

# 钛合金弹性性质的多尺度模拟

陈伟<sup>1</sup>, 牛丽娜<sup>1,2</sup>, 薛婷<sup>1</sup>, 张素芳<sup>1</sup>, 柴敏<sup>1</sup>, 赫娟<sup>1</sup>, 贾俊辉<sup>2</sup>

(1. 山西师范大学 生命科学学院, 山西 太原 030031)

(2. 山西师范大学 化学与材料科学学院 磁性分子与磁性信息材料教育部重点实验室, 山西 太原 030031)

**摘要:** 钛合金弹性性质因其组成成分以及组织结构的差异而不同。本研究基于多尺度弹性响应本构模型, 以双相 $\alpha+\beta$ 钛合金为例, 理论预测了钛合金在载荷作用下的等效弹性响应, 理论计算了不同相含量的钛合金等效弹性性质参数, 如等效弹性模量 $\bar{E}$ 、等效体积模量 $\bar{K}$ 、等效剪切模量 $\bar{G}$ 以及等效泊松比 $\bar{\nu}$ , 揭示了相含量对钛合金弹性性质的影响机制。与不同细观力学模型以及实验测量值的比较表明, 双相钛合金 $\bar{E}$ 受 $\alpha$ 相的影响较大, 随 $\alpha$ 相的降低, 近似从111.1 GPa逐渐降至87.5 GPa;  $\bar{K}$ 、 $\bar{G}$ 以及 $\bar{\nu}$ 受 $\beta$ 相的影响较大, 随 $\beta$ 相的增加,  $\bar{K}$ 近似从104.2 GPa增至117.2 GPa,  $\bar{G}$ 从42.0 GPa降至31.8 GPa,  $\bar{\nu}$ 从0.322增至0.376。模型预测值与实验测量值大致相当, 从而证实了该模型的准确性。

**关键词:** 钛合金; 弹性性质; 多尺度模拟

中图分类号: TG146.23

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2024)07-1909-08

钛及其合金在关键结构中的应用日益增多, 使得对其本征属性的研究愈发重要<sup>[1-2]</sup>。与其他合金材料不同, 钛合金的弹性性质, 如弹性模量 $E$ 以及泊松比 $\nu$ , 表现出较大差异, 这取决于合金成分以及组织结构<sup>[3-4]</sup>。室温下,  $\alpha$ -Ti弹性模量 $E$ 为100~110 GPa, 体积模量 $K$ 为106~108 GPa, 泊松比 $\nu$ 为0.320~0.360, 剪切模量 $G$ 为42~45 GPa<sup>[5]</sup>;  $\beta$ -Ti弹性模量 $E$ 为103~107 GPa, 泊松比 $\nu$ 为0.34~0.40, 剪切模量 $G$ 约为43 GPa<sup>[6]</sup>;  $\alpha+\beta$ 钛合金弹性模量 $E$ 为70~120 GPa<sup>[7]</sup>, 且 $\alpha+\beta$ 钛合金弹性性质与组分相的弹性性质以及晶体取向密切相关<sup>[8-9]</sup>。hcp结构的 $\alpha$ -Ti具有塑性各向异性<sup>[10]</sup>, bcc结构的 $\beta$ -Ti具有弹性各向异性<sup>[11]</sup>, 两者对 $\alpha+\beta$ 钛合金弹性变形的协同作用会影响钛合金内部应力响应过程, 但协同变形机理尚不清楚<sup>[12-13]</sup>。

国内外研究人员围绕着钛合金弹性性质开展了广泛研究。一方面, 借助声波显微技术<sup>[7]</sup>、中子衍射<sup>[14]</sup>、高能同步X射线衍射<sup>[15]</sup>等, 实验探究钛合金弹性常数; 另一方面, 借助多晶体材料细观力学模型, 如Hill模型<sup>[16]</sup>、自洽方法<sup>[17]</sup>以及第一性原理<sup>[18]</sup>等, 理论探究单相钛合金应力响应过程。然而, 多晶体模型并未考虑单晶体组分材料之间的相互作用, 且对复相材料的性质预测差强人意<sup>[19]</sup>。因此, 开展双相钛合金弹性响应的理论预测有助于分析 $\alpha+\beta$ 钛合金弹性性质, 为合理调控钛合金力学性能,

精确测量内部残余应力提供参考。本研究以 $\alpha+\beta$ 双相钛合金为例, 构建双相钛合金多尺度本构模型, 理论预测双相钛合金在载荷作用下的弹性响应, 理论计算不同相含量的钛合金等效弹性性质参数, 如等效弹性模量 $\bar{E}$ 、等效体积模量 $\bar{K}$ 、等效剪切模量 $\bar{G}$ 以及等效泊松比 $\bar{\nu}$ , 以期进一步揭示组分材料强化钛合金性质的作用机理, 定性分析不同微观组织的钛合金强化机制, 以构建双相钛合金构效关系。

## 1 弹性响应模型

为理论分析材料在载荷作用下的应力-应变关系, 常进行有关假设, 如Reuss的等应力假设<sup>[20]</sup>、Voigt的等应变假设<sup>[21]</sup>以及考虑晶体相互作用的Kroner模型<sup>[22]</sup>以及Mori-Tanaka(M-T)方法<sup>[23]</sup>等。本模型中, 将双相钛合金中的hcp结构的 $\alpha$ -Ti视为基体相, bcc结构的 $\beta$ -Ti视为增强相, 忽略组分相之间的界面作用, 借助等效代表体积单元<sup>[24]</sup>, 理论分析钛合金等效弹性响应。

单轴载荷作用下, 双相钛合金整体的弹性变形行为可用式(1)表示为

$$\frac{\varepsilon_{0,\psi}}{\sigma_{11}} = \left( \frac{1+\bar{\nu}}{\bar{E}} \right) \sin^2\psi - \left( \frac{\bar{\nu}}{\bar{E}} \right) \quad (1)$$

式中,  $\varepsilon_{0,\psi}$ 表示沿主轴应力 $\sigma_{11}$ 产生的宏观应变;  $\psi$ 为钛合金整体参考方向与晶体应变方向的夹角;  $\bar{E}$ 、 $\bar{\nu}$ 分

收稿日期: 2023-07-01

基金项目: 国家自然科学基金(21805175, 31701949); 青海省中央引导地方科技发展资金(2022ZY022)

作者简介: 陈伟, 男, 1985年生, 博士, 副教授, 山西师范大学, 山西太原030031, E-mail: chenweide2007@126.com

别表示钛合金整体的弹性性质，即等效弹性模量以及等效泊松比，与等效体积模量  $\bar{K}$  以及等效剪切模量  $\bar{G}$  满足

$$\bar{E} = \frac{9\bar{K}\bar{G}}{3\bar{K} + \bar{G}}, \bar{\nu} = \frac{3\bar{K} - 2\bar{G}}{6\bar{K} + 2\bar{G}} \quad (2)$$

当材料整体发生弹性变形时，材料内部晶体弹性阶段的应力-应变关系为

$$\bar{\sigma} = \bar{C} \cdot \bar{\epsilon} \quad (3)$$

上式中， $\bar{\sigma}$ 、 $\bar{\epsilon}$  分别表示材料整体的应力、应变； $\bar{C}$  表示复合材料整体的等效弹性刚度，与晶体结构的对称性有关。根据模型假设，双相钛合金整体载荷可借助有效代表体积单元几何描述，为纵向比较不同细观力学模型差异，给出经典模型理论计算弹性性质上的差异，并与本模型进行比较，定性分析模型之间的准确性。

### 1.1 Reuss 等应力模型

假设由单晶体组成的多晶体材料，载荷应力可均匀传递到组分材料中，则多晶体材料的等效弹性模量  $\bar{E}_R$  以及等效泊松比  $\bar{\nu}_R$  可由单晶体材料的弹性柔度系数  $S_{ij}$  定量描述<sup>[20]</sup>，即

$$\bar{E}_R = \frac{5}{3S_{11} + 2S_{12} + S_{44}}, \bar{\nu}_R = \frac{S_{44} - 2(S_{11} + 4S_{12})}{2(3S_{11} + 2S_{12} + S_{44})} \quad (4)$$

上式中， $S_{ij}$  ( $i, j=1, 2, 3, \dots, 6$ ) 表示 bcc 结构的单晶体弹性柔度系数；同理，对于 hcp 结构的单晶体组成的多晶体材料， $\bar{E}_R$ 、 $\bar{\nu}_R$  分别是

$$\bar{E}_R = \frac{15}{2(4S_{11} + 2S_{13} + S_{44}) + 3S_{33}} \quad (5)$$

$$\bar{\nu}_R = -\frac{S_{11} + 5S_{12} + 8S_{13} + S_{33} - S_{44}}{2(4S_{11} + 2S_{13} + S_{44}) + 3S_{33}}$$

### 1.2 Voigt 等应变模型

不同于 Reuss 模型，Voigt 通过假设由单晶体组成的多晶体材料应变均匀相等<sup>[21]</sup>，近似得到多晶体材料的等效弹性模量  $\bar{E}_V$  以及等效泊松比  $\bar{\nu}_V$ ，即

$$\bar{E}_V = \frac{(C_{11} + 2C_{12})(C_{11} - C_{12} + 3C_{44})}{2C_{11} + 3C_{12} + C_{44}} \quad (6)$$

$$\bar{\nu}_V = \frac{C_{11} + 4C_{12} - 2C_{44}}{4C_{11} + 6C_{12} + 2C_{44}}$$

上式中， $C_{ij}$  ( $i, j=1, 2, 3, \dots, 6$ ) 表示 bcc 结构的单晶体弹性刚度系数，与弹性柔度系数  $S_{ij}$  满足  $C_{ij}^{-1} = S_{ij}$ ；同理，对于 hcp 结构的单晶体组成的多晶体材料， $\bar{E}_V$ 、 $\bar{\nu}_V$  分别为

$$\bar{E}_V = \frac{(2C_{11} + 2C_{12} + 4C_{13} + C_{33})(7C_{11} - 5C_{12} - 4C_{13} + 2C_{33} + 12C_{44})}{27C_{11} + 15C_{12} + 36C_{13} + 12C_{33} + 12C_{44}}$$

$$\bar{\nu}_V = \frac{C_{11} + 5C_{12} + 8C_{13} + C_{33} - 4C_{44}}{9C_{11} + 5C_{12} + 12C_{13} + 4C_{33} + 4C_{44}} \quad (7)$$

进一步，可根据公式 (2) 得到单晶体构成的多晶体材料等效体积模量以及剪切模量。一方面，由 Reuss 模型以及 Voigt 模型计算得到的材料弹性性质参数，仅适用于由均质组分构成的多晶体材料，而对于不同材料组成的复合材料，如双相钛合金，其组分材料为 hcp 结构的  $\alpha$ -Ti 以及 bcc 结构的  $\beta$ -Ti，通常用 Reuss 模型以及 Voigt 模型预测值作为复合材料等效弹性性质的数值边界；另一方面，异种材料复合，其整体材料的等效弹性行为，势必会因异质结构而产生相互作用。因此，考虑晶体之间相互作用的模型得到广泛应用，如 Kröner 模型以及 Mori-Tanaka 模型等。

### 1.3 Kröner 模型

当多晶体受载时，假设其平均应力、应变场量分别为  $\bar{\sigma}$ 、 $\bar{\epsilon}$ ，则多晶体整体的本构关系可以用公式 (3) 描述，分布在多晶材料中的某一单晶体  $i$ ，由于受到相邻晶体之间的相互作用<sup>[22]</sup>，定义该单晶体的应力响应为

$$\bar{\sigma}_i = (C_i + \Gamma_i) \cdot \bar{\epsilon} \quad (8)$$

其中， $\bar{\sigma}_i$ 、 $C_i$  为某一单晶体  $i$  的应力以及弹性刚度系数， $\Gamma_i$  表示单晶体之间的相互作用因子。基于此，Kröner 进一步推导了 bcc 单晶体组成的多晶体材料等效体积模量  $\bar{K}_k$  以及等效剪切模量  $\bar{G}_k$

$$\bar{K}_k = \frac{1}{3} \left( \frac{1}{S_{11} + 2S_{12}} \right) = \bar{K}_R = \bar{K}_V \quad (9)$$

$$\bar{G}_k = \bar{G}_V \left( 1 - \frac{12}{125} \cdot \frac{ax^2}{1 - \frac{2}{25}ax - \frac{24}{625}a^2x^2} \right)$$

上式中， $S_{11}$ 、 $S_{12}$  均为单晶体材料弹性柔度系数， $\bar{K}_R$ 、 $\bar{K}_V$  分别是 Reuss 模型以及 Voigt 模型预测的多晶体材料等效体积模量； $\bar{G}_V$  是 Voigt 模型预测的多晶体材料等效剪切模量；参数  $x = \frac{5S_{11} - S_{12} - 2S_{66}}{3S_{11} - 3S_{12} + 4S_{66}}$ ，

$a = \frac{3\bar{K}_V + 6\bar{G}_V}{3\bar{K}_V + 4\bar{G}_V}$ ；进一步，根据公式 (2) 可计算得到

等效弹性模量以及等效泊松比。而由 hcp 结构的单晶体组成的多晶体材料等效弹性性质可根据 Voigt 模型预测的多晶体等效体积模量  $\bar{K}_V$  以及等效剪切模量  $\bar{G}_V$  代入公式 (9) 求解，此处不再赘述。

值得注意的是，尽管 Kröner 模型充分考虑了单晶体之间的相互作用，但本质上与等应力 Reuss 模型以及等应变 Voigt 模型一致，仅适用于均质材料组成的单一结构。而对于异种材料组成的复合材料，基于异种材料相互作用的 Mori-Tanaka 方法 (M-T 方法) 在预测复合材料弹性性质方面应用更广。

### 1.4 Mori-Tanaka 模型

对于异种材料组成的复合材料，其组分材料弹性性质各异，当载荷应力作用于复合材料整体时，增强相材料的弹性应力场可根据 Eshelby 等效夹杂理论数值求解<sup>[22]</sup>，并进一步，推导出复合材料等效体积模量  $\bar{K}$  以及等效剪切模量  $\bar{G}$

$$\frac{\bar{K}}{K_0} = 1 + \frac{f_1(K_1 - K_0)}{K_0 + \alpha(1 - f_1)(K_1 - K_0)} \quad (10)$$

$$\frac{\bar{G}}{G_0} = 1 + \frac{f_1(G_1 - G_0)}{G_0 + \beta(1 - f_1)(G_1 - G_0)}$$

上式中， $K_1$ 、 $K_0$  分别表示增强相以及基体相体积模量； $G_1$ 、 $G_0$  分别表示增强相以及基体相剪切模量； $f_1$  为增强相体积分数；参数  $\alpha = \frac{1 + \bar{\nu}}{3 - 3\bar{\nu}}$ ， $\beta = \frac{8 - 10\bar{\nu}}{15 - 15\bar{\nu}}$ ，其中  $\bar{\nu}$

表示复合材料等效泊松比，复合材料等效弹性模量  $\bar{E}$  可根据公式 (2) 进一步计算。

虽然在模拟复合材料等效弹性变形时，M-T 方法求解含不同几何形貌的增强相复合材料弹性性质具有独特的优势，但 Eshelby 等效夹杂理论以及 M-T 方法均忽略了晶体之间的相互作用，尤其是 M-T 方法对增强相体积分数敏感，限制了其进一步应用。基于此，本模型在 Eshelby 等效夹杂理论以及 M-T 方法的基础上，进一步考虑晶体之间的相互作用。

首先，在整体受载荷应力时，组分材料应力-应变关系可用基于 Eshelby 等效夹杂理论进一步表示为

$$\bar{C}(\bar{\varepsilon} + \varepsilon - \varepsilon_*) = C_1(\bar{\varepsilon} + \varepsilon) \quad (11)$$

式中， $\bar{C} = \{C_0 - (C_0 - C_1)[S_E - f_1(S_E - I)]\}^{-1} [C_0 - (1 - f_1)(C_0 - C_1) \cdot S_E] \cdot S_0 \cdot \bar{\sigma}$  表示由 M-T 方法推导的材料整体弹性刚度系数，其中  $C_0$ 、 $C_1$  分别表示基体相与增强相的弹性刚度系数， $S_E$  为 Eshelby 等效夹杂因子，与增强相的几何形貌有关， $f_1$  表示增强相的体积分数， $S_0$  为基体相的弹性柔度系数，与  $C_0$  满足  $C_0^{-1} = S_0$ ； $\bar{\varepsilon}$ 、 $\bar{\sigma}$  分别表示材料整体平均应力与应变， $\varepsilon$  为组分材料弹性互异而产生的附加应变， $\varepsilon_*$  表示因含有增强相而产生的本征应变或者固有应变，与附加应变满足  $\varepsilon = S_E \cdot \varepsilon_*$ 。

其次，当材料整体承受载荷  $\bar{\sigma}$  时，组分材料应力响应满足

$$\bar{\sigma}_1 = B_1 \cdot \bar{\sigma}, \bar{\sigma}_0 = B_0 \cdot \bar{\sigma} \quad (12)$$

式中， $B_1$ 、 $B_0$  分别表示应力分布因子，与材料弹性性质有关，即  $B_i = \left( \frac{K_i}{(K_i - \bar{K})\alpha + \bar{K}}, \frac{G_i}{(G_i - \bar{G})\beta + \bar{G}} \right)$ ，其中  $K_i$ 、

$G_i$  分别表示组分材料的体积模量以及剪切模量 ( $i=0$  表示一相， $i=1$  表示另一相)； $\bar{K}$ 、 $\bar{G}$  分别表示材料整体的等效体积模量以及剪切模量，参数  $\alpha$ 、 $\beta$  如公式

(10) 所示。

将  $\varepsilon = S_E \cdot \varepsilon_*$  代入公式 (11) 转换得到

$$(\bar{C} - C_1) \cdot \bar{\varepsilon} = (C_1 - \bar{C} + \bar{C} \cdot S_E^{-1}) \cdot \varepsilon \quad (13)$$

将公式 (3) 代入公式 (13) 左边，并联立公式 (12) 可得变形公式：

$$\varepsilon = T \cdot \bar{\sigma}_1 \quad (14)$$

其中  $T = (C_1 - \bar{C} + \bar{C} \cdot S_E^{-1})^{-1} \cdot (I - C_1 \cdot \bar{S}) \cdot B_1^{-1}$ ，参数  $\bar{S}$  为材料整体的弹性柔度系数，与  $\bar{C}$  满足  $\bar{C}^{-1} = \bar{S}$ 。定义参数  $T$  为材料整体的弹性柔度相互作用因子。

最后，由公式 (11) 可知，增强相应变  $\varepsilon_1 = \bar{\varepsilon} + \varepsilon$ ，联立公式 (14) 可得

$$\varepsilon_1 = \bar{\varepsilon} + \varepsilon = (\bar{S} + T) \cdot \bar{\sigma} \quad (15)$$

如前所述，材料等效弹性响应指的是材料应力与应变之间的响应关系在整个三维空间中的宏观呈现，而式 (15) 为组分材料应力与应变之间的关系。因此，对式 (15) 沿整个三维空间体积平均，即可得到材料整体的弹性应力与应变关系，即：

$$\bar{\varepsilon}_1 = \frac{\int_0^{2\pi} \varepsilon_1 d\theta}{\int_0^{2\pi} d\theta} \quad (16)$$

对比公式 (8)，参数  $T$  一方面表征含异种材料时因组分材料弹性互异而产生的相互作用，另一方面也代表了复合材料整体的平均应变与应力之间的响应关系。因此，在材料整体受载荷时，考虑异种材料之间变形相互作用的多尺度弹性响应本构模型证毕。下面将结合文献报道的实验值，以双相钛合金为例，证明该模型的准确性和可靠性，并结合具体算例，给出式 (16) 的具体数值形式。

## 2 理论计算实例

### 2.1 $\alpha$ -Ti 合金弹性性质

hcp 结构的  $\alpha$ -Ti 钛合金，晶格常数为  $a=0.295$  nm， $c=0.468$  nm<sup>[25]</sup>，其弹性刚度有 5 个非零且相互独立的常数，即  $C_{11}$ 、 $C_{12}$ 、 $C_{13}$ 、 $C_{33}$ 、 $C_{44}$ 。根据  $C_{ij}^{-1} = S_{ij}$ ，计算得到的  $\alpha$ -Ti 弹性柔度系数与实验测量值十分接近，如表 1 所示<sup>[26-27]</sup>。

进一步，根据公式 (14)、(15) 预测单相  $\alpha$ -Ti 钛合金等效弹性性质，需精确求解弹性柔度相互作用因子  $T$  以及  $\alpha$ -Ti 钛合金等效弹性刚度系数  $\bar{C}$ 。根据模型假设，此时  $\alpha$ -Ti 钛合金微观组织可认为是由 hcp 结构的单晶体组成的单相多晶体材料，根据公式 (11)  $\bar{C}$  等于 hcp 结构的单晶体弹性刚度系数，于是单相  $\alpha$ -Ti 钛合金等效弹性性质可通过求解含未知数  $x$ 、 $y$  的方程数值求解：

表 1  $\alpha$ -Ti 以及  $\beta$ -Ti 合金的弹性常数

Table 1 Elastic constants of  $\alpha$ -Ti and  $\beta$ -Ti alloys

Phase	Elastic stiffness/GPa					Elastic compliance/ $\times 10^{-4}$ GPa					Ref.
	$C_{11}$	$C_{12}$	$C_{13}$	$C_{33}$	$C_{44}$	$S_{11}$	$S_{12}$	$S_{13}$	$S_{33}$	$S_{44}$	
$\alpha$ -Ti <sup>[26]</sup>	153.97	85.98	67.16	183.00	46.27	100.0	-47.0	-19.0	69.0	216	Cal.
$\beta$ -Ti <sup>[27]</sup>	134.0	110.0	110.0	110.0	55.0	99.8	-47.1	-19.3	69.0	214	Exp. <sup>[26]</sup>
						287	-129	-129	287	182	Cal.

$$\begin{cases} f(x, y) = 0 \\ g(x, y) = 0 \end{cases} \quad (17)$$

其中,  $f(x, y) = (x^2 + b_4x + b_5)[2(42y + b_1)x - (3b_1 - 10b_2)y - 36y^2] - 4y(6x + b_2)(x + y)(2x + b_4)$ ,  $g(x, y) = 4(18y + b_1)x^2 - 2[24y^2 + 3(b_1 - 2b_2)y - b_3]x - y(8b_2y + 3b_3)$ , 常数  $b_1 = 2(C_{11} + 2C_{12}) + C_{33}$ ,  $b_2 = C_{11} + 2C_{12} + 2C_{33} - 4C_{13}$ ,  $b_3 = 3[(C_{11} + C_{12})C_{33} - 2C_{13}^2]$ ,  $b_4 = C_{44} + \frac{C_{11} - C_{12}}{2}$ ,  $b_5 = C_{44} \frac{C_{11} - C_{12}}{2}$ 。

最终, 单相  $\alpha$ -Ti 钛合金等效弹性模量  $\bar{E} = \frac{9ax}{3a + x}$ ,

等效泊松比  $\bar{\nu} = \frac{3a - 2x}{6a + 2x}$ , 进一步根据公式 (2) 可求得

等效体积模量  $\bar{K}$  以及等效剪切模量  $\bar{G}$  如表 2 所示。

由表 2 可知, 考虑晶体相互作用的 Kröner 模型以及多尺度本构模型预测值均介于 Reuss-Voigt 预测值之间, 表明了该理论上的可行性; 另一方面, Reuss 模型预测的单相  $\alpha$ -Ti 钛合金  $\bar{E}$  与实验值较吻合, Voigt 模型预测的  $\bar{K}$  值较实验值接近, 这表明了仅假设载荷应力或应变场均匀的单相多晶体模型局限性, 而通过弹性响应多尺度模型预测的单相  $\alpha$ -Ti 钛合金等效弹性性质整体上与实验测量值大致相当, 等效体积模量  $\bar{K}$ 、等效剪切模量  $\bar{G}$ 、等效弹性模量  $\bar{E}$ 、等效泊松比  $\bar{\nu}$  分别约为 103.47 GPa、42.57 GPa、112.31 GPa、0.319, 与实验值的误差分

别约为 4.2%、5.4%、2.1%、0.3%, 从而证实了该模型的准确性。

### 2.2 $\beta$ -Ti 合金弹性性质

bcc 结构的  $\beta$ -Ti 合金, 其晶格常数为  $a=b=c=0.332 \text{ nm}^{[28]}$ , 不同于 hcp 结构拥有的 5 个非零且相互独立的弹性刚度系数,  $\beta$ -Ti 合金仅有  $C_{11}$ 、 $C_{12}$ 、 $C_{44}$ , 并根据弹性柔度  $S_{ij}$  与弹性刚度  $C_{ij}$  之间的关系, 理论计算了其弹性柔度系数, 如表 1 所示<sup>[29-30]</sup>。

根据多尺度弹性本构模型, 此时  $\beta$ -Ti 合金是由 bcc 结构的单晶体组成的单相多晶体材料, 因此根据公式

(11) 单相  $\beta$ -Ti 合金整体的等效弹性刚度系数  $C_{ij}$  等于 bcc 结构的弹性刚度系数, 而弹性柔度相互作用因子  $T$  可进一步由公式(14)求得。最终, 根据公式(15)、

(16), 单相  $\beta$ -Ti 合金等效弹性性质可通过求解含未知数  $x$  的方程数值求解:

$$8x^3 + (9a + 2b)x^2 - 3c(a + 2b)x - 3abc = 0 \quad (18)$$

其中常数  $a = \frac{C_{11} + 2C_{12}}{3}$ ,  $b = C_{11} - C_{12}$ ,  $c = C_{44}$ 。

对比实验测量值可知, Kröner 模型以及本模型预测的单相  $\beta$ -Ti 合金等效体积模量  $\bar{K}$  与 Reuss 模型以及 Voigt 模型相等, 约为 118.00 GPa, 与实验测量值 116.7 GPa 的误差约为 1.1%, 表明理论预测多晶体材料等效弹性性质时, 晶体之间的相互作用不可忽略。此外, 本模型预测的  $\bar{E}$  (83.49 GPa)、 $\bar{\nu}$  (0.382) 以

表 2  $\alpha$ -Ti 以及  $\beta$ -Ti 合金的弹性性质

Table 2 Elastic properties of  $\alpha$ -Ti and  $\beta$ -Ti alloys

Elastic property	Model for $\alpha$ -Ti alloy				Experiment	Model for $\beta$ -Ti alloy				Experiment
	Reuss	Voigt	Kröner	Current model		Reuss	Voigt	Kröner	Current model	
$\bar{K}$ /GPa	103.44	103.50	103.45	103.47	108 <sup>[29]</sup>	118.00	118.00	118.00	118.00	116.7 <sup>[30]</sup>
$\bar{G}$ /GPa	41.72	43.35	42.53	42.57	45 <sup>[29]</sup>	22.60	37.80	31.29	30.20	33.6 <sup>[30]</sup>
$\bar{E}$ /GPa	110.32	114.12	112.22	112.31	110 <sup>[29]</sup>	63.74	102.46	86.26	83.49	92.0 <sup>[30]</sup>
$\bar{\nu}$	0.322	0.316	0.319	0.319	0.32 <sup>[29]</sup>	0.410	0.355	0.378	0.382	0.368 <sup>[30]</sup>

及  $\bar{G}$  (30.20 GPa) 大小介于 Reuss 模型以及 Voigt 模型之间，从而证实了该模型的理论可行性。值得注意的是，Kröner 模型预测的  $\bar{E}$ 、 $\bar{\nu}$  以及  $\bar{G}$  与实验测量值较接近，再次验证了晶体之间的相互作用对单相  $\beta$ -Ti 合金等效弹性性质的影响至关重要。

2.3  $\alpha+\beta$  双相钛合金弹性性质

不同于单相钛合金，由具有不同含量的 hcp 结构的  $\alpha$  相以及 bcc 结构的  $\beta$  相组成的  $\alpha+\beta$  双相钛合金，其弹性性质一方面受其组分材料的弹性性质影响，另一方面，其异质结构引起的相互作用也同等重要。

如前所述，为精确求解双相钛合金等效弹性性质，其等效弹性刚度系数  $\bar{C}$  以及弹性柔度相互作用因子  $T$  至关重要。因此，首先根据公式 (11)，构建  $\alpha+\beta$  双相钛合金  $\bar{C}$  如图 1 所示。

由图 1 可知，含 7 个非零且相互独立的双相钛合金等效弹性刚度系数分别对应不同的堆积直方图色块，这表明随  $\beta$  相含量的增加变化趋势不同。其中， $C_{11}$ 、 $C_{33}$  均随  $\beta$  相的增加而降低，其他则与之相反。

进一步，基于本模型建立的多尺度弹性本构模型，根据公式 (15)、(16)，推演得到双相钛合金等效弹性性质的数值形式：

$$\begin{cases} F(x, \mu) = 0 \\ G(x, \mu) = 0 \end{cases} \quad (19)$$

上式中， $F(x, \mu) = |A|$ ， $G(x, \mu) = 2|B| + 18\mu|C| + 18\mu|D| + 18\mu|E| - \mu|F| - |G| - \mu|H|$ ，其中  $|A| \sim |H|$  分别为未知数  $x, \mu$  与等效弹性刚度系数  $\bar{C}$  组成的矩阵行列式如下：

$$\begin{vmatrix} 3(2x-3\mu)\bar{c}_{11} + 8(x^2 - \mu^2) & \bar{c}_{12} - \bar{c}_{11} - 2x & \bar{c}_{13} - \bar{c}_{11} - 2x & \bar{c}_{14} & \bar{c}_{15} & \bar{c}_{16} \\ 3(2x-3\mu)\bar{c}_{21} - 2(2x-\mu)(x-4\mu) & \bar{c}_{22} - \bar{c}_{21} + 2x & \bar{c}_{23} - \bar{c}_{21} & \bar{c}_{24} & \bar{c}_{25} & \bar{c}_{26} \\ 3(2x-3\mu)\bar{c}_{31} - 2(2x-\mu)(x-4\mu) & \bar{c}_{32} - \bar{c}_{31} & \bar{c}_{33} - \bar{c}_{31} + 2x & \bar{c}_{34} & \bar{c}_{35} & \bar{c}_{36} \\ 3(2x-3\mu)\bar{c}_{41} & \bar{c}_{42} - \bar{c}_{41} & \bar{c}_{43} - \bar{c}_{41} & \bar{c}_{44} + x & \bar{c}_{45} & \bar{c}_{46} \\ 3(2x-3\mu)\bar{c}_{51} & \bar{c}_{52} - \bar{c}_{51} & \bar{c}_{53} - \bar{c}_{51} & \bar{c}_{54} & \bar{c}_{55} + x & \bar{c}_{56} \\ 3(2x-3\mu)\bar{c}_{61} & \bar{c}_{62} - \bar{c}_{61} & \bar{c}_{63} - \bar{c}_{61} & \bar{c}_{64} & \bar{c}_{65} & \bar{c}_{66} + x \end{vmatrix} = A$$

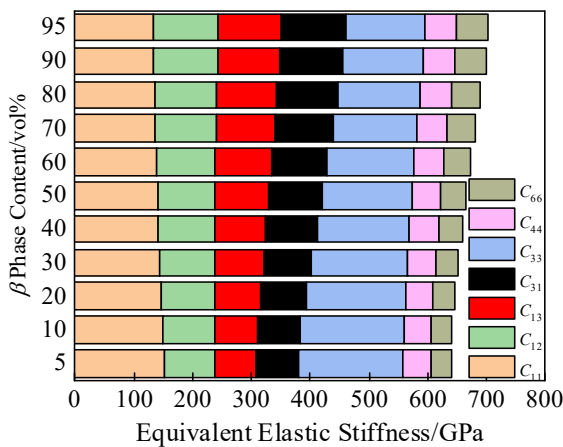


图 1 双相钛合金的等效弹性刚度

Fig.1 Equivalent elastic stiffness of dual-phase titanium alloy

$$\begin{vmatrix} 3\bar{c}_{11} + 4(x + \mu) & 3\bar{c}_{12} + 2(2\mu - x) & 3\bar{c}_{13} + 2(2\mu - x) & \bar{c}_{14} & \bar{c}_{15} & \bar{c}_{16} \\ 3\bar{c}_{21} + 2(2\mu - x) & 3\bar{c}_{22} + 4(\mu + x) & 3\bar{c}_{23} + 2(2\mu - x) & \bar{c}_{24} & \bar{c}_{25} & \bar{c}_{26} \\ 3\bar{c}_{31} + 2(2\mu - x) & 3\bar{c}_{32} + 2(2\mu - x) & 3\bar{c}_{33} + 4(\mu + x) & \bar{c}_{34} & \bar{c}_{35} & \bar{c}_{36} \\ 3\bar{c}_{41} & 3\bar{c}_{42} & 3\bar{c}_{43} & \bar{c}_{44} + x & \bar{c}_{45} & \bar{c}_{46} \\ 3\bar{c}_{51} & 3\bar{c}_{52} & 3\bar{c}_{53} & \bar{c}_{54} & \bar{c}_{55} + x & \bar{c}_{56} \\ 3\bar{c}_{61} & 3\bar{c}_{62} & 3\bar{c}_{63} & \bar{c}_{64} & \bar{c}_{65} & \bar{c}_{66} + x \end{vmatrix} = B \quad (21)$$

$$\begin{vmatrix} \bar{c}_{12} - \bar{c}_{11} - 2x & 3\bar{c}_{13} + 2(2\mu - x) & \bar{c}_{14} & \bar{c}_{15} & \bar{c}_{16} \\ \bar{c}_{22} - \bar{c}_{21} + 2x & 3\bar{c}_{23} + 2(2\mu - x) & \bar{c}_{24} & \bar{c}_{25} & \bar{c}_{26} \\ \bar{c}_{42} - \bar{c}_{41} & 3\bar{c}_{43} & \bar{c}_{44} + x & \bar{c}_{45} & \bar{c}_{46} \\ \bar{c}_{52} - \bar{c}_{51} & 3\bar{c}_{53} & \bar{c}_{54} & \bar{c}_{55} + x & \bar{c}_{56} \\ \bar{c}_{62} - \bar{c}_{61} & 3\bar{c}_{63} & \bar{c}_{64} & \bar{c}_{65} & \bar{c}_{66} + x \end{vmatrix} = C \quad (22)$$

$$\begin{vmatrix} \bar{c}_{13} - \bar{c}_{11} - 2x & 3\bar{c}_{12} + 2(2\mu - x) & \bar{c}_{14} & \bar{c}_{15} & \bar{c}_{16} \\ \bar{c}_{33} - \bar{c}_{31} + 2x & 3\bar{c}_{32} + 2(2\mu - x) & \bar{c}_{34} & \bar{c}_{35} & \bar{c}_{36} \\ \bar{c}_{43} - \bar{c}_{41} & 3\bar{c}_{42} & \bar{c}_{44} + x & \bar{c}_{45} & \bar{c}_{46} \\ \bar{c}_{53} - \bar{c}_{51} & 3\bar{c}_{52} & \bar{c}_{54} & \bar{c}_{55} + x & \bar{c}_{56} \\ \bar{c}_{63} - \bar{c}_{61} & 3\bar{c}_{62} & \bar{c}_{64} & \bar{c}_{65} & \bar{c}_{66} + x \end{vmatrix} = D \quad (23)$$

$$\begin{vmatrix} 3\bar{c}_{21} + 2(2\mu - x) & \bar{c}_{22} - \bar{c}_{23} + 2x & \bar{c}_{24} & \bar{c}_{25} & \bar{c}_{26} \\ 3\bar{c}_{31} + 2(2\mu - x) & \bar{c}_{32} - \bar{c}_{33} + 2x & \bar{c}_{34} & \bar{c}_{35} & \bar{c}_{36} \\ 3\bar{c}_{41} & \bar{c}_{42} - \bar{c}_{43} & \bar{c}_{44} + x & \bar{c}_{45} & \bar{c}_{46} \\ 3\bar{c}_{51} & \bar{c}_{52} - \bar{c}_{53} & \bar{c}_{54} & \bar{c}_{55} + x & \bar{c}_{56} \\ 3\bar{c}_{61} & \bar{c}_{62} - \bar{c}_{63} & \bar{c}_{64} & \bar{c}_{65} & \bar{c}_{66} + x \end{vmatrix} = E \quad (24)$$

$$\begin{vmatrix} 3\bar{c}_{11} + 4(x + \mu) & 3\bar{c}_{12} + 2(2\mu - x) & 3\bar{c}_{13} + 2(2\mu - x) & \bar{c}_{15} & \bar{c}_{16} \\ 3\bar{c}_{21} + 2(2\mu - x) & 3\bar{c}_{22} + 4(\mu + x) & 3\bar{c}_{23} + 2(2\mu - x) & \bar{c}_{25} & \bar{c}_{26} \\ 3\bar{c}_{31} + 2(2\mu - x) & 3\bar{c}_{32} + 2(2\mu - x) & 3\bar{c}_{33} + 4(\mu + x) & \bar{c}_{35} & \bar{c}_{36} \\ 3\bar{c}_{51} & 3\bar{c}_{52} & 3\bar{c}_{53} & \bar{c}_{55} + x & \bar{c}_{56} \\ 3\bar{c}_{61} & 3\bar{c}_{62} & 3\bar{c}_{63} & \bar{c}_{65} & \bar{c}_{66} + x \end{vmatrix} = F \quad (25)$$

$$\begin{vmatrix} 3\bar{c}_{11} + 4(x + \mu) & 3\bar{c}_{12} + 2(2\mu - x) & 3\bar{c}_{13} + 2(2\mu - x) & \bar{c}_{14} & \bar{c}_{16} \\ 3\bar{c}_{21} + 2(2\mu - x) & 3\bar{c}_{22} + 4(\mu + x) & 3\bar{c}_{23} + 2(2\mu - x) & \bar{c}_{25} & \bar{c}_{26} \\ 3\bar{c}_{31} + 2(2\mu - x) & 3\bar{c}_{32} + 2(2\mu - x) & 3\bar{c}_{33} + 4(\mu + x) & \bar{c}_{34} & \bar{c}_{36} \\ 3\bar{c}_{41} & 3\bar{c}_{42} & 3\bar{c}_{43} & \bar{c}_{44} + x & \bar{c}_{46} \\ 3\bar{c}_{61} & 3\bar{c}_{62} & 3\bar{c}_{63} & \bar{c}_{64} & \bar{c}_{66} + x \end{vmatrix} = G \quad (26)$$

$$\begin{vmatrix} 3\bar{c}_{11} + 4(x + \mu) & 3\bar{c}_{12} + 2(2\mu - x) & 3\bar{c}_{13} + 2(2\mu - x) & \bar{c}_{14} & \bar{c}_{15} \\ 3\bar{c}_{21} + 2(2\mu - x) & 3\bar{c}_{22} + 4(\mu + x) & 3\bar{c}_{23} + 2(2\mu - x) & \bar{c}_{24} & \bar{c}_{25} \\ 3\bar{c}_{31} + 2(2\mu - x) & 3\bar{c}_{32} + 2(2\mu - x) & 3\bar{c}_{33} + 4(\mu + x) & \bar{c}_{34} & \bar{c}_{35} \\ 3\bar{c}_{41} & 3\bar{c}_{42} & 3\bar{c}_{43} & \bar{c}_{44} + x & \bar{c}_{45} \\ 3\bar{c}_{51} & 3\bar{c}_{52} & 3\bar{c}_{53} & \bar{c}_{54} & \bar{c}_{55} + x \end{vmatrix} = H \quad (27)$$

由此可见，公式 (19) 是关于  $x, \mu$  的高阶方程，考虑到双相钛合金等效弹性刚度系数的构建基于 M-T 方法，因此本模型中进一步以 M-T 方法求解的等效体

积模量  $\bar{K}$  以及等效剪切模量  $\bar{G}$  为初始值，即

$$\bar{K} = \frac{4\mu(2\mu - 3x)}{3(2x - 3\mu)}, \bar{G} = \frac{7\mu - 8x}{5(\mu - x)} \quad (28)$$

联立式 (19)、(28) 迭代求解未知数  $x, \mu$ ，并最终根据公式 (2) 求解得到不同  $\beta$  相含量的双相钛合金等效弹性性质参数，结果如图 2 所示。

由图 2a 可知，M-T 模型预测的双相钛合金等效体积模量  $\bar{K}$  随  $\beta$  相的增加近似从 117.2 GPa 逐渐降至 104.1 GPa，等效剪切模量  $\bar{G}$  近似从 30.7 GPa 增加到 41.9 GPa；对比本模型的预测值可知，基于多尺度本构模型预测的双相钛合金  $\bar{K}$  以及  $\bar{G}$  随  $\beta$  相含量的变化趋势与 M-T 模型相反，其中， $\bar{K}$  近似从 104.2 GPa 增

加至 117.2 GPa,  $\bar{G}$  近似从 42.0 GPa 逐渐降至 31.8 GPa。一方面, 由表 2 可知, 双相钛合金中  $\beta$  相  $\bar{K}$  预测值或实验值均大于  $\alpha$  相, 而  $\bar{G}$  与之相反。因此理论上, 随着  $\beta$  相的增加, 双相钛合金的等效体积模量  $\bar{K}$  理应逐渐增大, 但略低于  $\beta$  相的理论预测值如表 2 所示, 同理, 等效剪切模量  $\bar{G}$  应逐渐降低, 但略高于  $\beta$  相的理论预测值。可见, 基于多尺度等效弹性响应预测值更为准确; 另一方面, 随  $\beta$  相体积分数的增加, M-T 方法与本模型预测的双相钛合金  $\bar{K}$ 、 $\bar{G}$  之间的差异先逐渐缩小而后逐渐增大, 表明 M-T 方法预测材料等效弹性性质对增强相体积分数敏感, 这与文献报道的情况较一致。

由图 2b 可知, M-T 方法预测的双相钛合金等效弹性模量  $\bar{E}$  随  $\beta$  相的增加近似从 84.7 GPa 逐渐增至 110.7 GPa, 本模型预测值趋势与之相反,  $\bar{E}$  近似从 111.1 GPa 逐渐降至 87.5 GPa, 且 2 种模型预测的  $\bar{E}$  差值先减小而后逐渐增大, 这可能是因为一方面, M-T 方法预测材料等效弹性性质时对体积分数敏感

如图 2a 所示, 含高体分的双相钛合金等效弹性性质预测值差异较大; 另一方面, 由表 2 可知,  $\alpha$  相的弹性模量预测值或测量值均大于  $\beta$  相, 因此理论上,  $\alpha+\beta$  双相钛合金的  $\bar{E}$  随  $\beta$  相的增加而逐渐降低。同理, 本模型预测的双相钛合金  $\bar{\nu}$  受  $\beta$  增强相的影响较大且随  $\beta$  相的增加而逐渐增大, 由 0.322 增至 0.376。

### 3 讨论

基于多尺度弹性响应本构模型预测的单相多晶体材料等效弹性性质与实验测量值较吻合如表 2 所示。如公式 (11)、(14)、(16) 所示, 由单晶体组成的多晶体材料等效弹性性质与其组分材料的弹性性质密切相关<sup>[6]</sup>, 如不同 V 原子浓度 (29.4 at%, 38.5 at%, 53.0 at%) 的 Ti-V 合金 ( $\beta$ -Ti), 其弹性刚度系数  $C_{11}$  从 140.02 GPa 增加到 167.6 GPa,  $C_{12}$  从 99.5 GPa 逐渐增加到 105.1 GPa,  $C_{44}$  逐渐从 39.7 GPa 增加到 41.3 GPa, 导致本模型预测 Ti-V 合金等效弹性模量  $\bar{E}$  近似从 83.6 GPa 逐渐增至 100.9 GPa, 与实验测量值 (83.4, 90.9, 100.9 GPa<sup>[6]</sup>) 十分吻合, 等效体积模量  $\bar{K}$  近似从 113.1 GPa 逐渐增至 125.9 GPa, 等效剪切模量  $\bar{G}$  近似从 30.3 GPa 逐渐增至 36.9 GPa, 等效泊松比  $\bar{\nu}$  近似从 0.377 逐渐降至 0.366。进一步, 基于多尺度弹性响应本构模型预测的钛合金等效弹性性质如表 3 所示。

由表 3 可知, 一方面, 同类型的钛合金, 添加不同合金元素可形成不同的组织结构而影响组分材料的弹性刚度, 并最终影响钛合金等效弹性性质, 如 Ti-17<sup>[31-32]</sup>、Ti-LCB<sup>[33]</sup>、Ti17/Ti5553<sup>[34]</sup>、 $\beta$ -钛合金<sup>[26,29,35-36]</sup>、Ti-6242<sup>[37]</sup>、Ti-1023<sup>[38]</sup>等; 另一方面, 由公式 (10)、(11) 可知, 组分材料弹性性质改变时, 钛合金等效弹性性质也随之改变, 如 Ti-10V-4.5Fe-1.5Al<sup>[39]</sup>、Ti-6Al-4V<sup>[40]</sup>等。

由于  $\alpha$  相的弹性模量大于  $\beta$  相, 模型预测的双相钛合金  $\bar{E}$  随着  $\alpha$  相含量的减少而逐渐降低如表 3 所示; 同理,  $\beta$  相的体积模量大于  $\alpha$  相, 模型预测的双相钛合金  $\bar{K}$  随着  $\beta$  相含量的增加而逐渐增大; 而双相钛合金  $\bar{G}$  以及  $\bar{\nu}$  根据公式 (2) 对应变化。含少量  $\beta$  相的 Ti-811 (Ti-8Al-1Mo-1V) 合金, 实验测量值  $\bar{E}$  为 120 GPa,  $\bar{G}$  为 46 GPa<sup>[41]</sup>, 与图 2 所示的本模型预测值大致相当;  $\alpha$  相含量为 5%~85% 的 Ti-3Al-2.5V (ASTM Grade 9)<sup>[41]</sup>,  $\bar{E}$  实验测量值为 95~105 GPa,  $\bar{G}$  实验测量值为 43~45 GPa,  $\bar{\nu}$  约为 0.300, 与图 2 所示本模型预测值较一致, 从而证实了该模型的准确性。

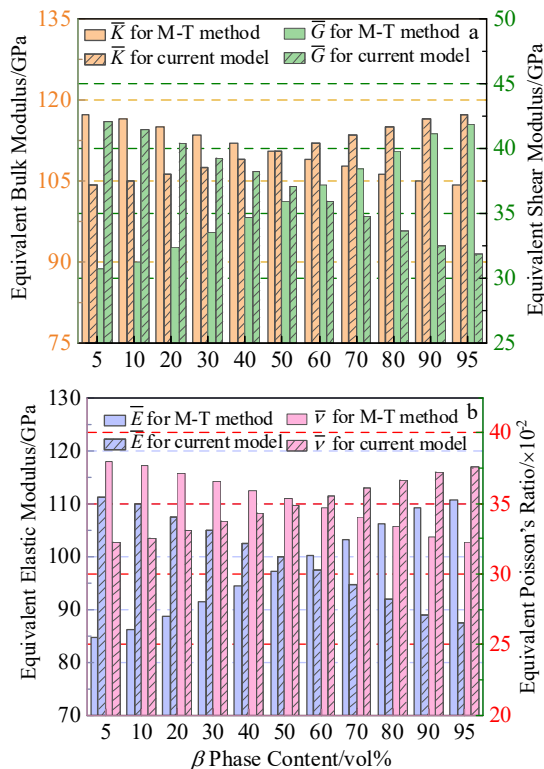


图 2 双相钛合金的等效体积模量  $\bar{K}$ 、等效剪切模量  $\bar{G}$ 、等效弹性模量  $\bar{E}$  以及等效泊松比  $\bar{\nu}$

Fig.2 Equivalent elastic properties of dual-phase titanium alloy: (a) equivalent bulk modulus  $\bar{K}$  and equivalent shear modulus  $\bar{G}$ ; (b) equivalent elastic modulus  $\bar{E}$  and equivalent Poisson's ratio  $\bar{\nu}$

表3 不同钛合金的弹性性质

Table 3 Elastic properties of different titanium alloys

Ti-based alloy	Single crystal constant/GPa			Equivalent elastic modulus, $\bar{E}$ /GPa		
	$C_{11}$	$C_{12}$	$C_{44}$	Experiment	Current model	
Ti-17 <sup>[31]</sup>	174	116	41	98.6	98.4	
Ti-17 <sup>[32]</sup>	167	115	44	98.4	98.1	
Ti-LCB <sup>[33]</sup>	138	102.2	42.5	83.8	82.9	
Ti17/Ti5553 <sup>[34]</sup>	100	70	36	69.4	68.8	
Pure $\beta$ -Ti <sup>[26]</sup>	134	110	36	66.6	65.3	
Pure $\beta$ -Ti <sup>[29]</sup>	134	110	55	92.0	83.5	
Pure $\beta$ -Ti <sup>[35]</sup>	99	85	33.6	52.8	51.0	
Pure $\beta$ -Ti <sup>[36]</sup>	97.7	82.7	37.5	57.5	55.7	
Ti-6242 <sup>[37]</sup>	135	113	54.9	83.7	81.1	
Ti-1023 <sup>[38]</sup>	140	128	50	67.2	64.0	
$\alpha+\beta$ alloy	Constituent content/vol%		Equivalent elastic property			
	$\alpha$	$\beta$	Experiment		Current model	
			$\bar{E}$ /GPa	$\bar{\nu}$	$\bar{E}$ /GPa	$\bar{\nu}$
Ti-10V-4.5Fe-1.5Al <sup>[39]</sup>	52	48	113	0.335	97.8	0.352
	26	74	100	0.350	90.4	0.367
	9	91	87.5	0.360	85.8	0.377
Ti-6Al-4V <sup>[40]</sup>	93.3	6.6	115.7	0.321	110.2	0.324
	74	26	111.5	0.326	104.3	0.337

## 4 结论

1) 材料等效弹性响应实际上是组分材料弹性响应在宏观尺度上的弹性变形, 基于多尺度弹性响应本构模型预测的材料等效弹性性质与组分材料的弹性性质密切相关。理论预测的  $\alpha$ -Ti 以及  $\beta$ -Ti 单相多晶体材料等效弹性性质, 如  $\alpha$ -Ti 等效弹性模量  $\bar{E}$ 、等效体积模量  $\bar{K}$ 、等效剪切模量  $\bar{G}$ 、等效泊松比  $\bar{\nu}$  分别约为 112.31 GPa、103.47 GPa、42.57 GPa、0.319;  $\beta$ -Ti 等效弹性模量  $\bar{E}$ 、等效体积模量  $\bar{K}$ 、等效剪切模量  $\bar{G}$ 、等效泊松比  $\bar{\nu}$  分别约为 83.49 GPa、118.00 GPa、30.20 GPa、0.382, 与实验测量值较一致, 证实了该模型的准确性。

2) 对于给定的  $\alpha+\beta$  双相钛合金, 基于本模型预测的等效弹性性质与实验测量值相当, 其中  $\beta$  相含量从 5vol% 增加到 95vol% 时, 预测值  $\bar{E}$  近似从 111.1 GPa 逐渐降至 87.5 GPa;  $\bar{K}$  近似从 104.2 GPa 增至 117.2 GPa;  $\bar{G}$  近似从 42.0 GPa 降至 31.8 GPa;  $\bar{\nu}$  近似从 0.322 增至 0.376。因此, 可通过控制双相钛合金的组成成分及微观结构实现弹性性质的定量调控。

## 参考文献 References

- [1] Donachie M. *Titanium: A Technical Guide, 2nd Ed*[M]. Ohio: ASM International, 2000: 13
- [2] Anil K V, Gupta R K, Prasad M J N V et al. *Journal of Materials Research*[J], 2021, 36(3): 689
- [3] Zhao Yongqin, Wu Cong, Wang Huan. *Rare Metal Materials and Engineering*[J], 2022, 51(12): 4389
- [4] Yuan Chenhang(袁晨航), Wang Yanjin(王艳晶), Xu Zaidong(徐再东) et al. *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2023, 52(1): 238
- [5] Fisher E S, Manghnani M H. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*[J], 1971, 32(3): 657
- [6] Katahara K W, Manghnani M H, Fisher E S. *Journal of Physics F: Metal Physics*[J], 1979, 9(5): 773
- [7] Kaiyan P M, Kumar A, Arnold W et al. *Journal of Alloys and Compounds*[J], 2016, 676: 397
- [8] Zhang Weidong, Liu Yong, Wu Hong et al. *Materials Characterization*[J], 2015, 106: 302
- [9] Roberts W T. *Journal of the Less Common Metals*[J], 1962, 4(4): 345
- [10] Khan A S, Yu S, Liu H. *International Journal of Plasticity*[J], 2012, 38: 14
- [11] Purohit R R P P R, Richeton T, Berbenni S et al. *Acta Materialia*[J], 2021, 208: 116762.
- [12] Abdolvand H, Majkut M, Oddershede J et al. *Acta Materialia*[J], 2015, 93: 246
- [13] Abdolvand H, Majkut M, Oddershede J et al. *Acta Materialia*[J], 2015, 93: 235
- [14] Cui Y, Li C, Harjo S et al. *MATEC Web of Conferences*[J], 2020, 321: 11013
- [15] Bhattacharyya J J, Nair S, Pagan C D et al. *Acta Materialia*[J], 2020, 197: 300
- [16] Martin G, Naže L, Cailletaud G. *Procedia Engineering*[J], 2011, 10: 1803
- [17] Safaa L, Stéphane B, Nathalie G et al. *International Journal of Plasticity*[J], 2018, 109: 88
- [18] Salloom R, Mantri S A, Banerjee R et al. *Scientific Reports*[J], 2021, 11(1): 12005

- [19] Chen Qiang, Zhao Fengyuan, Jia Jinhao *et al.* *Ceramics International*[J], 2022, 48(2): 2431
- [20] Reuss A. *Journal of Applied Mathematics and Mechanics*[J], 1929, 9(1): 49
- [21] Voigt W. *Annalen der Physik*[J], 1889, 274(12): 573
- [22] Kröner E. *Zeitschrift Für Physik*[J], 1958, 151(4): 504
- [23] Mori T, Tanaka K. *Acta Metallurgica*[J], 1973, 21(5): 571
- [24] Li S, Sitnikova E. *Representative Volume Elements and Unit Cells-Concepts, Theory, Applications and Implementation* [M]. Sawston: Woodhead Publishing, 2020: 67
- [25] Szkliniarz W, Grosman F. *Sixth World Conference on Titanium III*[C]. Paris: Societe Francaise de Metallurgie, 1988: 1529
- [26] Flowers J W, O'Brien K C, McEleney P C. *Journal of the Less Common Metals*[J], 1964, 7(5): 393
- [27] Petry W, Heimig A, Trampenau J *et al.* *Physical Review B*[J], 1991, 43(13): 10933
- [28] Murray J L, Wriedt H A. *Journal of Phase Equilibria*[J], 1987, 8(2): 148
- [29] Fisher E S, Renken C J. *Physical Review A*[J], 1964, 135(2): 482
- [30] Senkov O N, Dubois M, Jonas J J. *Metallurgical and Materials Transactions A*[J], 1996, 27(12): 3963
- [31] Fréour S, Gloaguen D, François M *et al.* *Journal of Applied Crystallography*[J], 2005, 38(1): 30
- [32] Fréour S, Lacoste E, François M *et al.* *Materials Science Forum*[J], 2011, 1233: 681
- [33] Nejezchlebová J, Janovská M, Seiner H *et al.* *Acta Materialia*[J], 2016, 110: 185
- [34] Martin G, Naže L, Cailletaud G. *Procedia Engineering*[J], 2011, 10: 1803
- [35] Fisher E S, Dever D. *Acta Metallurgica*[J], 1970, 18(2): 265
- [36] Ledbetter H, Ogi H, Kai S *et al.* *Journal of Applied Physics*[J], 2004, 95(9): 4642
- [37] Kim J Y, Rokhlin S I. *The Journal of the Acoustical Society of America*[J], 2009, 126(6): 2998
- [38] Raghunathan S L, Stapleton A M, Dashwood R J *et al.* *Acta Materialia*[J], 2007, 55(20): 6861
- [39] Viswanath A, Kumar A, Jayakumar T *et al.* *Metallurgical and Materials Transactions A*[J], 2015, 46: 3393
- [40] Kalyan P A, Kumar A, Arnold W *et al.* *Journal of Alloys and Compounds*[J], 2016, 676: 397
- [41] Weiss V, Sessler J G. *Aerospace Structural Metals Handbook* [M]. New York: Syracuse University Press, 1963

## Multiscale Simulation of Elastic Properties of Titanium Alloy

Chen Wei<sup>1</sup>, Niu Lina<sup>1,2</sup>, Xue Ting<sup>1</sup>, Zhang Sufang<sup>1</sup>, Chai Min<sup>1</sup>, He Juan<sup>1</sup>, Jia Junhui<sup>2</sup>

(1. School of Life Science, Shanxi Normal University, Taiyuan 030031, China)

(2. Key Laboratory of Magnetic Molecules and Magnetic Information Material, Ministry of Education, College of Chemistry and Material Science, Shanxi Normal University, Taiyuan 030031, China)

**Abstract:** The elastic properties of titanium alloys are affected by their composition and structure. Based on the constitutive model of multiscale elastic response, taking  $\alpha+\beta$  titanium alloy as an example, the equivalent elastic response of  $\alpha+\beta$  titanium alloy under load was theoretically predicted and the equivalent elastic properties of titanium alloys with different phase contents were calculated, such as equivalent elastic modulus  $\bar{E}$ , equivalent bulk modulus  $\bar{K}$ , equivalent shear modulus  $\bar{G}$  and equivalent Poisson's ratio  $\bar{\nu}$ . The mechanism of the effect of phase content on the equivalent elastic properties of titanium alloys was also revealed. The comparison between different micromechanical models and experimental measurements shows that the  $\bar{E}$  of titanium alloy is affected by  $\alpha$  phase, which approximately decreases from 111.1 GPa to 87.5 GPa and  $\bar{K}$ ,  $\bar{G}$ , and  $\bar{\nu}$  are affected by  $\beta$  phase.  $\bar{K}$  approximately increases from 104.1 GPa to 117.2 GPa,  $\bar{K}$  approximately decreases from 42.0 GPa to 31.8 GPa, and  $\bar{\nu}$  approximately increases from 0.322 to 0.376. The accuracy of the model is confirmed by the consistence with experimental measurements.

**Key words:** titanium alloy; elastic properties; multiscale simulation

Corresponding author: Jia Junhui, Ph. D., Professor, Key Laboratory of Magnetic Molecules and Magnetic Information Material, Ministry of Education, College of Chemistry and Material Science, Shanxi Normal University, Taiyuan 030031, P. R. China, E-mail: jiajunhui@sxnu.edu.cn