DOI:10.16410/j.issn1000-8365.2023.3008

# 中性环境下高铬铸铁电化学腐蚀阳极 溶解行为研究

金海霓 1,2, 隋育栋 1,2, 蒋业华 1,2, 周谟金 1,2

(1. 昆明理工大学 材料科学与工程学院, 云南 昆明 650000; 2. 昆明理工大学 金属先进凝固成形及装备技术国家地方联 合工程研究中心, 云南 昆明 650000)

摘 要:面向长期在海洋大气环境下使用的高铬铸铁材料,其晶面取向不同的表面的腐蚀行为存在差异必然会引 发微观腐蚀原电池及点蚀萌生。通过明确不同取向表面的腐蚀行为,调控特定取向表面的占比及组合,可有效减弱高铬 铸铁材料的电偶腐蚀敏感性,延缓腐蚀速率。本文通过第一性原理建模,计算了 KmTBCr26 高铬铸铁中(100)、(110)和 (111)3 个晶面的腐蚀电位和腐蚀电流密度,获得了该牌号铸铁在 NaCl 中性环境下的电化学腐蚀阳极溶解反应极化曲 线。结果表明,在理想表面的情况下,3 个低指数表面中(100)面的腐蚀电位最高且腐蚀电流密度最低,分别为 -0.567 4 V 和 -7.858 7 log(A/cm<sup>2</sup>),表现出最优的耐蚀性。而表面空位和 Cl 吸附则会导致 3 个低指数表面腐蚀电流密度的计算结果 增大,即阳极溶解速率加快,且略微降低了不同表面间溶解速率的差距;同时也会导致所有表面的腐蚀电位降低,略微 缩小了不同表面间的电位差。

关键词:高铬铸铁;电化学腐蚀;腐蚀电流密度;腐蚀电位

中图分类号: TG143 文献标识码: A 文章编号:1000-8365(2023)04-0358-05

## Anodic Dissolution Behavior of Electrochemical Corrosion of High Chromium Cast Iron in a Neutral Environment

JIN Haini<sup>1,2</sup>, SUI Yudong<sup>1,2</sup>, JIANG Yehua<sup>1,2</sup>, ZHOU Mojin<sup>1,2</sup>

(1. College of Materials Science and Engineering, Kunming University of Science and Technology, Kunming 650000, China; 2. National & Local Joint Engineering Research Center of Advanced Metal Solidification Forming and Equipment Technology, Kunming University of Science and Technology, Kunming 650000, China)

**Abstract**: For high chromium cast iron (HCCI) used in marine atmospheres for a long time, the different corrosion behaviors of surfaces with different crystal orientations will inevitably lead to microscopic corrosion galvanic cells and pitting initiation. By defining the corrosion behavior of different oriented surfaces and adjusting the proportion and combination of specific oriented surfaces, the galvanic corrosion sensitivity of high chromium cast iron can be effectively weakened and the corrosion rate of high chromium cast iron can be delayed. Therefore, in this paper, the corrosion potential and corrosion current density of the (100), (110) and (111) crystallographic surfaces in KmTBCr26 high chromium cast iron were calculated by first principles modelling, and the electrochemical corrosion anodic dissolution reaction polarization curves of this HCCI in a neutral NaCl environment were obtained. The results show that the surface with (100) orientation has the highest corrosion potential and the lowest corrosion current density among the three low-index surfaces, which are -0.567 4 V and -7.858 7 log(A/cm<sup>2</sup>) for the ideal surfaces, respectively, showing the best corrosion resistance. However, the existence of surface vacancies and Cl adsorption can lead to an increase in the calculated results of corrosion current density on all the three low-index surfaces, that is, the anode dissolution rate is accelerated, and the dissolution rate

收稿日期:2023-01-17

基金项目: 云南省科技厅联合专项面上项目(202101BE070001-041)

作者简介:金海霓,1997年生,山东淄博人,硕士研究生.研究方向:金属电化学腐蚀行为研究.电话:17787258039, Email:jinhaini7@163.com

通讯作者:隋育栋,1986年生,工学博士,副教授,硕士生导师.研究方向:铝、镁等轻合金材料及其成形技术的研究.电话:13619688136, Email: suiyd2016@126.com

引用格式:金海霓,隋育栋,蒋业华,等.中性环境下高铬铸铁电化学腐蚀阳极溶解行为研究[J].铸造技术,2023,44(4):358-362. JIN H N, SUI Y D, JIANG Y H, et al. Anodic dissolution behavior of electrochemical corrosion of high chromium cast iron in a neutral environment[J]. Foundry Technology, 2023,44(4):358-362.

gap between different surfaces is slightly reduced. At the same time, it also reduces the corrosion potential of all surfaces and slightly narrows the potential difference between different surfaces.

Key words: high chromium cast iron; electrochemical corrosion; corrosion current density; corrosion potential

高铬铸铁具有成本低、强度高、耐磨性好、抗高 温和耐蚀性能优异等优点,在矿山、冶金、机械、建 材等领域获得了广泛应用<sup>[1-2]</sup>。随着我国海洋资源的 开发利用,可长期在海洋大气环境下使用的高铬铸 铁材料研究成为新的热点。

与内陆大气环境相比,海洋大气环境湿度大, 盐分和温度高,高铬铸铁材料表面会形成一层氯离 子含量较高的电解质水膜,铸铁中不同取向的表面 在同一电解质中的电极电位不同,在局部会形成大 量的腐蚀原电池,并且环境中Cl-会在铸铁表面进行 吸附、渗透和破坏,从而导致高铬铸铁出现点蚀和 晶间腐蚀等电化学腐蚀现象<sup>[34]</sup>,造成零件的失效和 报废。目前,评价材料的腐蚀性能大多通过实验的 方法对样品表面进行表征和测试[5-0],这种方法存在 试验周期长、结果误差大等缺点[7-9],因此,迫切需要 从原子和电子层面解释电化学腐蚀的微观机理,并 以此获得与晶体取向相关的各向异性腐蚀行为的 预测。Wang等<sup>[10]</sup>利用第一性原理计算不同晶面的功 函数,分析了电子从不同晶面逃逸的难度,其研究 表明材料表面的功函数越大,失去电子的可能性越 小,更容易在电偶腐蚀中充当阴极相。Ding等[11]计算 了一个Fe原子从界面迁移到液体的迁移势垒,从而 表明有一个特定的晶体取向面比其他取向面更易 遭受腐蚀。王健等[12]发现低合金钢中的(110)织构对 低合金钢在NaCl溶液中的耐蚀性有积极效应,然 而,对于处在腐蚀环境为NaHCO<sub>3</sub>溶液中的低合金 钢,比起(111)晶面,(110)晶面的择优取向对钝化膜 的保护性能表现出消极的效应。Trisnanto等<sup>[13]</sup>揭 示了316L不锈钢单晶中的3个主要取向晶面在3.5% NaCl(质量分数)溶液中的耐腐蚀性能从高到低排序 依次为{111}>{100}>{110}。

综上所述,虽然目前国内外学者从原子-电子 层面对材料的电化学腐蚀行为进行了计算和探讨, 但高铬铸铁材料的不同取向晶面对耐蚀性的影响 仍有待研究。因此,本文探究了KmTBCr26高铬铸铁 基体在理想单晶条件下,不同取向晶面的电化学腐 蚀阳极溶解过程,并在此基础上考虑了空位、吸附 后的相应取向晶面的腐蚀电位和腐蚀电流密度,未 来通过明确不同取向表面的腐蚀行为,调控特定取 向表面的占比及组合,可有效减弱高铬铸铁材料的 电偶腐蚀敏感性,延缓腐蚀速率<sup>[14]</sup>,为提高高铬铸铁 的耐蚀性提供理论参考。

## 1 研究原理及方法

#### 1.1 研究原理

不同于以往用表面能<sup>[15-16]</sup>或功函数<sup>[10-17]</sup>来定性地 解释材料的各向异性腐蚀行为,Ma等<sup>[19]</sup>提出了一个 有效的计算模型来研究腐蚀各向异性的内在机制。 该模型在第一性原理计算框架下,依据曹楚南提出 的反应速率推导过程<sup>[18]</sup>推导出阳极溶解反应过程中 决定反应速率的两个重要参数(电极反应的活化能和 电极反应平衡态的绝对电位)的表达式,并进一步综 合用表面能、功函数和表面能量密度等作为基本参 数构建起材料在阳极溶解过程中绝对电位与电流密 度的关系式,定量表示出材料的塔菲尔直线(Tafel line)。本文采用阳极溶解反应过程绝对电位U与电流 密度/的关系式<sup>[19]</sup>作为KmTBCr26基体阳极溶解反应 的第一性原理计算模型:

$$\ln I = \ln \left( c_{M} n F \frac{kT}{h} \right) + \frac{\alpha n F U - \Delta G_{0}}{RT} + \frac{E_{\text{surf}} + \sum_{i} c_{i}^{\text{vac}} E_{i}^{\text{vac}} + \sum_{j} c_{j}^{\text{ad}} E_{j}^{\text{ad}}}{\rho kT}$$
(1)

式中, $c_{\rm M}$ 为基体的浓度;n为反应中转移的电子数; $\alpha$ 为传递系数; $\Delta G_0$ 为活化态与反应物体相态的平均 摩尔能量差;F,k,T,h和R分别为法拉第常数,玻尔 兹曼常数,绝对温度,普朗克常数和气体常数; $E_{\rm surf}$ 为 比表面能; $E_{\rm surf}$ / $\rho$ 为表面能量密度; $E_{\rm vac}$ 和 $c_{\rm vac}$ 分别为表 面空位形成能和空位浓度; $E_{\rm ad}$ 和 $c_{\rm ad}$ 分别为吸附能和 表面离子浓度。该式即为塔菲尔直线的表达式,可 以看出,表面原子能量密度( $E_{\rm surf}$ / $\rho$ )是影响阳极反 应速率的决定性因素。其中各关键参数 $E_{\rm surf}$ , $E_{\rm surf}$ / $\rho_{\sim}c^{\rm vac}E^{\rm vac}/\rho_{\sim}c^{\rm ad}E^{\rm ad}/\rho$ 和 $\Delta G_0$ 均通过密度泛函理论DFT框架 下的第一性原理计算获得。

1.2 计算方法

本文选取高铬铸铁KmTBCr26的奥氏体基体 中3个常见低指数表面(100),(110)和(111)面来探 究基体电化学腐蚀的各向异性阳极溶解行为。涉及计 算均采用基于密度泛函理论(density functional theory, DFT)的Dassault Systèmes BIOVIA Materials Studio软件中的CASTEP模块进行,利用投影缀加平面波 (projector augmented wave, PAW)赝势处理价电子与 离子实间的相互作用,交换关联泛函采用Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE)的广义梯度近似(generalized gradient approximation, GGA)方法。本文采用OTFG ultrasoft赝势,电子波函数通过平面波基组扩展,优 化测试后将平面波截断能设置为381 eV。为了忽略相邻表面之间的相互作用,足够准确地计算出表 面能和功函数,在使用周期性平板结构模型的同时,对基体理想表面和考虑表面空位、Cl吸附后的基 体表面进行建模,片层间的真空层厚度设为20 Å。 在表面模型中固定中间的原子层以模拟块体相, 充分弛豫上下表面,当原子间力的最大值约小于 0.2 eV·nm<sup>-1</sup>时,驰豫结束。此时电子功函数φ 定义为 真空能级与费米能级之差,计算方法<sup>[19]</sup>见下式:

$$\phi = V_{e} - E_{f} \tag{2}$$

式中, $V_{e}$ 和 $E_{f}$ 分别为远离表面的真空区域的能量和 费米能量。表面能是将一个晶体切成2个半晶体所 需的能量,常用于评价一个表面的稳定性。单位面 积表面能( $E_{sur}$ )通过下式进行计算<sup>[19]</sup>:

$$E_{\text{surf}} = \frac{1}{2S} \left[ E_{\text{slab}}(n) - nE_{\text{bulk}} \right]$$
(3)

式中, *E*<sub>slab</sub>(*n*), *E*<sub>bulk</sub>和*S*分别为具有*n*个原子的表面模型的总能量,单个体相原子的能量和表面模型的单面表面积。表面空位形成能(*E*<sup>vac</sup>)是将晶体内的一个原子移除到体外,生成单个原子空位所需要的能量,计算方法见下式:

$$E^{\text{vac}} = \frac{1}{2} [E(\text{slab}+2\text{vac}) - E(\text{slab}) + 2E(\text{bulk})] \quad (4)$$

式中,*E*(slab+2vac),*E*(slab)和*E*(bulk)分别为有2个表 面空位的表面模型的能量,完美表面模型的能量和 单个体相原子的能量。Cl吸附能(*E*<sup>ad</sup>)是粒子在材料 表面吸附前后的能量差,通过下式计算获得:

$$E^{\text{ad}} = \frac{1}{2} [E(\text{slab}+2\text{Cl}) - E(\text{slab}) - E(\text{Cl}_2)]$$
 (5)

式中,E(slab+2Cl), E(slab)和 $E(\text{Cl}_2)$ 分别为有2个Cl原 子吸附的表面模型的能量,完美表面模型的能量和 Cl<sub>2</sub>分子的能量。

### 2 计算结果与分析

KmTBCr26高铬铸铁基体主要由Fe,Cr组成,碳 含量很低,Cr元素无序置换固溶在面心立方结构的 γ-Fe基体中。在不考虑基体中的其他微量合金元素 存在所产生的影响的前提下,用优化后的fcc-Fe模型 中的Cr原子随机替换Fe原子,建立起KmTBCr26基 体的结构,其化学式为Fe<sub>27</sub>Cr<sub>5</sub>。通过周期性超胞构建 Fe<sub>27</sub>Cr<sub>5</sub>基体的表面模型,在收敛性测试中计算未弛 豫的Fe<sub>27</sub>Cr<sub>5</sub>的(100)、(110)和(111)取向表面的表面 能,确定收敛所需的表面平板模型中的原子层数和 真空层厚度。对于Fe<sub>27</sub>Cr<sub>5</sub>的(100)、(110)和(111)取向 表面,分别采用8、9和5个原子层厚度,且真空层均设 为20 Å。

利用第一性原理计算得到了KmTBCr26基体的 (100)、(110)和(111)理想表面的比表面能( $E_{surf}$ )和 表面能量密度( $E_{surf}\rho$ ),如表1所示。从表中可以看出, 比表面能在不同取向晶面间的变化范围为2.833~ 3.044 J/m<sup>2</sup>,且最稳定表面是(100)取向的表面。由于 材料表面上粒子的逃逸和腐蚀环境中粒子吸附的存 在会导致表面附近应力的变化而影响表面能,因此 计算了表面空位和Cl吸附的存在对表面能量密度产 生的影响,发现越稳定的表面,其表面空位形成能越 高,Cl吸附能越高,当然这种影响程度显著取决于表 面空位的数量和表面吸附的Cl浓度。

为阐明KmTBCr26基体不同表面的腐蚀行为. 假定每个表面均接触相同的腐蚀环境、且假定单价 Fe<sup>+</sup>作为阳极溶解反应的中间态,即反应过程中的电 荷转移数n为1。通过拟合实验上的塔菲尔直线获得 传递系数 $\alpha=0.12$ ,并假定绝对温度T为室温条件下的 298 K。 $\Delta G_0$ 是阳极溶解反应的活化态粒子与反应物 体相原子的平均摩尔能量差,只与KmTBCr26基体 材料的体相有关,与晶面取向无关。据傅献彩等<sup>[20]</sup>提 出的 $\Delta G_0$ 的定义表述可知, $\Delta G_0$ 约为反应物打破化学 键,失去电子生成离子整个过程所需能量的30%。 故通过计算体相态原子到单个独立态原子再到阳离 子的能量得到整个过程所需能量,进而得到 $\Delta G_{0}=$ 4.975 eV。此外,为了得到不同表面的腐蚀电位及腐 蚀电流密度,引入了析氢反应作为去极化反应。即假 定所有晶面的析氢行为相同,选取在pH=11的溶液 中, 交换电流密度为 $10^{-10}$  A/cm<sup>2</sup>, 平衡电极电位 $E_{e}$  $(H_2/H^+) = -0.65$  V<sub>SHE</sub>的析氢反应作为去极化反应,并

表 1 DFT 计算得到的 Fe<sub>27</sub>Cr<sub>5</sub> 3 个取向表面的塔菲尔直线表达式中各关键参数的具体取值,*c*<sup>vac</sup>*E*<sup>vac</sup>/\rho 和 *c<sup>ad</sup>E<sup>ad</sup>*/\rho 分别是表面空 位和 Cl 吸附对 3 个表面的表面能量密度的影响

Tab.1 DFT-derived specific	e values of several key	y parameters in the	e formula of the	Tafel line for three	low-index surfaces
of Fe <sub>27</sub> Cr <sub>5</sub> . $c^{\text{vac}}E^{\text{vac}}/\rho$ and	$c^{ad}E^{ad}/\rho$ are the impa	cts of the escape o	f Mg atoms and	chlorine adsorption	on the surface

Surface	$E_{\text{surf}}/(\mathbf{J} \cdot \mathbf{m}^{-2})$	$\frac{E_{\text{surf}}}{\rho}/(\text{eV}\cdot\text{atom}^{-1})$	$E^{\rm vac}/{\rm eV}$	$\frac{c^{\mathrm{vac}}E^{\mathrm{vac}}}{ ho}/(\mathrm{eV}\cdot\mathrm{atom}^{-\mathrm{I}})$	$E^{\rm ad}/{\rm eV}$	$\frac{e^{\mathrm{ad}}E^{\mathrm{ad}}}{ ho}/\mathrm{eV}\cdot\mathrm{atom}^{\mathrm{-1}}$	$\Delta G_0/\mathrm{eV}$
(100)	2.833	0.066	8.820	0.003 3	-4.291	-0.001 9	4.975
(110)	3.044	0.091	5.735	0.002 8	-4.540	-0.002 6	4.975
(111)	2.871	0.074	6.510	0.002 7	-4.470	-0.002 2	4.975

且假定其传递系数为实验上常见的 $\alpha=0.5$ 。

结合表1中DFT计算得到的各关键参数,依据式 (1)得出KmTBCr26基体3个低指数晶面的阳极溶解 反应极化曲线,如图1所示。图1(a)为理想表面,图1 (b)为考虑表面空位及Cl吸附后的表面。为了能与实 验数据进行直接比对,KmTBCr26基体的阳极溶解 反应的电位值参考标准氢电极作了相应的移动。从 图中可以发现,各面的腐蚀电位由低到高依次为U (110)<U(111)<U(100),腐蚀电流密度由小至大依次 为*I*(100)<*I*(111)<*I*(110),说明(100)面的阳极溶解速 率最小,其腐蚀电位和腐蚀电流密度在理想表面 的情况下分别为-0.5674 V和-7.8587 log(A/cm<sup>2</sup>), 表现出最优的耐蚀性,由公式(1)可以看出这是 因为(100)面的表面能量密度( $E_{surf}\rho$ )最低。在理想 表面情况下,(100)面的腐蚀电位要比(111)面高 约31 mV,比(110)面高约99 mV;而(111)面与 (110)面的阳极溶解速率分别是(100)面的2.27倍与 12.58倍。

此外,如表2~3所示,表面空位和Cl吸附对表面 能量密度的综合作用 $(c^{vac}E^{vac}+c^{ad}E^{ad})/\rho$ 导致所有计算 表面的腐蚀电流密度增大,即阳极溶解速率加快,且 略微降低了不同表面间溶解速率的差距。同时,所 有计算表面的腐蚀电位发生降低,且略微缩小了不 同表面间的电位差。比如,(111)面、(110)面的腐 蚀电位在考虑表面空位和Cl吸附后,由-0.8791V、 -1.556 8 V分别降为-0.897 5 V、-1.562 1 V;(110)面 与(111)面间的电位差由考虑表面空位和Cl吸附前 的0.6777V减小为0.6647V,如表2~3所示。而当 KmTBCr26基体表面的空位或表面吸附的Cl浓度 增大时,不同表面之间溶解速率的差别会减小。就 (111)面和(110)面来讲,将其表面空位浓度和表 面吸附的Cl浓度由0.001 Å<sup>-2</sup>增大到0.01 Å<sup>-2</sup>时,其 考虑表面空位和Cl吸附后的腐蚀电流密度将变为 -7.319 2 log(A/cm<sup>2</sup>)和-6.705 3 log(A/cm<sup>2</sup>),(110)面与 (111) 面间考虑表面空位和Cl吸附后的溶解速率差距  $\Delta I$ 将由0.731 0 log(A/cm<sup>2</sup>)变为0.613 9 log(A/cm<sup>2</sup>),由





Fig.1 The polarization curves of the anodic dissolution reaction of three low-index surfaces of the KmTBCr26 matrix: (a) the ideal surfaces, (b) the surfaces considering the escape of Mg atoms and chlorine adsorption on the surface. Both the reaction of anodic dissolution and cathodic hydrogen evolution adopt a standard hydrogen electrode as a reference

表 2 考虑空位、吸附前后,KmTBCr26 基体的 3 个低指数表面的阳极溶解曲线的腐蚀电流密度 log(*I*/(A·cm<sup>-2</sup>))与腐蚀电位 *U*(V vs. SHE)比较

Tab.2 Comparison of corrosion current density  $log(I/(A \cdot cm^{-2}))$  and corrosion potential U(V vs. SHE) of anodic dissolution curves on three low-index surfaces of the KmTBCr26 matrix

_						
晶面取向	腐蚀电	流密度	腐蚀电位			
	月面取向	log( <i>I</i> /( <i>I</i>	<b>A</b> •cm <sup>-2</sup> ))	U(V vs. SHE)		
	<u> </u>	理想表面	考虑空位、吸	田相主西	考虑空位、吸	
			附后的表面	理怨衣囬	附后的表面	
	(111)	-7.503 0	-7.484 6	-0.879 1	-0.897 5	
	(110)	-6.759 0	-6.753 6	-1.556 8	-1.562 1	
	(100)	-7.858 7	-7.805 4	-0.567 4	-0.620 7	

此可以得知,在表面空位及CI吸附浓度增大后,不同 表面间溶解速率的差别确实减小了。这时晶面取向 因素对腐蚀速率的影响相应减弱,也就是说,基体材 表3 考虑空位、吸附前后,KmTBCr26基体的3个低指数表面 之间溶解速率差距 Δ*I*[log(A/cm<sup>2</sup>)]和电位差 Δ*U*(V vs. SHE)的比较

Tab.3 Comparison of the dissolution rate gap  $\Delta I[\log(A/cm^2)]$  and potential difference  $\Delta U(V \text{ vs. SHE})$ between each two surfaces of the three low-index surfaces of the KmTBCr26 matrix

	溶解速	率差距	电位差			
任意两面	$\Delta I[\log(A/cm^2)]$		$\Delta U$ (V vs. SHE)			
之差	田相主西	考虑空位、吸	珊相主声	考虑空位、吸		
	珪忍衣面	附后的表面	理怨衣囬	附后的表面		
(110)/(111)	0.744 0	0.731 0	0.677 7	0.664 7		
(110)/(100)	1.099 7	1.051 8	0.989 3	0.941 5		
(111)/(100)	0.355 7	0.320 8	0.3117	0.276 8		

料的表面状态和腐蚀环境中的粒子在电极(基体 材料)表面的吸附浓度直接影响电极(基体)材料的电 化学腐蚀行为。

## 3 结论

(1)(100)取向表面在3个低指数表面中具有最 高的腐蚀电位-0.567 4 V和最低的腐蚀电流密度 -7.858 7 log(A/cm<sup>2</sup>),说明其具有最低的阳极溶解反 应速率,表现出最优越的耐腐蚀性能。

(2)各面的腐蚀电位由低到高依次为U(110)<U (111)<U(100),腐蚀电流密度由小至大依次为I(100) <I(111)<I(110)。在理想表面情况下,(100)面的腐蚀 电位要比(111)面高约31 mV,比(110)面高约99 mV; 而(111)面与(110)面的阳极溶解速率分别是(100)面 的2.27倍与12.58倍。

(3)KmTBCr26基体材料的表面空位的存在和腐 蚀环境中的粒子在材料表面的吸附会减弱晶面取向 因素对腐蚀行为的影响。

#### 参考文献:

- [1] 郭克星,夏鹏举.高铬铸铁耐磨性的研究进展与展望[J].铸造技术,2018,39(9):2138-2141.
  GUO K X, XIA P J. Reasearch progress and prospect of wear resistance of high chromium cast iron[J]. Foundry Technology, 2018, 39(9):2138-2141.
- [2] 杨雄,魏世忠,李继文,等.超高铬铸铁的研究现状与前瞻[J].铸造技术,2008,192(6):818-822.
  YANG X, WEI S Z, LI J W, et al. Research status and prospect of the ultra high chromium cast iron[J]. Foundry Technology, 2008, 192(6):818-822.
- [3] 李秀兰,谢文玲,郭翠霞.高铬铸铁在液-固两相流中的冲蚀磨损 行为[J].特种铸造及有色合金,2016,36(10):1027-1030.
  LI X L, XIE W L, GUO C X. Erosion wear beheavior of high chromium cast iron in fluid-solid two-phase flow [J].Special Casting & Nonferrous Alloys, 2016, 36(10): 1027-1030.
- [4] 高雪云,刘俊友,王海燕,等.新型含铝高铬铸铁的耐热腐蚀性 能研究[J].金属热处理,2011,36(3):37-40.
  GAO X Y, LIU J Y, WANG H Y, et al. Hot corrosion resistance of a new aluminium-containing high chromium cast iron [J]. Heat Treatment of Metals, 2011, 36(3): 37-40.
- [5] BADWE B, RAJA K S, MISRA M. A study of corrosion behavior of Ni-22Cr-13Mo-3W alloy under hygroscopic salt deposits on hot surface[J]. Electrochimica Acta, 2006, 51(26): 5836-5844.
- [6] 王法涛,范兴帅,龚慧民,等. 三维网络结构SiC-Fe复合材料制备 及腐蚀性能研究[J]. 润滑与密封,2022,47(11):33-39.
  WANG F T, FAN X S, GONG H M, et al. Preparation and corrosion proterties of iron matrix composites reinforced by SiC with 3D network structure [J]. Lubrication Engineering, 2022, 47(11): 33-39.
- [7] GU D D, ZHANG H, DAI D H, et al. Anisotropic corrosion behavior of Sc and Zr modified Al-Mg alloy produced by selective laser

melting[J]. Corrosion Science, 2020, 170: 108657.

- [8] WEN F, CHEN J Q, ZHONG S B, et al. Effect of crystal orientations and precipitates on the corrosion behavior of the Al-Cu alloy using single crystals[J]. Journal of Alloys and Compounds, 2022, 890: 161858.
- [9] HUANG J Y, FENG S Y, LI S Y, et al. The crystallographic corrosion and its microstructure in an Al-Cu-Li alloy [J]. Journal of Alloys and Compounds, 2021, 861: 158588.
- [10] 王健,王绍青. 铝合金表面电偶腐蚀与电子功函数的关系[J]. 物 理化学学报,2014,30(3):551-558.
  WANG J, WANG S Q. Correlation between galvanic corrosion and electronic work function of Al alloy surfaces[J]. Acta Physico-Chimica Sinica, 2014, 30(3): 551-558.
- [11] DING W Y, JIANG Z Z, ZHENG M J, et al. The influence of crystal orientation on corrosion behavior of iron in liquid PbLi [J]. Journal of Nuclear Materials, 2018, 509: 212-217.
- [12] WANG P J, MA L W, CHENG X Q, et al. Effect of grain size and crystallographic orientation on the corrosion behaviors of low alloy steel[J]. Journal of Alloys and Compounds, 2021, 857: 158258.
- [13] TRISNANTO S R, WANG X L, BROCHUM, et al. Effects of crystallographic orientation on the corrosion behavior of stainless steel 316L manufactured by laser powder bed fusion [J]. Corrosion Science, 2022, 196: 110009.
- [14] 李升,马幼平,李秀兰,等. 凝固速率对高铬铸铁微观组织及耐腐蚀性能的影响[J]. 兵器材料科学与工程,2013,36(3):38-40.
  LI S, MA Y P, LI X L, et al. Effects of solidification rate on microstructure and corrosion-resistance of high chromium cast iron
  [J]. Ordnance Material Science and Engineering, 2013, 36 (3): 38-40.
- [15] SONG G L, MISHRA R, XU Z Q. Crystallographic orientation and electrochemical activity of AZ31 Mg alloy [J]. Electrochemistry Communications, 2010, 12(8): 1009-1012.
- [16] 姬德朋,王绍青.第一原理方法研究六方晶系金属表面功函数 和表面能[J].金属学报,2015,51(5):597-602.
  JI D P, WANG S Q. Study of surface energy and work function of hex metals by first-principles calculation [J]. Acta Metallurgica Sinica, 2015, 51(5): 597-602.
- [17] QIN Y F, WANG S Q. Ab-Initio Study of the role of Mg<sub>2</sub>Si and Al<sub>2</sub>CuMg phases in electrochemical corrosion of Al alloys[J]. Journal of the Electrochemical Society, 2015, 162(9): C503-C508.
- [18] 曹楚南. 腐蚀电化学原理(第三版)[M]. 北京:化学工业出版社,2008.CAO C N. Principles of corrosion electrochemistry(3rd Edition)
- [19] MA H, CHEN X Q, LI R H, et al. First-principles modeling of anisotropic anodic dissolution of metals and alloys in corrosive environments[J]. Acta Materialia, 2017, 130: 137-146.

[M]. Beijing: Chemical Industry Press, 2008.

[20] 傅献彩,沈文霞,姚天扬,等.物理化学(第五版)[M].北京:高等 教育出版社,2006.

FU X C, SHEN W X, YAO T Y, et al. Physical Chemistry (5th Edition)[M]. Beijing: Higher Education Press, 2006.