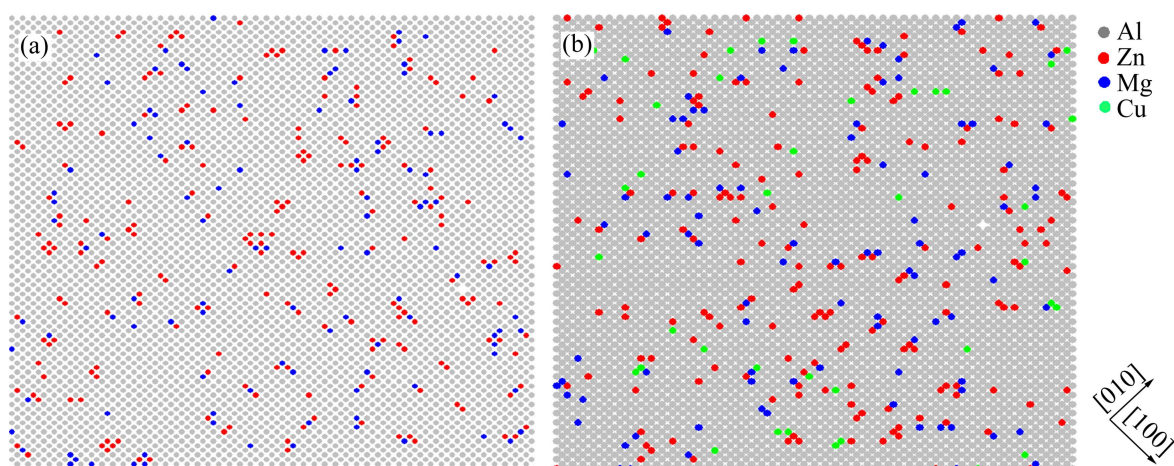


图4 Al-10Zn-1.9Mg 和 Al-10Zn-1.9Mg-1.7Cu 合金时效初期(001)面的溶质原子分布图

Fig. 4 Typical atom configuration on one atom layer of (001) plane in Al-10Zn-1.9Mg(a) and Al-10Zn-1.9Mg-1.7Cu(b) alloy during initial ageing stage

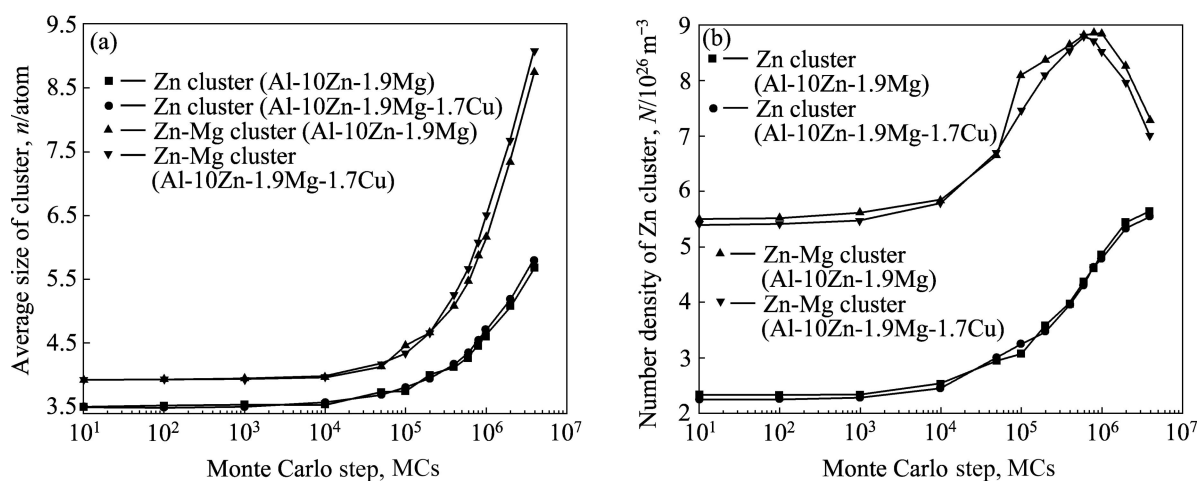


图5 Al-10Zn-1.9Mg-(1.7Cu)合金时效初期原子簇平均尺寸和密度变化

Fig. 5 Variation curves of average size(a) and number density(b) of clusters for Al-10Zn-1.9Mg and Al-10Zn-1.9Mg-1.7Cu alloy during initial ageing stage

1.7Cu 合金中, Zn 原子簇和 Zn-Mg 原子簇的平均尺寸比不含铜的合金尺寸大, 而 Zn 原子簇和 Zn-Mg 原子簇的密度比不含铜的合金密度小。Al 基体中剩余 Zn、Mg 原子浓度比 Al-10Zn-1.9Mg 合金的溶质原子浓度小, 说明 Cu 原子促进了 Zn 原子和 Zn-Mg 原子的团簇过程。这与在 Al-Zn-Mg 合金中添加 Cu 能促进时效硬化的实验结果吻合^[22]。从图 6(b)中可以看到, Al-10Zn-1.9Mg-1.7Cu 合金中, Cu 的加入使 Zn 原子最近邻位置出现 Zn、Mg 原子的概率比基合金的概率大, Mg 原子最近邻位置出现 Mg 原子的概率在模拟后期也稍有增大, 此结果说明 Cu 原子促进了 Zn 原子和 Zn-Mg 原子的团簇过程, 而对 Mg 原子的团簇过程影

响较小。

图 7 所示为 Al-10Zn-1.9Mg-1.7Cu 合金 Cu 原子最近邻位置出现其他溶质原子的概率变化。从图 7 中可以看出, Cu 原子周围出现 Zn 原子的概率明显大于出现 Mg 原子的概率, Cu 原子周围出现 Zn、Mg 原子的概率都随着蒙特卡洛步数的增加而增大, 但 Cu 原子周围出现 Zn 原子的概率增幅比出现 Mg 原子的概率增幅大, 说明 Cu 原子通过影响 Zn 原子的分布来影响 Zn 和 Mg 原子的分布。这一结果表明, 在 Al-10Zn-1.9Mg-1.7Cu 合金中, Cu 原子与 Zn 原子之间表现为强烈的交互作用, 并 Zn-Cu 原子具有很强的团簇化倾向, 而 Cu 原子与 Mg 原子之间这种作用相对较弱。

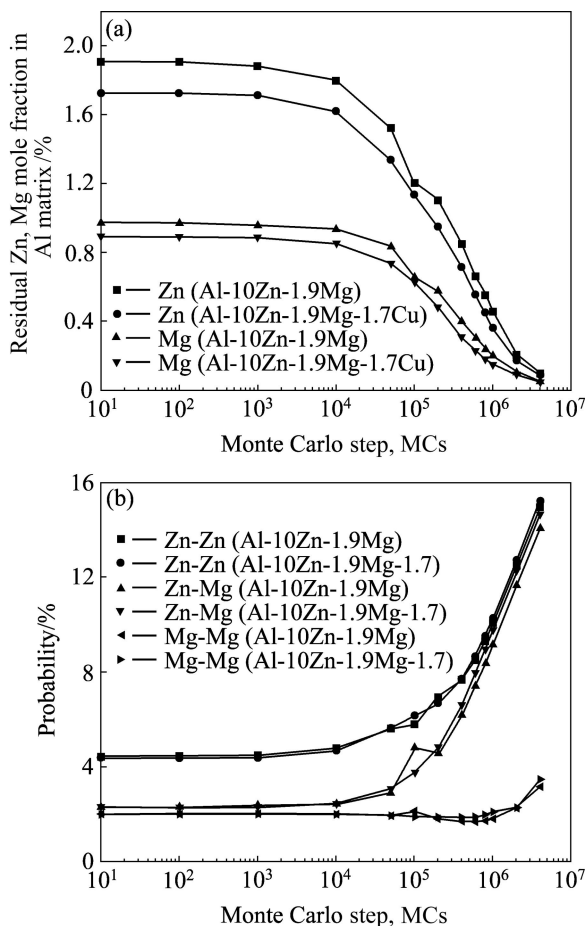


图 6 Al 基体中剩余溶质原子浓度变化和 Zn、Mg 原子周围出现其他原子的概率

Fig. 6 Variation in residual Zn, Mg and Cu mole fractions in Al matrix(a) and probability of nearest neighbor atoms around Zn or Mg atom with MCs for Al-10Zn-1.9Mg and Al-10Zn-1.9Mg-1.7Cu alloy(b)

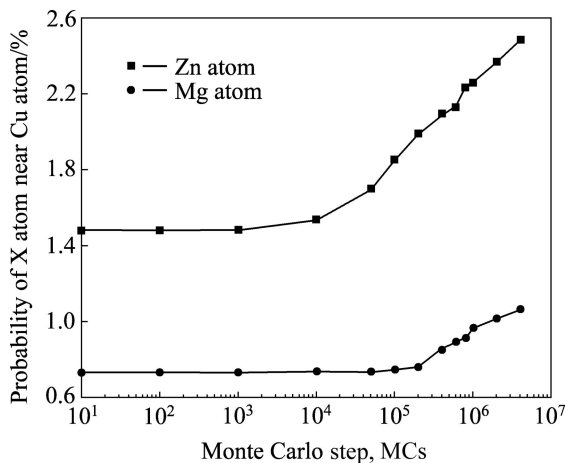


图 7 Al-10Zn-1.9Mg-1.7Cu 合金 Cu 原子最近邻位置出现其他溶质原子的概率

Fig. 7 Probability of other atoms around Cu atom in Al-10Zn-1.9Mg-1.7Cu alloy

4 讨论

从上述结果可以发现,在时效初期形核的关键阶段,添加 Mg、Cu 元素后,合金中 Zn、Mg 原子的偏聚程度和形态分布与不加 Mg、Cu 元素的基合金相比存在明显差异。时效初期,合金化铝合金中原子的偏聚程度和形态分布差异,可从合金化元素与溶质原子的交互作用上得到解释。在所研究的合金中,正是由于 Mg 原子与 Zn 原子之间、Cu 原子与 Zn 原子之间及 Cu 原子与 Mg 原子存在强烈的交互作用,因而在合金时效初期出现了 Zn-Mg 原子簇、Zn-Cu 原子簇和 Zn-Mg-Cu 原子簇,并使得 Zn 原子的团簇化倾向十分强烈。从对 Al-6Zn-(2Mg)和 Al-10Zn-1.9Mg-(1.7Cu)合金时效初期溶质原子分布的模拟结果可知,微量 Mg 的添加促进了 Zn 原子团簇化,且形成了 Zn、Mg 原子交替排布的短程有序结构;微量铜的添加促进了 Zn 原子的团簇化和 Zn-Mg 原子的团簇化。

实验研究表明^[12],在 7xxx 系铝合金中,Cu 的添加不改变 Al-Zn-Mg 合金的析出序列和主要析出相,只改变其析出动力学。Cu 的添加对 Al-Zn-Mg 合金时效硬化的影响主要是通过 Cu 融入到主要析出相中,改变析出相的性质来实现的。在 Al-Zn-Mg 合金中添加 Cu 可以促进 Zn 原子的团簇化和 Zn-Mg 原子的团簇化,但作用不显著,也可能跟原子间相互作用参数的选取有关,本文作者的后续工作将对该问题进行进一步的探讨。

5 结论

1) 在 Al-Zn 合金中添加 Mg,时效初期出现了大量的 Zn 原子团簇、Mg 原子簇和 Zn-Mg 原子团簇。随着时效时间的推移,Zn 原子逐步向 Mg 原子周围偏聚。Mg 的存在促进了 Zn 原子的团簇化,且形成了 Zn、Mg 原子交替排布的短程有序结构。

2) 在 Al-Zn-Mg 合金添加 Cu,合金中的 Zn 原子向 Cu 原子周围偏聚的倾向比 Mg 原子大得多,时效初期不仅形成了大量的 Zn 原子团簇、Mg 原子簇和 Zn-Mg 原子团簇,还形成了少量的 Zn-Cu 原子簇、Mg-Cu 原子簇和 Zn-Mg-Cu 原子簇。Cu 的存在促进了 Zn 原子的团簇化和 Zn-Mg 原子团簇化,但对 Mg 原子的团簇化影响较小。

REFERENCES

- [1] 陈志国, 李世晨, 刘祖耀, 郑子樵. 微合金化 Al-4.0Cu-0.3Mg 合金时效初期微结构演变的计算机模拟[J]. 中国有色金属学报, 2004, 14(8): 1274-1280.
CHEN Zhi-guo, LI Shi-chen, LIU Zu-yao, ZHENG Zi-qiao. Computer simulation of microstructural evolution of microalloyed Al-4.0Cu-0.3Mg alloys[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2004, 14(8): 1274-1280.
- [2] SHA G, CERESO A. Kinetic Monte Carlo simulation of clustering in an Al-Zn-Mg-Cu alloy (7050)[J]. Acta Materialia, 2005, 53: 907-917.
- [3] HIROSAWA S, SATO T, KAMIO A, FLOWER H M. Classification of the role of microalloying elements in phase decomposition of Al based alloys[J]. Acta Materialia, 2000, 48(8): 1797-1806.
- [4] YANG B, ASTA M, MRYASOV O N. The nature of Al-L10 ordering transition in alloy nanoparticle: A Monte Carlo study[J]. Acta Materialia, 2006, 54: 4201-4211.
- [5] BELLUCCI D, CANNILLO V, SOLA A. Monte Carlo simulation of microstructure evolution in biphasic-systems[J]. Ceramics International, 2010, 36: 1983-1988.
- [6] KATO T, SAITA T. Multi-canonical Monte-Carlo simulation on ferromagnetism-cluster glass transition in Pd-Mn alloys[J]. Physica B, 2000, 284/288: 1347-1348.
- [7] LENDVAI J. Precipitation and strengthening in aluminum alloys[J]. Mater Sci Forum, 1996, 217/222: 43-56.
- [8] LÖFFLER H, KOVÁCS I, LENDVAI J. Decomposition Processes in Al-Zn-Mg alloys[J]. J Mat Sci, 1983, 18: 2215-2240.
- [9] ROBSON J D, PRANGNELL P B. Predicting recrystallised volume fraction in aluminum alloy 7050 hot rolled plate[J]. Materials Science and Technology, 2002, 18: 607-614.
- [10] KAIGORODOVA L I. Effect of small additions of Sc and Zr on the structure and mechanical properties of an Al-Zn-Mg-Cu alloy[J]. Phys Met Metall, 1996, 81: 513-519.
- [11] 杨军军, 徐国富, 聂祚仁, 尹志民. 微量 Er 对高强铝合金组织与性能的影响[J]. 特种铸造及有色合金, 2006, 26(7): 393-396.
YANG Jun-jun, XU Guo-fu, NIE Zuo-ren, YIN Zhi-min. Effect of trace Er on Structure and mechanical properties of high strength Al alloy[J]. Special Casting & Nonferrous Alloys, 2006, 26(7): 393-396.
- [12] 倪培相, 左秀荣, 吴欣凤. Al-Zn-Mg 系合金研究现状[J]. 轻合金加工技术, 2007, 35: 7-11.
NI Pei-xiang, ZUO Xiu-rong, WU Xin-feng. Present research status of Al-Zn-Mg alloy series[J]. Light Alloy Fabrication Technology, 2007, 35: 7-11.
- [13] CHINH N Q, LENDVAI J, PING D H, HONO K. The effect Cu on mechanical and precipitation properties of Al-Zn-Mg alloys[J]. Journal of Alloys and Compounds, 2004, 378: 52-60.
- [14] 孙媛, 王桂青. Al-Zn-Mg-(Sc)-(Zr)合金时效初期微结构演变的 Monte-Carlo 模拟[J]. 山东大学学报: 工学版, 2010, 4(3): 99-102.
SUN Yuan, WANG Gui-qing. Monte Carlo simulation of the microstructural evolution of Al-Zn-Mg-(Sc)-(Zr) alloys during initial ageing stage[J]. Journal of Shandong University: Engineering Science, 2010, 4(3): 99-102.
- [15] 李世晨, 郑子樵, 刘祖耀, 李剑, 杨培勇, 殷顺高. Al-Cu-Li-xMg 合金时效初期微结构演变的 Monte Carlo 模拟[J]. 中国有色金属学报, 2005, 15(9): 1376-1383.
LI Shi-chen, ZHENG Zi-qiao, LIU Zu-yao, LI Jian, YANG Pei-yong, YIN Shun-gao. Monte Carlo simulation of microstructural evolution of Al-Cu-Li-xMg alloys during initial ageing stage[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2005, 15(9): 1376-1383.
- [16] KITTEL C. Introduction to solid state physics[M]. New York: John Wiley & Sons Inc, 1976: 57-142.
- [17] LANDOLT B. Numerical data and functional relationship in science and technology: Atomic defects in metals (Vol.25)[M]. Berlin: Springer-Verlag, 1991: 35-117.
- [18] LANDOLT B. Numerical data and functional relationship in science and technology: Phase equilibria, crystallographic and thermodynamic data of binary (Vol.5)[M]. Berlin: Springer-Verlag, 1991: 26-129.
- [19] ABINANDANAN T A, HAIDER F, MARTIN G. Computer simulation of diffusional phase transformations: Monte Carlo algorithm and application to precipitation of ordering phase[J]. Acta Materialia, 1998, 46(12): 4243-4255.
- [20] PAREIGE C, SOISSON F, MARTIN G, BLAVETTE D. Ordering and phase separation in Ni-Cr-Al: Monte Carlo simulation vs three dimensional[J]. Acta Materialia, 1999, 47(6): 1889-1899.
- [21] HIROSAWA S, SATO T, YOKOTA J, KAMIO A. Comparison between resistivity change and Monte Carlo simulation for GP zone formation in Al-Cu base ternary alloys[J]. Material Transactions, JIM, 1998, 39: 139-146.
- [22] 林肇琦, 朱继良, 孙贵经, 杨胜坤. 微量 Cu 对 Al-Zn-Mg 合金沉淀过程和显微组织参数的影响[J]. 金属学报, 1984, 20(1): 54-61.
LIN Zhao-qi, ZHU Ji-liang, SUN Gui-jing, YANG Sheng-kun. Effect of trace Cu on precipitate process and microstructure parameters of Al-Zn-Mg alloy[J]. Acta Metallurgica Sinica, 1984, 20(1): 54-61.

(编辑 李艳红)