

# Al 元素对 Ti-Al 合金固溶体硬度和室温拉伸性能的影响及其定量建模研究

吴欢<sup>1</sup>, 林成<sup>2</sup>, 尹桂丽<sup>3</sup>, 葛鹏<sup>4</sup>, 曾卫东<sup>5</sup>, 熊年华<sup>1</sup>

(1. 西北有色金属研究院, 陕西 西安 710016)

(2. 辽宁石油化工大学, 辽宁 抚顺 113001)

(3. 辽宁工业大学, 辽宁 锦州 121001)

(4. 西部金属材料股份有限公司, 陕西 西安 710201)

(5. 西北工业大学, 陕西 西安 710072)

**摘要:** 采用统计拟合法和合金价电子理论计算法研究了 Al 元素含量对 Ti-xAl ( $x=1, 4, 6, 8, w/\%$ ) 合金固溶体力学性能的影响。结果表明, 随着 Al 元素含量的增加, Ti-xAl 合金硬度和强度均呈现抛物线向上增加的趋势。基于合金价电子理论计算了合金价电子结构参数, 建立了 Al 元素含量对 Ti-xAl 合金硬度及抗拉强度影响的定量计算关系模型。显微硬度、抗拉强度理论计算值与实验值的误差平均值分别为 4.9631%、6.3520%, 二者吻合较好。

**关键词:** Ti-xAl 合金; 固溶体; 强度; 硬度; 统计; 定量计算

中图分类号: TG146.23

文献标识码: A

文章编号: 1009-9964(2024)06-001-06

## Research on Effect of Al Element on Hardness and Room Tensile Properties of Ti-Al Alloy Solid Solution and Quantitative Modeling

Wu Huan<sup>1</sup>, Lin Cheng<sup>2</sup>, Yin Guili<sup>3</sup>, Ge Peng<sup>4</sup>, Zeng Weidong<sup>5</sup>, Xiong Nianhua<sup>1</sup>

(1. Northwest Institute for Nonferrous Metal Research, Xi'an 710016, China)

(2. Liaoning Petrochemical University, Fushun 113001, China)

(3. Liaoning University of Technology, Jinzhou 121001, China)

(4. Western Metal Materials Co., Ltd., Xi'an 710201, China)

(5. Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China)

**Abstract:** The effect of Al element content on the mechanical properties of Ti-xAl ( $x=1, 4, 6, 8, \text{mass fraction, \%}$ ) alloy solid solutions was studied by statistical fitting method and theoretical calculation method derived from alloy valence electron theory. The results show that with the increase of Al element content, the hardness and strength of Ti-xAl alloy exhibit a trend of parabolic increase. Based on the alloy valence electron theory, the valence electron structure parameters of Ti-xAl alloy are calculated, and the quantitative model of the influence of Al element content on the hardness and tensile strength in Ti-xAl alloy is established. The average error values of micro-hardness and tensile strength are 4.9631% and 6.3520%, respectively, which are in good agreement.

**Key words:** Ti-xAl alloy; solid solution; strength; hardness; statistics; quantitative calculation

提高钛合金硬度和室温拉伸性能的方法主要有合金化法、热处理和变形加工等, 其中, 合金化是最根本的技术手段。研究合金元素对钛合金中“相的性能”的影响, 进而通过“相”之间的相关作用计算钛合金的性能, 具有十分重要的意义。

钛及钛合金力学性能的研究手段和方法主要有组织-性能相关性分析法<sup>[1-2]</sup>、数理统计拟合法<sup>[3-5]</sup>和电子

收稿日期: 2024-09-13

基金项目: 国家重点研发计划项目 (2022YFB3705604)

通信作者: 吴欢 (1976—), 女, 正高级工程师。

结构理论计算法<sup>[6-8]</sup>等。其中,组织-性能相关性分析法解决问题最直观,易于掌握;数理统计拟合法对试验数据的数量和质量要求高;电子结构理论计算法<sup>[9-10]</sup>则以量子力学第一原理作为研究基础,研究各元素原子之间的相互作用,从微观角度对材料的各项力学性能进行研究。由于电子结构理论计算法能够很好地避免人为因素的干扰,研究过程耗费少、效率高<sup>[11-12]</sup>、物理意义深刻清晰等,现已成为钛合金计算与设计方面极具潜力的发展方向。合金价电子理论<sup>[13-16]</sup>是众多计算合金电子结构的方法之一,该方法以余氏理论(EET)<sup>[13]</sup>为基础,能够给出合金相及相界面电子结构,并利用合金价电子结构参数研究合金强化机制、力学性能等<sup>[17-27]</sup>。

对钛而言,合金化可以使用的 $\alpha$ 相稳定元素通常有12个。除C、N和O是间隙元素,需要严格控制外,剩余元素中Al、Zr和Sn在钛合金中最为常见,尤其是Al元素,现有牌号的钛合金90%以上都添加了Al元素。Al元素对 $\alpha$ 相的影响研究是研究合金元素分别对钛合金 $\alpha$ 相、 $\beta$ 相和 $\alpha+\beta$ 相影响体系中的第一部分,也是最基础的部分,其他研究都将在单一Al元素影响的基础上完成。

单一含Al元素的钛合金由 $\alpha$ 相或 $\alpha'$ 相组成。由于 $\alpha'$ 相与 $\alpha$ 相的晶体结构相似,均为密排六方结构,故合金元素对其力学性能的影响也相似。通过合金价电子理论计算法计算了不同Al元素含量钛合金的硬度和强度,并与实际测试结果进行对比,以期采用模拟手段对含Al钛合金的成分设计与性能优化提供一种可借鉴的方法。

## 1 实验

从Ti-Al相图<sup>[28]</sup>上看,当Al元素含量超过8%(质量分数,下同)时,Al将与Ti发生共析反应生成 $Ti_3Al$ 等金属间化合物,导致合金的可加工性和常规力学性能变差。在非钛铝基钛合金中,Al元素添加量一般不超过6%,但在保证加工或热处理性能的前提下, $\alpha$ 相中的Al元素含量也可能达到8%<sup>[29]</sup>。为此,选取Ti-xAl( $x=1、4、6、8, w/\%$ )合金固溶体进行研究。

原材料选用0级海绵钛和纯铝豆。采用真空自耗电弧炉熔炼3次后得到10 kg的Ti-xAl合金铸锭。从Ti-xAl合金铸锭上取样,进行Al、O、H含量检测,结果见表1。

在不同温度下对Ti-xAl合金铸锭进行三镦三拔锻造,累积变形量超过97%,最终得到70 mm×30 mm×L

表1 Ti-xAl合金铸锭化学成分(w/%)

| Alloy  | Position | Al   | O     | H      |
|--------|----------|------|-------|--------|
| Ti     | Top      | —    | 0.085 | 0.0020 |
|        | Bottom   | —    | 0.088 | 0.0023 |
| Ti-1Al | Top      | 0.98 | 0.083 | 0.0020 |
|        | Bottom   | 1.02 | 0.090 | 0.0023 |
| Ti-4Al | Top      | 4.15 | 0.083 | 0.0020 |
|        | Bottom   | 4.07 | 0.090 | 0.0023 |
| Ti-6Al | Top      | 6.20 | 0.083 | 0.0020 |
|        | Bottom   | 5.93 | 0.090 | 0.0023 |
| Ti-8Al | Top      | 8.01 | 0.083 | 0.0020 |
|        | Bottom   | 7.89 | 0.090 | 0.0023 |

的方坯。从Ti-xAl合金方坯上切取金相试样和室温拉伸试样。选用MVS-1000 JMT2维氏硬度仪测试晶内显微硬度,测试标准为GB/T 4340.1—2024,测试6个点取平均值作为测量结果。采用Instron 1185万能材料试验机按照GB/T 228.1—2021测试合金室温拉伸性能,试样为R7试样,工作区直径5 mm,拉伸第一速率0.00025/s,第二速率0.002/s。采用PW1700型X射线衍射仪(XRD)测试晶格常数。

## 2 结果与分析

### 2.1 数据拟合

#### 2.1.1 硬度

Ti-xAl合金的晶内显微硬度测试结果如表2所示。为了便于对比,将与Ti-xAl合金O、N、C含量相当的纯钛硬度一并列入。

表2 Ti-xAl合金晶内显微硬度(HV)

| No.           | Pure titanium | Ti-1Al | Ti-4Al | Ti-6Al | Ti-8Al |
|---------------|---------------|--------|--------|--------|--------|
| 1             | 171.17        | 191.18 | 262.52 | 351.85 | 333.67 |
| 2             | 170.20        | 187.69 | 263.34 | 356.95 | 333.67 |
| 3             | 172.47        | 184.78 | 255.36 | 351.85 | 315.79 |
| 4             | 167.89        | 189.67 | 237.62 | 285.92 | 416.29 |
| 5             | 170.86        | 192.19 | 247.74 | 283.17 | 408.29 |
| 6             | 171.38        | 190.00 | 245.51 | 282.26 | 448.93 |
| Average value | 170.66        | 189.25 | 252.01 | 318.67 | 376.11 |

利用表2中的硬度平均值绘制Ti-xAl合金硬度变化趋势图,如图1所示。通过对比Origin软件中不同函数的拟合结果发现,ExpDec1函数的拟合结果最能贴近原始数据,其定量关系见式(1)。

$$HV=A_1\exp(-x/t_1)+y_0 \quad (1)$$

式中：HV代表维氏显微硬度； $x$ 为Al元素的质量分数，%； $A_1$ 、 $t_1$ 和 $y_0$ 为常数。从式(1)可以看出，Ti-xAl合金的硬度值随着Al元素含量的增加呈平缓抛物线型上升。Al元素含量达8%时，合金硬度值约为纯钛的2.2倍。表3为Ti-xAl合金晶内显微硬度拟合曲线参数。

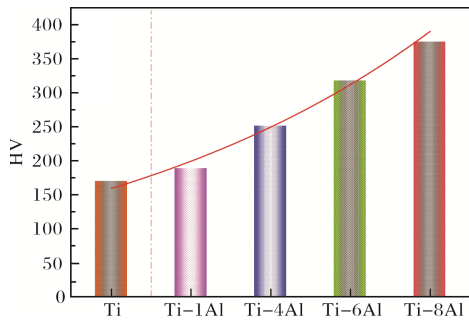


图1 Ti-xAl合金晶内显微硬度变化趋势图

Fig.1 Tendency chart of intragranular microhardness of Ti-xAl alloy

表3 Ti-xAl合金晶内显微硬度拟合曲线参数

Table 3 Fitting curve parameters of Ti-xAl alloy intragranular micro-hardness

| Parameter   | Value                       |
|-------------|-----------------------------|
| $y_0$       | $-1.205\ 61 \pm 5.923\ 74$  |
| $A_1$       | $129.047\ 11 \pm 5.166\ 18$ |
| $t_1$       | $-4.495\ 06 \pm 0.105\ 67$  |
| $R^2$ (COD) | 0.992 89                    |

### 2.1.2 室温拉伸强度

Ti-xAl合金的室温拉伸性能测试结果见表4。从表4可以看出，随着Al元素含量的增加，Ti-xAl合金的室温抗拉强度和屈服强度逐渐增加，伸长率和断面收缩率逐渐降低。由于后续模拟中只用到抗拉强度，

表4 Ti-xAl合金室温拉伸性能

Table 4 Room temperature tensile properties of Ti-xAl alloy

| Alloy  | $R_m$ /MPa | $R_{p0.2}$ /MPa | $A$ /% | $Z$ /% |
|--------|------------|-----------------|--------|--------|
| Ti     | 310        | 186             | 57.5   | 60     |
| Ti-1Al | 470        | 279             | 20.3   | 30     |
| Ti-4Al | 607.5      | 425             | 18.5   | 23     |
| Ti-6Al | 785        | 555             | 13.3   | 11     |
| Ti-8Al | 950        | 678             | 7.0    | 9      |

此处仅对抗拉强度的变化规律采用ExpDec1函数拟合并进行分析。通过拟合，得到Ti-xAl合金中Al元素含量与抗拉强度之间的相关性方程如式(2)。

$$y=A_2\exp(-x/t_2)+q_0 \quad (2)$$

式中： $y$ 代表抗拉强度的理论计算值，MPa； $x$ 为Al元素的质量分数，%； $A_2$ 、 $t_2$ 和 $q_0$ 为常数。从式(2)可以看出，随着Al元素含量增多，受多个晶粒影响的Ti-xAl合金抗拉强度的变化规律与不受晶界影响的显微硬度的变化规律基本相似，均呈抛物线型增加。Ti-xAl合金室温抗拉强度的拟合曲线参数见表5。

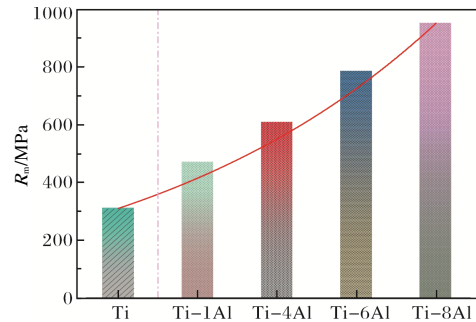


图2 Ti-xAl合金室温抗拉强度变化趋势图

Fig.2 Tendency chart of room temperature tensile strength of Ti-xAl alloy

表5 Ti-xAl合金室温抗拉强度拟合曲线参数

Table 5 Fitting curve parameters of Ti-xAl alloy room temperature tensile strength

| Parameter   | Value                         |
|-------------|-------------------------------|
| $q_0$       | $-50.430\ 18 \pm 602.268\ 65$ |
| $A_2$       | $279.206\ 48 \pm 500.057\ 82$ |
| $t_2$       | $-3.916\ 24 \pm 3.758\ 48$    |
| $R^2$ (COD) | 0.991 07                      |

### 2.1.3 晶格常数

将Ti-xAl合金X射线衍射得到的相关参数代入六方晶系晶格常数计算公式<sup>[30]</sup>，得到Ti-xAl合金的晶格常数，见表6。从表6可以发现，随着Al元素的加入，钛的晶格常数也会发生变化。纯钛中添加Al元素， $a$ 值增大，但随着Al元素含量的增多，Ti-xAl合金的 $a$ 值单调减小。 $c$ 值的变化和 $a$ 值相似，但 $c/a$ 值随Al元素含量的增加单调增大，且均大于纯钛。 $c/a$ 值的增大，暗示了随着Al元素的加入，Ti-xAl合金的滑移面较纯钛减少，变形难度增加。

硬度测试时，晶格常数 $c/a$ 将影响压头压入时基体变形的难易程度，从而直接影响其硬度大小，并使

拉伸强度发生变化。

### 2.2 Al 元素对硬度影响的定量建模

Al 元素在室温下溶入纯钛中形成含 Al 元素的无序固溶体，该固溶体可认为是由  $\alpha$ -Ti 及  $\alpha$ -Ti-Al 晶胞混合而成。相应的，Ti-xAl 一元无序固溶体中则含有  $\alpha$ -Ti/ $\alpha$ -Ti、 $\alpha$ -Ti-Al/ $\alpha$ -Ti 及  $\alpha$ -Ti-Al/ $\alpha$ -Ti-Al 相界面。因此，含 Al 合金的性质应由上述晶胞及其形成的相界面共同决定。在电子结构层次上，钛合金中  $\alpha$  相或  $\alpha'$  相的强化机制为固溶强化及界面强化。

表 6 Ti-xAl 合金晶格常数

Table 6 Lattice constants of Ti-xAl alloy

| Alloy  | a/nm     | c/nm     | c/a      |
|--------|----------|----------|----------|
| Ti     | 0.295 03 | 0.468 31 | 0.158 73 |
| Ti-1Al | 0.295 50 | 0.469 62 | 0.158 93 |
| Ti-4Al | 0.294 54 | 0.468 39 | 0.159 03 |
| Ti-6Al | 0.293 51 | 0.468 80 | 0.159 72 |
| Ti-8Al | 0.292 34 | 0.466 94 | 0.159 73 |

依据文献[16, 30]，钛合金的固溶强化效果可以用表征合金相结构单元中最强共价键上的共用电子对数与基体  $\alpha$ -Ti 相结构单元最强共价键上的共用电子对数的比值  $S$  来表征，即：

$$S = \frac{n_A'^{\alpha-Ti-Al}}{n_A'^{\alpha-Ti}} \quad (3)$$

式中： $n_A'$  为合金相最强键上的共同电子对数  $n_A$  的统计值； $S$  为固溶强化系数。

同样，文献[16, 31]指出钛合金的界面强化，包含位错强化及析出强化，可以用表征界面上应力大小的界面电子密度差的统计值  $\Delta\rho'$  来表征，即  $B=\Delta\rho'$ ， $B$  为界面强化系数。界面强化系数计算公式如式（4）：

$$\left. \begin{aligned} B^{\alpha-Ti/\alpha-Ti-M} &= \Delta\rho'^{\alpha-Ti/\alpha-Ti-M} \\ B^{\alpha-Ti-M/\alpha-Ti-Al} &= \Delta\rho'^{\alpha-Ti-M/\alpha-Ti-Al} \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

式中： $B^{\alpha-Ti/\alpha-Ti-M}$ 、 $B^{\alpha-Ti-M/\alpha-Ti-Al}$  分别表示  $\alpha$ -Ti/ $\alpha$ -Ti-Al、 $\alpha$ -Ti-Al/ $\alpha$ -Ti-Al 相界面的强化效果； $\Delta\rho'^{\alpha-Ti/\alpha-Ti-M}$ 、 $\Delta\rho'^{\alpha-Ti-M/\alpha-Ti-Al}$  分别表示  $\alpha$ -Ti/ $\alpha$ -Ti-Al、 $\alpha$ -Ti-Al/ $\alpha$ -Ti-Al 相界面的界面电子密度差统计值。 $\alpha$ -Ti-Al 相的固溶强化硬度增量计算公式如式（5）：

$$\Delta HV^{\alpha-Ti-Al} = HV^{\alpha-Ti} \cdot |S-1| \cdot W^{\alpha-Ti-Al} \quad (5)$$

式中： $\Delta HV^{\alpha-Ti-Al}$  为  $\alpha$ -Ti-Al 硬度增量； $HV^{\alpha-Ti}$  为纯钛的硬度值，即  $HV^{\alpha-Ti}=170.66HV$ ； $W^{\alpha-Ti-Al}$  为  $\alpha$ -Ti-Al 相结构单元的权重，其大小为式（7）：

$$W^{\alpha-Ti-M}=0.5C^M \quad (6)$$

式中， $C^M$  为 Al 的原子分数，at%。

$\alpha$ -Ti-Al 相结构单元形成相界面的界面强化硬度增量式为式（7）：

$$\left. \begin{aligned} \Delta HV^{\alpha-Ti/\alpha-Ti-Al} &= HV^{\alpha-Ti} \cdot B^{\alpha-Ti/\alpha-Ti-Al} \cdot W^{\alpha-Ti-Al} \\ \Delta HV^{\alpha-Ti-Al/\alpha-Ti-Al} &= HV^{\alpha-Ti} \cdot B^{\alpha-Ti-Al/\alpha-Ti-Al} \cdot W^{\alpha-Ti-Al} \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

式中， $\Delta HV^{\alpha-Ti/\alpha-Ti-Al}$ 、 $\Delta HV^{\alpha-Ti-Al/\alpha-Ti-Al}$  分别表示  $\alpha$ -Ti/ $\alpha$ -Ti-Al、 $\alpha$ -Ti-Al/ $\alpha$ -Ti-Al 相界面的硬度强化效果。

综上，Ti-xAl 合金的硬度计算式为式（8）：

$$HV = HV^{\alpha-Ti} + \Delta HV^{\alpha-Ti-Al} + \Delta HV^{\alpha-Ti/\alpha-Ti-Al} + \Delta HV^{\alpha-Ti-Al/\alpha-Ti-Al} \quad (8)$$

Ti-xAl 合金中  $\alpha$  相或  $\alpha'$  相及其相界面电子结构参数统计值如表 7 和表 8 所示，其中  $\sigma_N$  为相满足间距差的组数。将表 7、表 8 中的电子结构参数和合金元素的原子分数代入式（7）和式（8）便可计算出合金元素 Al 单独固溶在  $\alpha$  相或  $\alpha'$  相中的硬度影响值，见表 9。

表 7 Ti-xAl 合金相电子结构参数统计值

Table 7 Statistical values of valence electron structures of Ti-xAl alloy phase

| Alloy  | Al content/at% | Cell            | $n_A'$  | $\sigma_N$ |
|--------|----------------|-----------------|---------|------------|
| Ti-1Al | 1.7617         | $\alpha$ -Ti    | 0.24908 | 2          |
|        |                | $\alpha$ -Ti-Al | 0.23459 | 12         |
| Ti-4Al | 6.8879         | $\alpha$ -Ti    | 0.24908 | 2          |
|        |                | $\alpha$ -Ti-Al | 0.23593 | 15         |
| Ti-6Al | 10.179         | $\alpha$ -Ti    | 0.24908 | 2          |
|        |                | $\alpha$ -Ti-Al | 0.23294 | 15         |
| Ti-8Al | 13.373         | $\alpha$ -Ti    | 0.24908 | 2          |
|        |                | $\alpha$ -Ti-Al | 0.23524 | 13         |

表 8 Ti-xAl 合金相界面电子结构参数统计值

Table 8 Statistical values of valence electron structures of Ti-xAl alloy phase interfaces

| Alloy  | Interface                        | $\Delta\rho'$ /% |
|--------|----------------------------------|------------------|
| Ti-1Al | $\alpha$ -Ti/ $\alpha$ -Ti-Al    | 6.0467           |
|        | $\alpha$ -Ti-Al/ $\alpha$ -Ti-Al | 5.6494           |
| Ti-4Al | $\alpha$ -Ti/ $\alpha$ -Ti-Al    | 5.6095           |
|        | $\alpha$ -Ti-Al/ $\alpha$ -Ti-Al | 5.3412           |
| Ti-6Al | $\alpha$ -Ti/ $\alpha$ -Ti-Al    | 5.6095           |
|        | $\alpha$ -Ti-Al/ $\alpha$ -Ti-Al | 5.3412           |
| Ti-8Al | $\alpha$ -Ti/ $\alpha$ -Ti-Al    | 4.6509           |
|        | $\alpha$ -Ti-Al/ $\alpha$ -Ti-Al | 4.7888           |

### 2.3 Al 元素对抗拉强度影响的定量建模

$\alpha$ -Ti-Al 相的固溶强化抗拉强度增量计算式为式（9）：

$$\Delta\sigma_b^{\alpha-Ti-Al} = \sigma_b^{\alpha-Ti} \cdot |S-1| \cdot 2W^{\alpha-Ti-Al} \quad (9)$$

式中:  $\Delta\sigma_b^{\alpha-Ti-Al}$  为  $\alpha$ -Ti-Al 抗拉强度增量;  $\sigma_b^{\alpha-Ti}$  为纯钛的强度值, 即  $\sigma_b^{\alpha-Ti}=310$  MPa。

$\alpha$ -Ti-Al 相结构单元形成相界面的界面强化抗拉强度增量计算式如式 (10):

$$\left. \begin{aligned} \Delta\sigma_b^{\alpha-Ti/\alpha-Ti-Al} &= \sigma_b^{\alpha-Ti} \cdot B^{\alpha-Ti/\alpha-Ti-Al} \cdot 2W^{\alpha-Ti-Al} \\ \Delta\sigma_b^{\alpha-Ti-Al/\alpha-Ti-Al} &= \sigma_b^{\alpha-Ti} \cdot B^{\alpha-Ti-Al/\alpha-Ti-Al} \cdot W^{\alpha-Ti-Al} \end{aligned} \right\} \quad (10)$$

式中:  $\Delta\sigma_b^{\alpha-Ti/\alpha-Ti-Al}$ 、 $\Delta\sigma_b^{\alpha-Ti-Al/\alpha-Ti-Al}$  分别为  $\alpha$ -Ti/ $\alpha$ -Ti-Al、 $\alpha$ -Ti-Al/ $\alpha$ -Ti-Al 相界面的抗拉强度强化效果。

Ti-xAl 合金的抗拉强度计算式为式 (11):

$$\sigma_b = \sigma_b^{\alpha-Ti} + \Delta\sigma_b^{\alpha-Ti-Al} + \Delta\sigma_b^{\alpha-Ti/\alpha-Ti-Al} + \Delta\sigma_b^{\alpha-Ti-Al/\alpha-Ti-Al} \quad (11)$$

将表 7、表 8 中的参数和合金元素 Al 的原子分数代入式 (10) 和式 (11) 便可计算出合金元素 Al 单独固溶在  $\alpha$  相或  $\alpha'$  相中的抗拉强度影响值, 从而计算出 Ti-xAl 合金的抗拉强度, 见表 10。

表 9 Ti-xAl 合金显微硬度理论计算值 (HV)

Table 9 Theoretical calculation of microhardness of Ti-xAl alloy

| Alloy  | $\Delta HV^{\alpha-Ti-Al}$ | $\Delta HV^{\alpha-Ti/\alpha-Ti-Al}$ | $\Delta HV^{\alpha-Ti-Al/\alpha-Ti-Al}$ | HV     |
|--------|----------------------------|--------------------------------------|---|--------|
| Ti-1Al | 8.7451                     | 9.0897                               | 8.4925                                  | 196.99 |
| Ti-4Al | 31.027                     | 32.970                               | 31.393                                  | 266.05 |
| Ti-6Al | 56.282                     | 48.723                               | 46.392                                  | 322.06 |
| Ti-8Al | 63.406                     | 53.072                               | 54.646                                  | 341.78 |

表 10 Ti-xAl 合金抗拉强度理论计算值 (MPa)

Table 10 Theoretical calculation of tensile strength of Ti-xAl alloy

| Alloy  | $\Delta\sigma_b^{\alpha-Ti-Al}$ | $\Delta\sigma_b^{\alpha-Ti/\alpha-Ti-Al}$ | $\Delta\sigma_b^{\alpha-Ti-Al/\alpha-Ti-Al}$ | $\sigma_b$ |
|--------|---------------------------------|---|--|------------|
| Ti-1Al | 31.768                          | 33.023                                    | 15.426                                       | 390.22     |
| Ti-4Al | 112.72                          | 119.78                                    | 57.024                                       | 599.52     |
| Ti-6Al | 204.45                          | 179.71                                    | 84.271                                       | 778.45     |
| Ti-8Al | 230.33                          | 192.81                                    | 99.263                                       | 832.40     |

### 2.4 理论计算与实验结果对比

将表 2、表 4 中的实验值与表 9、表 10 中的理论计算值进行对比, 获得理论计算误差, 见表 11。从表 11 可以看出, 显微硬度理论计算最大误差为 9.1276% (Ti-8Al), 而抗拉强度理论计算最大误差为 16.974% (Ti-1Al)。总体来看, 显微硬度、抗拉强度的理论计算值与实验值误差平均值分别为 4.9631%、6.3520%, 理论计算值与实验值吻合比较好。

表 11 Ti-xAl 合金显微硬度、抗拉强度的实验值与计算值对比

Table 11 Comparison between experimental and calculated values of microhardness and tensile strength of Ti-xAl alloy

| Alloy         | Microhardness/HV   |                  |          | Tensile strength/MPa |                  |          |
|---------------|--------------------|------------------|----------|----------------------|------------------|----------|
|               | Experimental value | Calculated value | Error /% | Experimental value   | Calculated value | Error /% |
| Ti-1Al        | 189.25             | 196.99           | 4.0898   | 470                  | 390.22           | 16.974   |
| Ti-4Al        | 252.01             | 266.05           | 5.5712   | 607.5                | 599.52           | 1.3136   |
| Ti-6Al        | 318.67             | 322.06           | 1.0638   | 785                  | 778.45           | 0.8343   |
| Ti-8Al        | 376.11             | 341.78           | 9.1276   | 950                  | 890.28           | 6.286    |
| Average value | —                  | —                | 4.9631   | —                    | —                | 6.3520   |

### 3 结 论

(1) 随着 Al 元素含量的增加, Ti-xAl ( $x=1、4、6、8$ ) 合金固溶体的  $a$  值和  $c$  值单调减少, 但  $c/a$  值随 Al 元素含量的增加单调增加。这些变化提示了随着 Al 元素含量的增加,  $\alpha$  相或  $\alpha'$  相强度增加, 进而变形难度增大。

(2) Ti-xAl ( $x=1、4、6、8$ ) 合金固溶体  $\alpha$  相或  $\alpha'$  相的抗拉强度变化规律与其硬度变化规律相似, 均随 Al 元素含量的增加呈抛物线型平缓上升。

(3) 基于合金价电子理论计算了 Ti-xAl 合金价电子结构参数, 建立了 Al 元素对钛合金显微硬度及抗拉强度影响的定量计算关系模型。Ti-xAl 合金显微硬度、抗拉强度的理论计算值与实验值误差的平均值分别为 4.9631%、6.3520%。

### 参考文献 References

- [1] Ishiyama S, Hanada S. Effect of Zr, Sn and Al addition on the mechanical properties of metastable  $\beta$  titanium alloys[J]. Sumitomo Search, 1993, 54: 41-47.
- [2] Takahashi T, Asano K, Hasegawa K, et al. Alloying effect of vanadium on the structure and strength of  $\gamma$ -phase titanium aluminides with aluminum-rich compositions[J]. Materials Science and Engineering A, 1997, 239-240: 271-275.
- [3] Okazaki Y, Ito Y, Ito A, et al. Effect of alloying elements on mechanical properties of titanium alloys for medical implants[J]. Materials Transactions, 1993, 34(12): 1217-1222.
- [4] Fan Z Y. The grain size dependence of ductile fracture toughness of polycrystalline metals and alloys[J]. Materials Science and Engineering A, 1995, 191(1/2): 73-83.
- [5] 刘莹莹, 李嘉懿, 郭文虎, 等. 细晶 TC4 钛合金的动态再结

- 晶行为及数值模拟[J]. 稀有金属材料与工程, 2022, 51(11): 4137-4145.
- [6] Morinaga M, Kato M, Kamimura T, et al. Theoretical design of beta-type titanium alloy[C]//Titanium'92 Science and Technology. Pennsylvania: The Minerals, Metals & Materials Society, 1993: 489-510.
- [7] Morinaga M, Yukawa N, Maya T A. Theoretical design of titanium alloys[C]//Sixth World Conference on Titanium. France: Societe Francaise de Metallurgie, 1988: 601-606.
- [8] Donaga M. Alloy design of Ti alloys using ubiquitous alloying elements and characteristics of their levitation-melted alloy[J]. Materials Transactions, 2010, 51(4) : 740-748.
- [9] Shaik S, Danovich D, Hiberty P C. Valence bond theory—its birth, struggles with molecular orbital theory, its present state and future prospects[J]. Molecules, 2021, 26(6) : 1624.
- [10] Masahiko M. Alloy design based on molecular orbital method[J]. Materials Transactions, 2016, 57(3) : 213-226.
- [11] Schmidt J, Marques M R G, Botti S, et al. Recent advances and applications of machine learning in solid-state materials science[J]. npj Computational Materials, 2019, 5: 83.
- [12] Bartók A P, De S, Poelking C, et al. Machine learning unifies the modelling of materials and molecules[J]. Science Advances & Research Article, 2017, 3(12) : 1701816.
- [13] 张瑞林. 固体与分子经验电子理论[M]. 长春: 吉林科学与技术出版社, 1990.
- [14] 刘志林. 合金价电子结构与成分设计[M]. 长春: 吉林科学与技术出版, 1993.
- [15] 刘志林, 李志林, 刘伟东. 界面电子结构与界面性能[M]. 北京: 科学出版社, 2002.
- [16] 刘志林, 林成. 合金电子结构参数统计值及合金力学性能计算[M]. 北京: 冶金工业出版社, 2008.
- [17] Lin C, Liu Z L. Statistical values of valence electron structure parameters applied to research on phase transition temperature and eutectoid of titanium alloy[J]. Science in China Series E: Technological Sciences, 2008, 51(11): 1867-1880.
- [18] Huang S X, Zhao Q Y, Wu C, et al. Effects of beta-stabilizer elements on microstructure formation and mechanical properties of titanium alloys[J]. Journal of Alloys and Compounds, 2021, 876: 160085.
- [19] Huang S X, Zhao Q Y, Zhao Y Q, et al. Toughening effects of Mo and Nb addition on impact toughness and crack resistance of titanium alloys[J]. Journal of Materials Science & Technology, 2021, 79: 147-164.
- [20] Huang S X, Zhao Y Q, Yu J S, et al. Partition of Nb element on microstructure, tensile and impact properties of a near a Ti-4Nb alloy[J]. Journal of Alloys and Compounds, 2020, 826: 154128.
- [21] Huang S X, Zhao Q Y, Lin C, et al. Effects of oxygen content on Charpy impact properties and crack resistance of  $\alpha$  titanium alloys[J]. Materials Science and Engineering A, 2021, 818: 141394.
- [22] Lin C, Yin G L, Zhao Y Q, et al. Analysis of the effect of alloy elements on allotropic transformation in titanium alloys with the use of cohesive energy[J]. Computational Materials Science, 2016, 111: 41-46.
- [23] Lin C, Huang S X, Yin G L, et al. A simple model to ascertain the initial formation concentration of athermal  $\omega$  phase in titanium alloys[J]. Computational Materials Science, 2016, 123: 263-267.
- [24] Lin C, Yin G L, Zhang A M, et al. Simple models to account for the formation and decomposition of athermal  $\omega$  phase in titanium alloys[J]. Scripta Materialia, 2016, 117: 28-31.
- [25] Zhang A M, Zhao Z W, Yin G L, et al. A novel model to account for the heterogeneous nucleation mechanism of  $\alpha$ -Mg refined with  $Al_4C_3$  in Mg-Al alloy[J]. Computational Materials Science, 2017, 140: 61-69.
- [26] Yin G L, Chen S Y, Liang J, et al. Studies on formation mechanism of in situ particles during laser direct deposition of Fe-based composite coatings with valence electron structure parameters[J]. Metallurgical and Materials Transactions A, 2019, 50: 2599-2612.
- [27] Li F, Lin C, Shi Y H, et al. Valence electron structure parameter analysis on effect of alloying elements on phase transformation temperature of zirconium alloys[J]. Rare Metal Materials and Engineering, 2022, 51(3): 866-872.
- [28] Witusiewicz V T, Bondar A A, Hecht U, et al. The Al-B-Nb-Ti system III. Thermodynamic re-evaluation of the constituent binary system Al-Ti[J]. Journal of Alloys and Compounds, 2008, 465: 64-77.
- [29] 吴欢. 合金元素对钛合金强韧化影响机理研究[D]. 西安: 西北工业大学, 2010.
- [30] 王金友, 葛志明, 周彦邦. 航空用钛合金[M]. 上海: 上海科学技术出版社, 1985: 158-269.
- [31] 林成, 尹桂丽, 刘志林, 等. 高强钛合金抗拉强度的理论计算[J]. 稀有金属材料与工程, 2010, 39(7): 1189-1194.