

DOI:10.16410/j.issn1000-8365.2023.3029

第一性原理研究应力对 6005A 铝合金电子结构和弹性性质的影响

范乐天

(中车唐山机车车辆有限公司产品研发中心,河北 唐山 063000)

摘 要: 6005A 铝合金中的纳米析出相可以有效提高合金的力学性能。然而,纳米级的尺寸和取向变化极大地阻碍了对析出相之间的潜在关系和晶体结构的理解。因此,本文用第一性原理计算研究了 6005A 铝合金中 Mg_5Si_6 、 Mg_9Si_5 和 Mg_2Si 3 种析出相在有应力条件下的结构稳定性、力学性质和电子结构。无应力条件下的计算结果与以前的实验和理论结果符合得较好。结果表明,压缩应力不仅会增加 3 种析出相的韧性,还会降低 Mg_2Si 的带隙。此外,应力条件下会普遍提高析出相的生成焓和内聚能,从而降低其稳定性,促使亚稳态析出相向稳态析出相转变。这些发现将有助于进一步理解 6005A 铝合金析出相的结构行为和力学性能,对改善 6005A 铝合金性能具有理论指导意义。

关键词: 6005A 铝合金;析出相;第一性原理;力学性能;电子结构;应力

中图分类号: TG113.25; TG146.2+1

文献标识码: A

文章编号: 1000-8365(2023)05-0456-06

First-principles Study on the Effect of Stress on the Mechanical and Electronic Structure of 6005A Aluminum Alloy

FAN Letian

(Product R & D Center of CRRC Tangshan Locomotive & Rolling Stock Co., Ltd., Tangshan 063000, China)

Abstract: Nanoprecipitates in 6005A aluminum alloy can effectively improve the mechanical properties of the alloy. However, the size and orientation changes at the nanoscale have greatly hindered the understanding of the potential relationships between precipitates and the crystal structure. The structural stability, mechanical properties and electronic structures of Mg_5Si_6 , Mg_9Si_5 and Mg_2Si precipitates in 6005A aluminum alloy with or without stress were studied by first-principles calculations. The calculated results are in good agreement with the previous experimental and theoretical results. The compressive stress can increase the toughness of the three precipitated phases and decrease the band gap of Mg_2Si . Under stress conditions, the formation enthalpy and cohesive energy of the precipitated phase are generally increased to reduce its stability and promote the transition from a metastable to steady precipitated phase. These findings will help to further understand the structural behavior and mechanical properties of the precipitated phase of 6005A aluminum alloy and have theoretical guiding significance for improving the properties of 6005A aluminum alloy.

Key words: 6005A aluminum alloy; precipitated phase; first principles; mechanical properties; electronic structures; stress

铝及铝合金因其具有优异的可成形性、耐腐蚀性、机械强度和焊接性等一系列优点广泛用于许多工业应用,如航空航天、船舶、汽车和建筑等^[1-2]。其中 6005A 铝合金作为一种典型的可热处理强化 Al-Mg-Si 合金,具有质量轻、强度高、美观、耐腐蚀、易加工成形等优良特性,在世界铝合金市场上占有非常重要的地位。在特定的热处理过程中,来自铝

基板的各种纳米尺寸针状或板状亚稳析出相的存在极大地阻碍了位错运动,从而增强了合金的力学性能和物理性能^[3]。改善铝合金各种性能的本质是微观组织的变化^[4-5]。通过优化工艺、改善合金成分,从而控制强化相的形成和转变,得到目标强化相是提高合金性能、研制优良性能铝合金的关键难点之一。因此,国内外大量学者对 Al-Mg-Si 合金的析出展

收稿日期: 2023-02-11

基金项目: 中国国家铁路集团有限公司科技研究开发计划系统性重大项目(p2020J024)

作者简介: 范乐天,1982 年生,工学学士,正高级工程师。主要从事轨道车辆的研发及设计工作。E-mail: sjc-fanletian@tangche.com

引用格式: 范乐天. 第一性原理研究应力对 6005A 铝合金电子结构和弹性性质的影响[J]. 铸造技术, 2023, 44(5): 456-461.

FAN L T. First-principles study on the effect of stress on the mechanical and electronic structure of 6005A aluminum alloy[J].

Foundry Technology, 2023, 44(5): 456-461.

开研究。

一般而言,通常通过原子探针和高分辨率透射电镜来研究团簇和沉淀相的微观结构。然而沉淀相的小晶粒尺寸和许多可能的取向会限制结构和物理性质的测定。因此,Zhao 等^[6]通过第一性原理计算研究表明,Al-Mg-Si 合金中关键沉淀相获得的热力学性质可用于评估 Al-Mg-Si 合金中的亚稳态平衡。Al-Mg-Si 合金中的稳定相(β -Mg₂Si)和 2 个亚稳态沉淀相(β' -Mg₉Si₅ 和 β'' -Mg₅Si₆)已经被预测,证明了第一性原理在预测稳定和亚稳相 Gibbs 能量方面的能力^[7]。此外,析出相的电子结构和力学性能也被广泛研究。早期,众多学者利用经验势方法计算了 Mg₂Si 的电子结构和带隙^[8-9]。Mg₅Si₆ 和 Mg₉Si₅ 的结构、电子和振动性质也通过第一性原理被研究^[10-11]。此外,Al-Mg-Si 合金中 12 种化合物的结构稳定性、力学性能和电子结构被研究,结果表明 Mg₄Si₇、MgAl₂Si₂ 和 Mg₄AlSi₃ 在能量和机械上是更有利的相^[12]。大部分的研究集中在热力学稳定性和析出相与 Al 基体之间的结构关系上。然而,对于这些析出相的潜在关系以及转变条件研究较少。

因此,本文研究了 6005A 铝合金主要的 3 种析出相(Mg₅Si₆、Mg₉Si₅ 和 Mg₂Si)的弹性和电子性能,以及在应力作用下析出相性能的变化。这将有助于进一步理解 6005A 铝合金析出相的结构行为和力学性能,为改善 6005A 铝合金性能具有理论指导意义。

1 计算细节

利用基于密度泛函理论(density functional theory, DFT)和平面波赝势法的 VASP(Vienna Abinitio Simulation Package)量子力学计算软件包对 Mg₅Si₆、Mg₉Si₅ 和 Mg₂Si 的生成焓、内聚能、电子结构和力学性能进行第一性原理计算。电子与离子之间的相互作用采用投影缀加波方法(projected augmented wave, PAW)来精确描述。考虑到传统 GGA+U 仍会低估带隙,因此电子结构计算使用强约束和适当规格化

(strongly constrained and appropriately normed semilocal density functional, SCAN)^[13] 交换相关函数进行。各元素的电子构型分别为 Mg 的 2p⁶3s² 和 Si 的 3s²3p²。用 Monkhorst-Pack^[14]方法进行分割网格,经过收敛测试得到 Brillouin 区对应的 k 点网格为 6×6×5,平面波截止能量为 400 eV。计算采用原胞结构模型,几何优化计算的能量和力收敛准则分别为 10⁻⁶ eV/cell 和 -0.015 eV/Å。弹性常数通过 vaspkit^[15] 计算处理。

2 结果与讨论

2.1 晶体结构和稳定性

Mg₅Si₆、Mg₉Si₅ 和 Mg₂Si 的晶胞结构如图 1 所示。表 1 列出了应力和无应力条件下 Mg₅Si₆、Mg₉Si₅ 和 Mg₂Si 的晶格参数、内聚能(E_{coh})和生成焓(ΔH)。可以看到,计算得到的晶格参数与可用的实验和其他理论数据非常一致^[2-3,16-18],表明目前的计算是高度可靠的。

晶体结构的稳定性一般由材料的内聚能和生成焓所决定^[19],也是第二相的两个重要的本征特性。不同的第二相对基体有着不同的强化作用,分析第二相的本征特性,可以进一步分析不同第二相强化作用间的差异,以便根据特定的性能需求选择含相应第二相的材料成分。因此,第二相的内聚能和生成焓由下式计算:

$$E_{\text{coh}} = \frac{E_{\text{tot}}^{\text{AB}} - n_{\text{A}} E_{\text{atom}}^{\text{A}} - n_{\text{B}} E_{\text{atom}}^{\text{B}}}{n_{\text{A}} + n_{\text{B}}} \quad (1)$$

$$\Delta H = \frac{E_{\text{tot}}^{\text{AB}} - n_{\text{A}} E_{\text{cell}}^{\text{A}} - n_{\text{B}} E_{\text{cell}}^{\text{B}}}{(n_{\text{A}} + n_{\text{B}})} \quad (2)$$

式中, $E_{\text{tot}}^{\text{AB}}$ 为晶胞总能量; $E_{\text{atom}}^{\text{A}}$ 和 $E_{\text{atom}}^{\text{B}}$ 为 A、B 单原子能量; n_{A} 、 n_{B} 为 A、B 原子个数; $E_{\text{cell}}^{\text{A}}$ 和 $E_{\text{cell}}^{\text{B}}$ 分别为 A、B 金属构成的原胞能量除以原子个数。如表 1 所示,由于生成焓都是负的,Mg₅Si₆、Mg₉Si₅ 和 Mg₂Si 析出相都是稳定的。同时,析出相的生成焓遵循 $\beta''/\text{Mg}_5\text{Si}_6 > \beta'/\text{Mg}_9\text{Si}_5 > \beta/\text{Mg}_2\text{Si}$ 。计算的生成焓和其他学

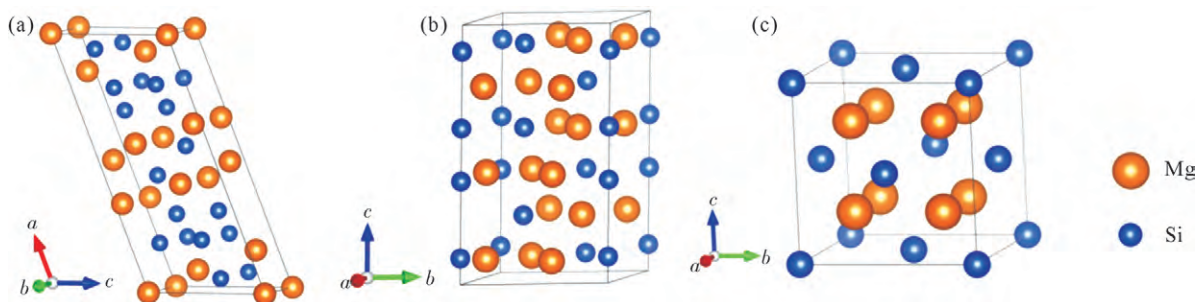


图 1 晶胞结构:(a) Mg₅Si₆, (b) Mg₉Si₅, (c) Mg₂Si
Fig.1 Cell structure: (a) Mg₅Si₆, (b) Mg₉Si₅, (c) Mg₂Si

表 1 应力和无应力下 Mg_5Si_6 、 Mg_9Si_5 和 Mg_2Si 的晶格常数(a, b, c)、生成焓(ΔH)和内聚能(E_{coh})
 Tab.1 Lattice constants (a, b, c), the formation enthalpy (ΔH) and the cohesive energy (E_{coh}) of Mg_5Si_6 , Mg_9Si_5 and Mg_2Si under stress and non-stress conditions

Phase	S.G.	Lattice parameter(Å)			$E_{\text{coh}}/(\text{eV/atom})$	$\Delta H/(\text{eV/atom})$	Ref.
		a	b	c			
$\beta''/\text{Mg}_5\text{Si}_6$	Mon. ($C2/m$)	15.135	4.027	6.580	-3.150	-0.036	This work
		15.160	4.050	6.740			[3]
$\beta''(\text{stress})$		14.842	3.946	6.372	-3.130	0.053	This work
$\beta'/\text{Mg}_9\text{Si}_5$	Hex. ($P6_3/m$)	7.173	7.173	12.285	-2.720	-0.120	This work
		7.150	7.150	12.150			
$\beta'(\text{stress})$		7.010	7.010	11.970	-2.701	-0.096	This work
$\beta/\text{Mg}_2\text{Si}$	Cub. ($Fm\bar{3}m$)	6.364	6.364	6.364	-2.690	-0.159	This work
		6.340	6.340	6.340			[17]
		6.380	6.380	6.380			[18]
$\beta(\text{stress})$		6.195	6.195	6.195	-2.666	-0.135	This work

者的结果相近^[12]。其中 Mg_2Si 的生成焓绝对值最大, 因此合金化能力最强。此外, 可以看出, 内聚能的绝对值随着应力的增加而降低。 Mg_5Si_6 的生成焓在应力条件下变为正值, 相结构很不稳定, 其次是 Mg_9Si_5 , 最后是 Mg_2Si 。因此, 施加应力会影响 6005A 铝合金的相结构稳定性, 可能会造成相变。

2.2 弹性性能

弹性常数通过 Born 稳定性判据与相变存在联系, 并通过弹性常数与晶格模式之间的关系定义了从一种晶体结构到另一种晶体结构的反应坐标^[20]。Anderson 等^[21]通过对 4 种立方晶格的计算发现, 材料的一个剪切常数可以随着压力的增加而减小, 而当低密度相向高密度相转变时, Born 稳定性判据可以预测其总趋势。表 2 列出了应力和无应力条件下各相的弹性常数。可以看到 β'' 、 β' 和 β 相的弹性常数不同, 表明它们的各向异性不同。 β'' 相的弹性常数 C_{11} 、 C_{22} 和 C_{33} 较大, 表明 β'' 相具有较强的抵抗相应方向变形的能力。我们计算出的 Mg_5Si_6 、 Mg_9Si_5 和 Mg_2Si 弹性常数与其他的第一性原理计算结果相近^[12]。此外, 弹性常数(C_{ij})随着压缩应力的增加而增

大(表 2), 这和 VO_2 在应力条件下的第一性原理计算结果相似^[22]。因此, 对于 6005A 铝合金的第二相, 了解应力与弹性常数之间的关系至关重要。

力学稳定性是实验中晶体稳定存在的必要条件。弹性常数矩阵应满足 Born-Huang 弹性稳定性准则^[23-24]。对于单斜相, 力学稳定性的判据如下:

$$C_{11} > 0, C_{22} > 0, C_{33} > 0, C_{44} > 0, C_{55} > 0, C_{66} > 0, \quad (3)$$

$$[C_{11} + C_{22} + C_{33} + 2(C_{12} + C_{13} + C_{23})] > 0, \quad (4)$$

$$(C_{33}C_{55} - C_{35}^2) > 0, \quad (5)$$

对于六方相, 力学稳定性判据如下:

$$C_{44} > 0, C_{11} > |C_{12}|, (C_{11} + C_{12})C_{33} > 2C_{13}^2 \quad (6)$$

对于立方相, 力学稳定性判据如下:

$$C_{11} > 0, C_{44} > 0, C_{11} > |C_{12}|, (C_{11} + 2C_{12}) > 0 \quad (7)$$

从表 2 可以看出, Mg_5Si_6 、 Mg_9Si_5 和 Mg_2Si 满足相应的判据, 这表明它们在基态下是力学稳定的。应力的施加会降低它们的稳定性, 但目前来看在一定应力范围内依然是力学稳定的。此外, 应力条件下 Mg_9Si_5 的 C_{11} (151.4 GPa) 和 C_{12} (150.7 GPa) 是各个弹性常数中较大的值, 表明其分别沿 a 轴、 b 轴的低压压缩性。此外, 在应力条件下 Mg_2Si 中观察到最大的 C_{44} 值(53.8 GPa), 表明其具有相对较强的剪切强度。

2.3 机械性能

为了研究应力对铝合金析出相力学性能的影响, 使用 Voigt-Reuss-Hill 近似^[25]来估算体积模量 B 和剪切模量 G , 具体表达式如下:

$$B = \frac{1}{2}(B_V + B_R) \quad (8)$$

$$G = \frac{1}{2}(G_V + G_R) \quad (9)$$

式中, 后缀 V 和 R 表示在 Voigt 和 Reuss 理论中经积分计算得到的计算值。

杨氏模量 E 和泊松比 ν 可通过以下公式计算:

表 2 应力和无应力条件下 Mg_5Si_6 、 Mg_9Si_5 和 Mg_2Si 的弹性常数
 Tab.2 Elastic constants of Mg_5Si_6 , Mg_9Si_5 and Mg_2Si under stress and non-stress conditions

Phase	$\beta''/\text{Mg}_5\text{Si}_6$	$\beta''(\text{stress})$	$\beta'/\text{Mg}_9\text{Si}_5$	$\beta'(\text{stress})$	$\beta/\text{Mg}_2\text{Si}$	$\beta(\text{stress})$
C_{11}	111.8	131.6	126.3	151.4	116.5	137.0
C_{22}	124.7	139.5				
C_{33}	105.4	102.6	126.9	150.7		
C_{44}	9.8	8.6	26.4	32.4	45.2	53.8
C_{55}	12.7	10.9				
C_{66}	24.5	24.8				
C_{12}	38.3	40.7	31.6	39.7	23.2	35.1
C_{13}	42.3	70.0	21.8	32.4		
C_{23}	34.8	62.1				

$$E = \frac{9BG}{3B+G} \quad (10)$$

$$\nu = \frac{3B-2G}{2(3B+G)} \quad (11)$$

表 3 所示为应力和无应力条件下 Mg_5Si_6 、 Mg_9Si_5 和 Mg_2Si 的机械性能($B, G, E, \nu, B/G$)。因为不同的相结构其弹性常数不同,而 $B, G, E, \nu, B/G$ 等机械性能又是弹性常数的函数,因此,可由不同相结构的弹性常数确定机械性能的变化。根据表 3 可知, Mg_5Si_6 相的体积模量相对较大,表明其抗压缩能力最强。 Mg_2Si 相的剪切模量相对较大,因此其抗剪切能力最强。而弹性模量表示材料抵抗弹性变形的能力,其值越大,则在一定应力条件下发生弹性变形越小,材料的刚度越大^[26]。因此,可以发现在 3 种相结构中, Mg_2Si 的刚度最大, Mg_5Si_6 刚度最小。这个结果和 Zhang 等^[12]的结果一致。

泊松比反映材料的抗剪切能力,泊松比越大,材料的塑性越好。 Mg_5Si_6 塑性优于 Mg_9Si_5 和 Mg_2Si 。此外,压缩应力的施加使泊松比增加,从而提高了材料的塑性。Pugh^[27]提出了剪切模量和体积模量之间的比值(B/G),用于预测材料的脆性或延性行为。高的 B/G 值与延展性相关,低的 B/G 值与脆性相关。从表 3 可以看出,在应力和无应力条件下 Mg_5Si_6 的 B/G 值均高于 1.75 这个阈值,表现出韧性行为。而

表3 应力和无应力条件下 Mg_5Si_6 、 Mg_9Si_5 和 Mg_2Si 的机械性能($B, G, E, \nu, B/G$)

Tab.3 Mechanical properties ($B, G, E, \nu, B/G$) of Mg_5Si_6 , Mg_9Si_5 and Mg_2Si under stress and non-stress conditions

Phase	$\beta''/\text{Mg}_5\text{Si}_6$	$\beta''(\text{stress})$	$\beta'/\text{Mg}_9\text{Si}_5$	$\beta'(\text{stress})$	$\beta/\text{Mg}_2\text{Si}$	$\beta(\text{stress})$
B_V	63.670	79.92	58.90	73.60	54.32	69.100
B_R	62.040	77.42	58.84	73.56	54.32	69.100
B	62.860	78.67	58.87	73.58	54.32	69.100
G_V	24.490	22.26	40.31	47.40	45.76	52.620
G_R	14.610	6.17	36.64	43.83	45.75	52.580
G	19.550	14.22	38.47	45.62	45.75	52.600
B/G	3.220	5.53	1.53	1.610	1.19	1.310
E	53.140	40.22	94.77	113.41	107.17	125.870
ν	0.359	0.415	0.232	0.243	0.171	0.196

Mg_9Si_5 和 Mg_2Si 的 B/G 值均低于 1.75, 并且 Mg_2Si 的 B/G 值最低,说明 Mg_2Si 的脆性最高。此外,可以推断出随着拉伸应力的施加, B/G 值均降低, Mg_5Si_6 和 Mg_9Si_5 均有可能在拉伸应力下向 Mg_2Si 转变。

2.4 电子特性

图 2 所示为 Mg_5Si_6 、 Mg_9Si_5 和 Mg_2Si 的总态密度(total density of states, TDOS)和分波态密度(partial wave density of states, PDOS)。在这 3 种相结构中我们发现 Mg_2Si 显示出半导体特征。采用 METAGGA 中的 SCAN 泛函计算出的 Mg_2Si 带隙值为 0.43 eV, 虽然依然低于实验值 0.74 eV^[28], 但比其他学者模拟

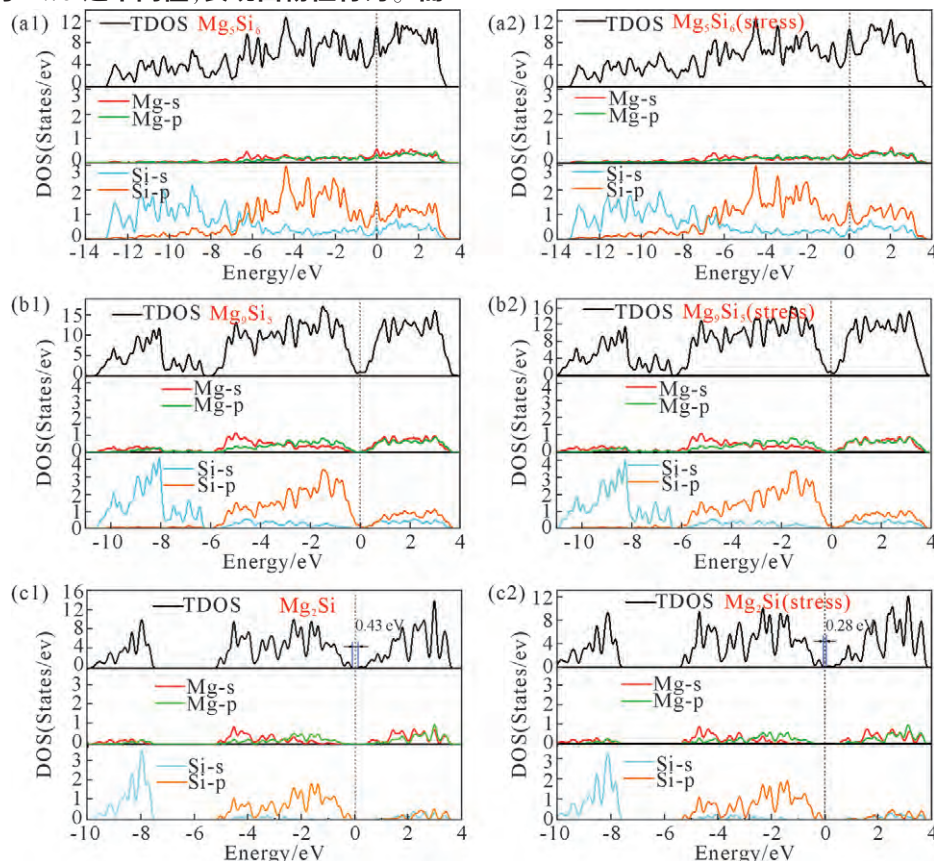


图 2 不同应力条件下析出相的 TDOS 和 PDOS: (a) Mg_5Si_6 , (b) Mg_9Si_5 , (c) Mg_2Si

Fig.2 TDOS and PDOS of the precipitated phase under different stress conditions: (a) Mg_5Si_6 , (b) Mg_9Si_5 , (c) Mg_2Si

计算的结果(0.22 eV^[12]、0.23 eV^[29])更接近实验值。 Mg_5Si_6 和 Mg_9Si_5 均表现出金属特征,在费米能级处的态密度(density of states, DOS)主要由 Si 的 2p 态贡献。3 种相结构在费米能级以下,价带主要由 Si 原子做贡献,Si-s 态占据低能级,Si-p 态占据高能级。此外,从图 2 中可以发现, Mg_9Si_5 的费米能级几乎落在能隙谷中,这意味着该相相较于 Mg_5Si_6 相更加稳定,与实验结果一致^[30]。

在施加压缩应力情况下,我们发现 Mg_2Si 的带隙从 0.43 eV 减小到 0.28 eV,半导体特征减弱。这意味着随着压缩应力的增加, Mg_2Si 相会逐渐“金属化”,直至发生相变。总体而言,压缩应力使 3 种相结构的导带轻微上移,价带轻微下移,费米能级上升。然而,从图 2 中可以发现,对于 3 种相结构,Mg 态对总态密度的贡献并不显著,因为 Mg 原子向 Si-Si 提供电子以稳定结构。

3 结论

(1) Mg_5Si_6 的体模量最大,从而其强度最大; Mg_2Si 的剪切模量和弹性模量最大,因而其抗剪切能力和刚度最强。

(2)压缩应力下,3 种析出相的 B/G 值均增大,则均向韧性转变。

(3)应力的施加会普遍提高析出相的生成焓和内聚能,从而降低其稳定性,促使亚稳态析出相向稳态析出相转变。

(4)此外,压缩应力会减小 Mg_2Si 的带隙,使其“金属化”。

参考文献:

- [1] MARIOARA C D, ANDERSEN S J, JANSEN J, et al. The influence of temperature and storage time at RT on nucleation of the β' phase in a 6082 Al-Mg-Si alloy[J]. *Acta Materialia*, 2003, 51(3): 789-796.
- [2] VISSERS R, VAN HUIS M A, JANSEN J, et al. The crystal structure of the β' phase in Al-Mg-Si alloys[J]. *Acta Materialia*, 2007, 55(11): 3815-3823.
- [3] ZANDBERGEN H W, ANDERSEN S J, JANSEN J. Structure determination of Mg_5Si_6 particles in Al by dynamic electron diffraction studies[J]. *Science*, 1997, 277(5330): 1221-1225.
- [4] 罗旭东,祖立成,王飞,等. 3003-H16 铝合金卷材生产过程中的组织演变[J]. *金属热处理*, 2022, 47(10): 36-45.
LUO X D, ZU L C, WANG F, et al. Microstructure evolution of 3003-H16 aluminum alloy coil during production[J]. *Heat Treatment of Metals*, 2022, 47(10): 36-45.
- [5] 周殿买,范军,韩庆利,等. 铸造 Al-Zn-Mg-Cu-Zr-Sc 合金热处理析出相转变及其对力学性能的影响[J]. *精密成形工程*, 2022, 14(4): 146-153.
- [6] ZHAO D D, ZHOU L C, KONG Y, et al. Structure and thermodynamics of the key precipitated phases in the Al-Mg-Si alloys from first-principles calculations[J]. *Journal of Materials Science Letters*, 2011, 46: 7839-7849.
- [7] ZHANG H, WANG Y, SHANG S L, et al. Solvus boundaries of (meta) stable phases in the Al-Mg-Si system: First-principles phonon calculations and thermodynamic modeling[J]. *Calphad*, 2010, 34(1): 20-25.
- [8] 梁敏洁,姚宝星,廖海洪,等. 压力下 Mg_2Ca 、 Al_2Ca 和 Mg_2Si 相稳定性的第一性原理研究[J]. *热加工工艺*, 2023, 52(10): 25-28, 34.
LIANG M J, YAO B X, LIAO H H, et al. First-principles study on the stability of Mg_2Ca , Al_2Ca and Mg_2Si phases under pressure[J]. *Hot Working Technology*, 2023, 52(10): 25-28, 34.
- [9] HE A N, XIAO Q Q, QIN M Z, et al. Study on the electronic structure and optical properties of Nd-incorporated Mg_2Si by first principles[J]. *Journal of Electronic Materials*, 2021, 50: 4083-4089.
- [10] HUAN T D, LE N B, DEVICES. Characterizing magnesium-silicon binaries in Al-Mg-Si supersaturated solid solution by first-principles calculations[J]. *Journal of Science: Advanced Materials*, 2016, 1(4): 527-530.
- [11] LU N, WANG J, ZHANG CH. First-principles study of the structural and mechanical properties of substitution-doped Mg_5Si_6 [J]. *Journal of Materials Research*, 2022, 37: 2996-3008.
- [12] ZHANG B, WU L L, WAN B, et al. Structural evolution, mechanical properties, and electronic structure of Al-Mg-Si compounds from first principles[J]. *Journal of Materials Science*, 2015, 50: 6498-6509.
- [13] SUN J W, RUZSINSZKY A, PERDEW J P. Strongly constrained and appropriately normed semilocal density functional[J]. *Physical Review Letters*, 2015, 115(3): 036402.
- [14] MONKHORST H J, PACK J D. Special points for Brillouin-zone integrations[J]. *Physical Review B*, 1976, 13(12): 5188-5192.
- [15] WANG V, XU N, LIU J C, et al. VASPKit: A user-friendly interface facilitating high-throughput computing and analysis using VASP code[J]. *Computer Physics Communications*, 2021, 267: 108033.
- [16] RAVI C, WOLVERTON C. First-principles study of crystal structure and stability of Al-Mg-Si-(Cu) precipitates[J]. *Acta Materialia*, 2004, 52(14): 4213-4227.
- [17] VILLARS P, CALVERT L D. Pearson's handbook of crystallographic data for intermediate phases[M]. Ohio: ASM International, 1985.
- [18] XIAO P, GAO Y M, YANG C C, et al. Effect of Sb doping on microstructure, mechanical and electronic properties of Mg_2Si in $\text{Mg}_2\text{Si}/\text{AZ91}$ composites by experimental investigation and first-principles calculation[J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2022, 902: 163859.
- [19] FAN Y C, KANG Q, ZHANG K, et al. Design criterion based on the cohesive energy and defect patterns of VO_2 thermally induced phase transition materials[J]. *Ceramics International*, 2020, 46(9): 12455-12465.

- 13615-13621.
- [20] DEMAREST H H JR., OTA R, ANDERSON O L. Prediction of high pressure phase transitions by elastic constant data [M]//MANGHANI M H, AKIMOTO S I. High-Pressure Research. Amsterdam: Elsevier, 1977: 281-301.
- [21] ANDERSON O L, DEMAREST H H JR. Elastic constants of the central force model for cubic structures: Polycrystalline aggregates and instabilities[J]. Journal of Geophysical Research, 1971, 76(5): 1349-1369.
- [22] FAN Y C, LIU Y S, ZHANG K, et al. Phase-change regulation criterion based on size-dependent lattice distortion rate and born theory for VO₂ nanomaterials[J]. Ceramics International, 2021, 47(3): 3232-3237.
- [23] BORN M, HUANG K, LAX M. Dynamical theory of crystal lattices[J]. American Journal of Physics, 1955, 23(7): 474.
- [24] WU Z J, ZHAO E J, XIANG H P, et al. Crystal structures and elastic properties of superhard Ir N₂ and Ir N₃ from first principles[J]. Physical Review B, 2007, 76(5): 054115.
- [25] HILL R. The elastic behaviour of a crystalline aggregate[J]. Proceedings of the Physical Society. Section A, 1952, 65(5): 349-354.
- [26] 万杨杰, 钱晓英, 曾迎, 等. Al-Zn-Mg 合金的相图计算及电子结构与力学性能的第一性原理计算[J]. 材料导报, 2021, 35(2): 2139-2144.
- WAN Y J, QIAN X Y, ZENG Y, et al. First-principles studies on electronic structure and mechanical properties and phase diagram calculation of Al-Zn-Mg alloy[J]. Materials Reports, 2021, 35(2): 2139-2144.
- [27] PUGH S F. XCII. Relations between the elastic moduli and the plastic properties of polycrystalline pure metals[J]. The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science, 1954, 45(367): 823-843.
- [28] MAHAN J E, VANTOMME A, LANGOUCHE G, et al. Semiconducting Mg₂Si thin films prepared by molecular-beam epitaxy[J]. Physical Review B, 1996, 54(23): 16965.
- [29] VIENNOIS R, JUND P, COLINET C, et al. Defect and phase stability of solid solutions of Mg₂X with an antiferroite structure: An ab initio study[J]. Journal of Solid State Chemistry, 2012, 193: 133-136.
- [30] JI S D, IMAI M, ZHU H K, et al. Structural characterization of magnesium-based compounds Mg₂Si₃ and Mg₄Si₃Al (superconductor) synthesized under high pressure and high temperature conditions[J]. Inorganic Chemistry, 2013, 52(7): 3953-3961.