

引文格式: 罗登超, 布桐, 高子彤, 等. 合金元素对钛合金性能的影响规律与内在机制[J]. 航空制造技术, 2026, 69(17): 25010130.

LUO Dengchao, BU Tong, GAO Zitong, et al. Influence laws and internal mechanisms of alloying elements on titanium alloy properties[J]. Aeronautical Manufacturing Technology, 2026, 69(17): 25010130.

合金元素对钛合金性能的影响规律与内在机制

罗登超^{1,2}, 布桐¹, 高子彤², 韩卫忠¹

(1. 西安交通大学金属材料强度国家重点实验室, 西安 710049;

2. 西部钛业有限责任公司, 西安 710016)

[摘要] 随着钛合金应用领域的进一步拓展, 工业界对钛合金的综合性能提出了越来越高的要求。利用各种金属和非金属元素进行合金化是调控和优化钛合金综合性能的有效策略。本文结合钛合金在合金化研究领域的最新进展, 总结了钛合金中常见的合金化元素, 如 α 稳定元素 (Al、O)、 β 稳定元素 (Mo、V、Nb、Fe)、中性元素 (Zr、Sn) 和稀土元素 (RE) 等, 对钛合金组织结构和综合性能的影响规律, 探讨了通过固溶强化、晶粒细化、位错强化、变形孪晶等方式影响性能的内在微观机制。本文介绍了钛合金成分设计领域的经典理论、最新方法及研究进展, 展望了未来钛合金设计的发展方向, 期望为新型钛合金的成分设计、组织调控和综合性能的跃升提供新思路。

关键词: 钛合金; 合金化; 成分设计; 微观组织; 力学性能

中图分类号: V252.2; TG146.2

文献标志码: A

DOI: 10.16080/j.issn1671-833x.25010130

Influence Laws and Internal Mechanisms of Alloying Elements on Titanium Alloy Properties

LUO Dengchao^{1,2}, BU Tong¹, GAO Zitong², HAN Weizhong¹

(1. State Key Laboratory for Mechanical Behavior of Materials, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China;

2. Western Titanium Technologies Co., Ltd., Xi'an 710016, China)

[ABSTRACT] As the application areas of titanium alloys continue to expand, the diverse usage locations and service environments impose increasingly higher demands on the comprehensive performance. Alloying with various elements is an effective strategy for tailoring and optimizing the overall performance of titanium alloys. Based on the latest research progresses in the field of titanium alloy, this paper reviews and summarizes the influences of common alloying elements, including α -stabilizing elements (Al, O), β -stabilizing elements (Mo, V, Nb, Fe), neutral elements (Zr, Sn), and rare earth elements (RE) on the microstructure evolution and comprehensive performance. The intrinsic microscopic mechanisms by which it affects properties such as solid solution strengthening, grain refinement, dislocation strengthening, and deformation twinning are discussed. This review covers classic theories, latest design methods, and new research progresses in the field of titanium alloys, and look into the future development directions of titanium alloys. The current paper aims to provide new insights for the compositional design, microstructural control, and significant improvement of the properties of advanced titanium alloys.

Keywords: Titanium; Alloying; Composition design; Microstructure; Mechanical property

收稿日期: 2025-08-26; 退修日期: 2025-09-22; 录用日期: 2025-11-18

基金项目: 国家科技重大专项 (2025ZD0619700); 陕西省重点研发计划 (2024CY-GJHX-10)

通信作者: 韩卫忠, 教授, 博士生导师, 主要从事高性能金属结构材料的设计、制备和服役行为机理研究。

钛合金是 20 世纪 50 年代发展起来的一种重要的金属材料,具有密度低、比强度高、耐腐蚀性能优异、中高温力学性能好、抗疲劳和抗蠕变性能优良等突出特点,在航空航天、兵器、核电、化工、舰船、海洋工程、医疗与体育等领域有着广泛的应用^[1-3]。随着钛合金的应用领域的进一步拓展、不同的使用部位与工作服役环境,对钛合金的综合性能提出了更高的要求。航空航天领域要求钛合金材料在复杂甚至极端的服役环境下保持长期的结构完整性和可靠性,提出了特殊的设计需求。开发超高强度与高韧性相匹配的钛合金是重要研究方向。例如,针对大型飞机起落架等关键承力部件,需要在保证足够强度的同时,具备优异的断裂韧性以防止灾难性失效^[4]。飞机结构和发动机部件在服役期间承受着复杂的循环载荷,因此材料的抗疲劳性能至关重要^[5-6]。同时,随着航空发动机推重比的不断提升,涡轮盘、叶片等热端部件的工作温度持续升高,这要求钛合金必须具备在高温环境下保持强度、抗蠕变和抗氧化的能力。此外,航空航天用钛合金的轻量化设计也是目前的另一重要研究方向。减轻结构重量可以直接提升燃油效率、增加有效载荷、改善飞行性能,钛合金极高的强度与密度比使之成为实现轻量化的理想选择。另外,航空航天用钛合金的低成本设计也是目前的一大研究方向。随着航空航天市场竞争的加剧和产业链的成熟,降低全生命周期成本已成为与性能同等重要的核心需求,因而需要降低钛合金的制造成本、提升其可加工性,以此实现钛合金的低成本设计。综上,设计和制备综合性能优异的钛合金是当前钛合金材料发展与应用的迫切需求。

钛合金的性能主要由化学成分和组织结构两个因素决定,成分-组织-性能之间的内在联系是钛合金材料设计、加工与应用的关键理论依据^[7]。通过多种金属和非金属元素的合金化,可以有效改变钛合金的组织形貌与变形行为,从而有针对性地提升钛合金的强度、塑性、韧性、耐蚀性、抗疲劳和抗蠕变等性能,满足多样化的复杂应用需求^[8]。随着对钛合金研究的不断深入,合金元素的种类和含量对钛合金组织性能的影响规律也逐渐明晰。

本文结合钛合金研究领域的最新进展和与研究成果,总结了钛合金中常见的合金元素及其含量对钛合金的组织结构、力学性能以及耐腐蚀性能的影响规律,并探讨了其内在微观机制,为高性能钛合金的成分设计、组织调控与性能提升提供一定的理论依据。同时,介绍了钛合金成分设计的经典理论及最新方法的发展历程,展望了未来钛合金的发展方向。

1 钛合金及常用合金元素的分类

纯钛在常温下呈现密排六方结构(Hexagonal close-

packed, HCP),称为 α 相,在 882 °C 以上则会转变为体心立方结构(Body centered-cubic, BCC),称为 β 相^[9-11]。通过在纯钛中添加不同种类和含量的合金元素,可以改变钛合金 α/β 相的转变温度,并改变其室温条件下的相组成、组织形貌与相比比例,使之呈现出不同的组织结构,表现出较宽范围的性能特征。

根据对 α/β 相转变温度的影响规律,钛合金中的合金化元素可以分为 α 稳定元素、 β 稳定元素以及中性元素 3 类^[12-14]。 α 稳定元素可以提高钛合金的 α/β 相转变温度,提升 α 相的稳定性,主要包括 Al、Ga、Ge 等置换固溶元素以及 O、C、N、B 等间隙固溶元素; β 稳定元素可以降低钛合金的 α/β 相转变温度,增强 β 相的稳定性。 β 稳定元素分为同晶型和共析型元素,同晶型元素通常具有 BCC 类型的晶体结构,可以与钛的 β 相无限固溶,不生成任何金属间化合物相,例如 Mo、V、Nb、Ta 等元素;共析型元素在一定含量与温度条件下,会与钛的 β 相发生共析相变,形成金属间化合物相并强烈降低 α/β 相转变温度,例如 Fe、Cu、Ni、Si、Cr、Mn、Pd 及 H 等元素^[15-16]。中性元素对 α/β 相转变温度影响不大,主要包括 Zr、Sn 和 Hf 等元素^[9]。

2 α 稳定元素对钛合金的影响

2.1 Al 元素对钛合金的影响

Al 是钛合金中最常见的 α 稳定元素^[17-18]。Al 的合金化可以改变 α -Ti 相的强度,一方面是因为 Al 原子固溶于 α 相时,与 Ti 原子的半径存在差异导致的晶格畸变和固溶强化^[19];另一方面,Al 合金化可以改变 α 相的滑移方式^[20]。Williams 等^[21]的研究表明,Al 含量的上升会改变位错滑移系统的临界分切应力(Critical resolved shear stress, CRSS):棱柱面 $\langle a \rangle$ 滑移的 CRSS 随 Al 含量增加快速上升,而基面 $\langle a \rangle$ 滑移的 CRSS 增速较缓,同时抑制锥面 $\langle c+a \rangle$ 滑移。因此,Al 增加会导致 α 相滑移带变窄、位错分布更平面化,位错密度在滑移带内更高,从而降低均匀变形能力,提升局部加工硬化率。Kwasniak^[22]与 Yu^[23]等研究发现,Al 的固溶可以稳定 α -Ti 相 $1/3\langle 11\bar{2}0 \rangle$ 螺位错的非平面核心,并阻碍刃位错的发射,改变基面和柱面的层错能,从而起到强化效果。Zhang^[24]和 Fitzner^[25]等的研究表明,Al 含量会显著影响孪晶变形的启动:随 Al 含量增加, α 相的 $\{10\bar{1}2\}\langle 10\bar{1}1 \rangle$ 孪晶的活性显著增强,这与 Al 降低层错能促进孪晶形核有关;当 Al 含量继续增加时,短程有序和细小 α_2 -Ti₃Al 相的形成会显著抑制孪晶的形核与生长,因此孪生协调变形的能力被逐步减弱。

Huang 等^[26]研究了 Al 合金化对钛合金的强度和冲击韧性的影响,发现纯钛和 Ti-6Al 合金的室温拉伸

性能差异巨大, Ti-6Al 合金的抗拉强度达到 684 MPa, 远高于纯钛的 260 MPa, 而其断后延伸率 19.5%, 远不如纯钛的 71.5%。图 1 (a)~(d)展示了两种钛合金室温拉前后的组织形貌对比, 纯钛与 Ti-6Al 合金拉伸前均呈现等轴组织形貌; 在拉伸变形后, 纯钛组织中产生了高密度变形孪晶, 而 Ti-6Al 合金组织中仅形成了少量的变形孪晶。变形孪晶是纯钛及 α 钛合金的重要变形机制之一, Al 含量上升抑制了孪晶的开动, 因此降低了拉伸塑性。对比纯钛和 Ti-6Al 合金的夏比冲击性能, 纯钛的冲击最大载荷为 10464 N, 远小于 Ti-6Al 合金的 18183 N, 但纯钛的冲击功高达 255 J, 远高于 Ti-6Al 合金的 96 J, 且在裂纹萌生和裂纹扩展阶段, 纯钛吸收的能量均高于 Ti-6Al 合金。图 1 (e) 和 (f) 展示了冲击试样裂纹附近的组织形貌。同样, 纯钛的冲击试样组织中能观察到大量的变形孪晶, 而 Ti-6Al 合金的冲击式

样组织中变形孪晶非常少。研究结论得出, 纯钛通过大量孪晶形成吸收冲击能量, 而 Ti-6Al 合金中 Al 抑制了变形孪晶的产生, 从而减弱了能量吸收。基于组织与性能分析, 认为 Al 元素的增加可以提高钛合金的强度, 降低塑性和冲击韧性。

Fitzner 等^[25]深入研究了 Al 对二元 α 钛中孪晶的影响, 发现随着 α 钛中 Al 含量的增加, 变形孪晶先是略微增强, 以 $\{10\bar{1}2\}<10\bar{1}1>$ 拉伸孪晶为主。当 Al 的原子分数达到 7% 时发生转折, 进一步提高 Al 含量, Al 的有序化极大阻碍了孪晶晶界的扩展, 使得孪晶数量急剧下降。图 2^[25]展示了 α -Ti 中 Al 含量与其机械性能的关系: 屈服强度随着 Al 含量的增加而显著增加, 在 Al 原子分数低于 10% 之前最为显著; 加工硬化能力随 Al 含量的提升先增加后下降, 在 Ti-7Al 达到最大值。在 Al 原子分数在 7% 以上时会出现短程有序, 降低了材料

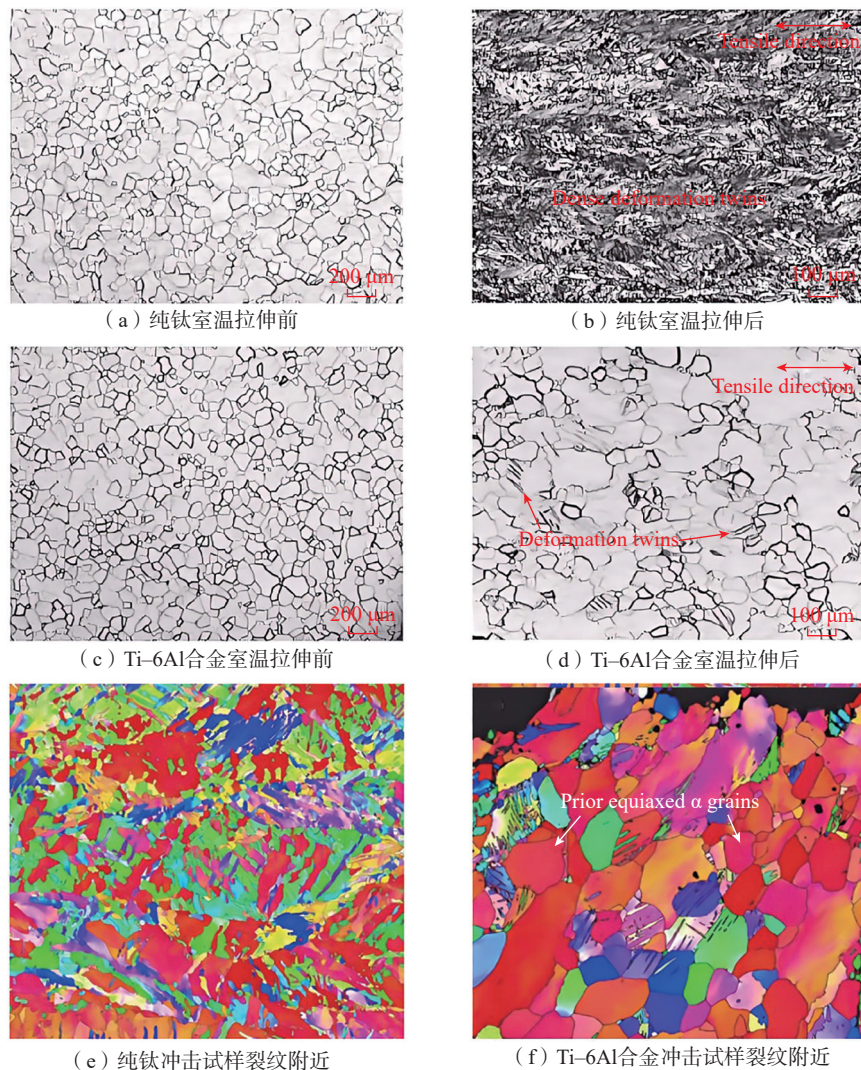


图 1 纯钛和 Ti-6Al 合金组织^[26]

Fig.1 Microstructure of pure Ti and Ti-6Al alloy^[26]

的加工硬化能力,时效 Ti-10Al 表现出最小的加工硬化率 $\theta_{\min}$ 。

研究 Ti-Al 合金中 $\{10\bar{1}2\}\langle 10\bar{1}1\rangle$ 拉伸孪晶活性发现, Ti-0Al、Ti-3Al 和 Ti-7Al 的孪晶活性相似,而随着 Al 含量继续增加, Ti-13Al 的孪晶活性大幅降低,且临界应变提高到 0.04 以上。对比时效对孪晶活性的影响发现,时效后 Ti-7Al 和 Ti-10Al 合金中的孪晶活性均有所降低,且时效 Ti-10Al 对孪晶活性的影响更大。铝含量与时效处理对孪生临界残余晶格应变也产生影响。随着 Al 含量的增加,在没形成有序的情况下,孪晶成核所需的临界残余晶格应变减小。这一结果被解释为晶粒中 Al 含量的增加使层错能降低,孪晶形成所需的内在能量减少,而时效使 Ti-7Al 和 Ti-10Al 在孪晶萌生时临界残余晶格应变提高,抑制孪晶的形成。因此,Al 的含量须控制在合适的范围,才能实现固溶强化的同时不抑制变形孪生以增强钛合金的塑韧性。

Al 的合金化还可以改变钛合金耐腐蚀能力。Liu 等^[27]研究了纯钛与二元 Ti-Al 合金在热硝酸环境中的

腐蚀行为。如图 3 (a) 所示,随 Al 含量上升,与耐蚀性能成反比关系的极化电阻 (R_p) 指标增加,在 Al 质量分数超过 4% 后略有下降;通过第一性原理计算了不同 Al 含量下的逸出功 (W_F) 与费米能级 (E_F) (图 3 (b)),结果表明 Al 质量分数 4% 的钛合金具有最低的 E_F 和最高的 W_F ,对应于腐蚀条件下最好的热力学稳定性。试验与计算表明 Al 可以提升钛合金的耐腐蚀性能。研究认为这归功于 Al 添加导致的腐蚀钝化膜的增厚与致密化, Al^{3+} 通过 Ti^{4+} 空位向外扩散,形成 TiO_2/Al_2O_3 复合氧化物。一方面, Al 倾向于富集在钝化膜外层起到更佳的保护作用,另一方面 Al_2O_3 的引入减少了钝化膜中的缺陷,因此 Al 的合金化可以有效提高钛合金的耐蚀性。

2.2 O 元素对钛合金的影响

作为间隙固溶元素, O 是钛合金中最常见的 α 相稳定元素^[28-29]。O 原子在 α -Ti 中位于八面体间隙,而在 β -Ti 中位于四面体间隙中^[30-31],使晶格产生严重的畸变,因而具有极强的固溶强化效果,可以有效提高钛合

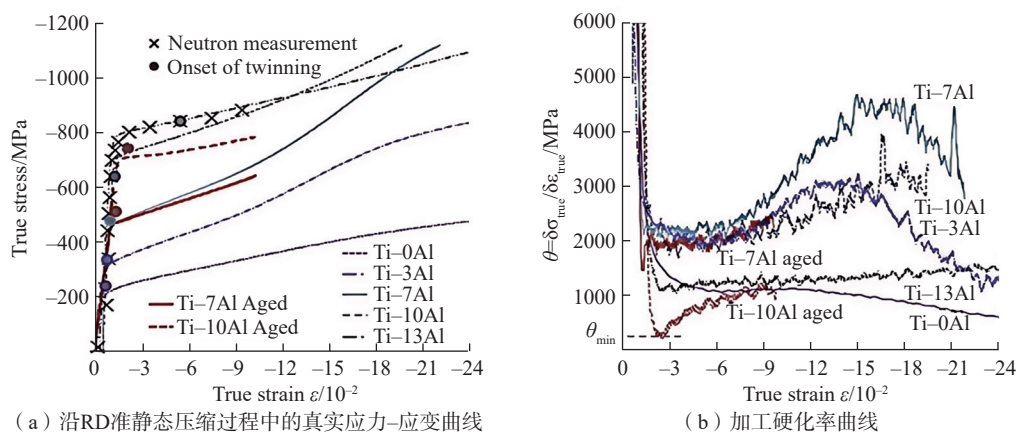


图 2 不同 Al 含量的应力应变曲线和加工硬化率曲线^[25]

Fig.2 True stress-strain curves and work hardening rate curve on different Al contents^[25]

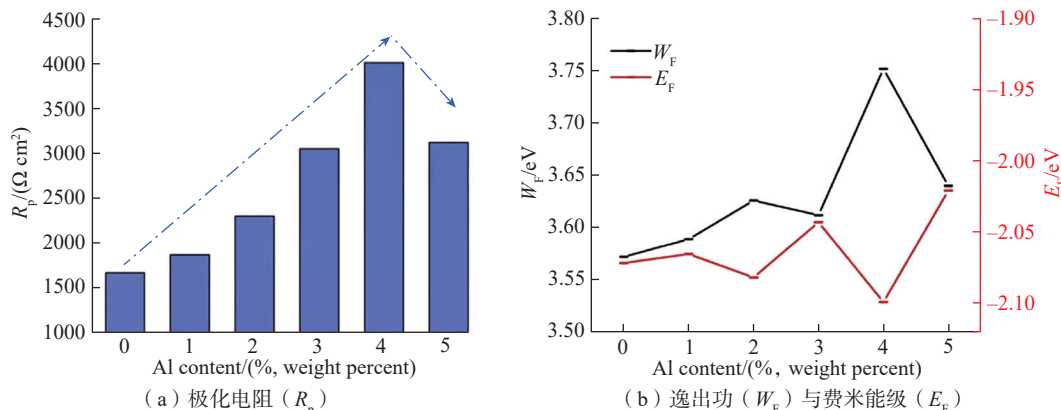


图 3 Al 含量对钛合金耐蚀性的影响^[27]

Fig.3 Effect of Al concentration on corrosion resistance of titanium alloy^[27]

金的强度。随着 O 含量的增加, α -Ti 相的基面 $\langle a \rangle$ 滑移、柱面 $\langle a \rangle$ 滑移、一次锥面和二次锥面 $\langle a+c \rangle$ 滑移的 CRSS 均大幅度增加^[32-33]。研究发现, 纯钛中的 O 的质量分数每增加 0.1%, 其强度提升约 90~130 MPa^[34]。O 同样可以改变 α -Ti 相的变形模式。Williams 等^[34] 的研究表明, 随着 O 含量的上升, 工业纯钛中位错由从波浪状滑移转变为平面滑移并形成密集滑移带, 这是由于 O 原子诱发的局部有序化, 迫使位错共面运动; O 还显著提高了工业纯钛中的内应力, 这是由于平面滑移导致位错在狭窄带内密集排列, 甚至发生塞积; 此外, O 含量的增加会阻碍 α -Ti 相的孪生变形, 降低变形协调能力。Zou 等^[35] 的近期研究表明, 通过降低纯钛中的 O 含量至临界水平(质量分数 $<0.03\%$) 可激活大量变形孪晶, 孪晶界上的台阶可以作为位错源持续发射 $\langle c+a \rangle$ 位错, 显著提升均匀变形能力和断裂韧性。

Huang 等^[36] 系统研究了 O 含量对纯钛和 Ti-6Al 合金冲击性能的影响。随着 O 含量的上升, 纯钛和 Ti-6Al 合金的冲击吸收能均显著下降, 原因在于 O 原子钉扎位错、抑制孪生, 降低塑性变形能力, 导致脆性断裂倾向增加。O 含量的上升也会导致裂纹扩展阻力的降低。示波冲击结果显示, 低氧纯钛 Ti-L 的裂纹扩展能是高氧纯钛 Ti-H 的 2.9 倍, 低氧 Ti-6Al-L 合金的裂纹扩展能是高氧 Ti-6Al-H 合金的 4.9 倍。O 含量的上升还会改变断裂机制, 随氧含量升高, 纯钛的冲击断口由深韧窝+剪切带的韧性断裂转变为解理面+微孔的准解理断裂, 而 Ti-6Al 合金中会产生更多的二次裂纹。透射电镜观察得出, 高 O 含量样品中位错严重缠结并在晶界塞积, 存在 $\{10\bar{1}2\}$ 拉伸孪晶, 而低 O 含量样品中的位错均匀分布, 孪晶数量更多。研究认为, O 固溶于 α -Ti 相会形成强的 Ti-O 键, 增加位错运动的阻力与不均匀性, 提高孪生切变能垒, 因而氧含量升高会降低纯钛

与钛合金的裂纹萌生抗力和扩展抗力, 导致冲击韧性下降。

Brandes 等^[37] 研究了 O 含量对于工业纯钛拉压性能的影响, 得出高氧(质量分数 0.330%) 工业纯钛的屈服强度是低氧(质量分数 0.036%) 工业纯钛的 2.3 倍, 展现出明显的 O 固溶强化效果。此外, 高氧工业纯钛在横向 TD 织构方向加载时出现显著的拉压不对称性, 屈服强度差异达到 19 MPa, 这种现象在低氧工业纯钛中未发生。研究者认为, O 含量的增加促进了 α -Ti 的非棱柱面滑移, 稳定了非棱柱面 $\langle a \rangle$ 螺位错的核心结构, 增强了材料的应力状态敏感性, 而织构的存在会放大 O 引发的拉压不对称效应, 导致性能的各向异性。

Zou 等^[38] 研究了 O 含量对纯钛断裂韧性的影响及其内在机理。如图 4 所示, 将目前 CP-Ti 纯钛中 O 的质量分数由 0.14% 降至 LO-Ti 中的 0.022% 后, 材料的断裂韧性由 $117 \text{ MPa} \cdot \text{m}^{1/2}$ 提升至 $255 \text{ MPa} \cdot \text{m}^{1/2}$, 达到了已知的顶尖水平。

对裂纹尖端附近的组织进行表征和分析, 如图 5 所示^[38]。一方面, O 含量的降低促进了变形孪晶的萌生与扩展, 将晶粒细分为多个区域, 促进塑性变形均匀化, 其机制在于: 氧原子偏聚于孪晶界, 钉扎原子面剪切运动, 阻碍了孪晶的发展。另一方面, O 含量的降低有利于 $\langle c+a \rangle$ 位错密度的提高, 且孪晶界能够作为位错源发射大量位错, 促进 $\langle c+a \rangle$ 位错的增殖与运动。究其原因, O 含量下降能够降低 $\langle c+a \rangle$ 位错的 CRSS, 使位错运动更为均匀, 提升了材料的塑性协调能力。综上, 通过降低纯钛中的 O 含量, 在室温通常难以启动的这两种变形模式得以激活, 显著提高了 α -Ti 塑性变形的均匀程度, 扩大裂纹尖端塑性区范围并增大能量耗散, 进而有效钝化了裂纹尖端, 使金属钛展现出了显著的断裂韧性。

基于 O 对钛合金变形机制与性能的影响, Wang

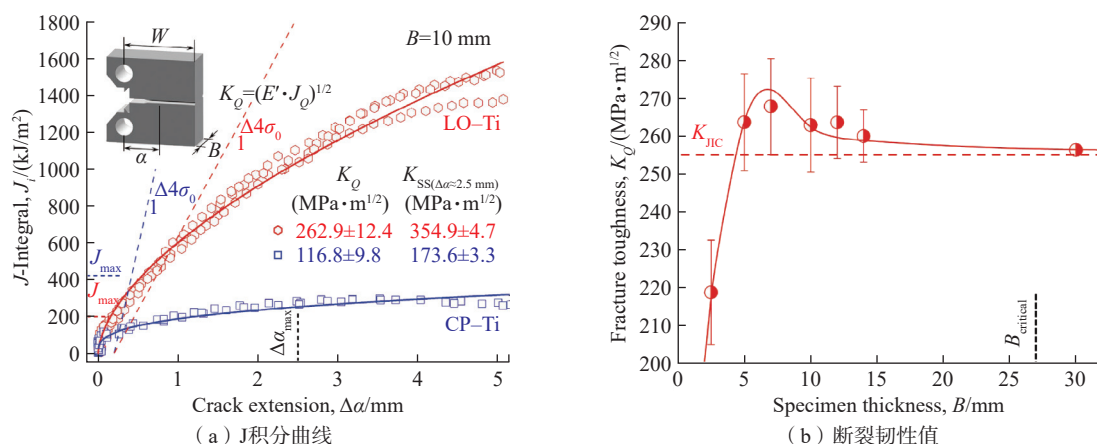


图 4 CP-Ti 和 LO-Ti 的断裂韧性^[38]
Fig.4 Fracture toughness of CP-Ti and LO-Ti^[38]

等^[39]创新设计了O含量呈梯度分布的氧梯度钛材料,通过外层高氧区(质量分数0.3%)、过渡中氧区(质量分数0.1%)与内层低氧区(质量分数<0.1%)的氧含量梯度调控,在材料表面产生高强度的同时,其内部具有较高密度孪晶使材料维持高塑性状态,如图6所示。同时,表面微裂纹可以被塑性优异的低氧区钝化。此外,氧浓度梯度导致位错密度从核心到表面递增,增强了整体加工硬化能力。该材料具有表面超高硬度、高强高韧组合以及超高应变硬化率的优异性能特点。

3 β 稳定元素对钛合金的影响

3.1 Mo 元素对钛合金的影响

Mo与 β -Ti具有几乎完全相同的晶格,是钛的同晶型 β 稳定元素^[40]。Mo能够与 β -Ti无限互溶,而600℃时在 α -Ti中的溶解度低于1%。Mo元素可以抑制钛合金 α 相的析出,促进 β 相的形成和稳定,并起到细化晶

粒的效果,从而影响钛合金的性能^[41-42]。Moshokoa^[43]和Ho等^[44]研究了Mo含量对于Ti-Mo二元合金凝固相组成与性能的影响,发现纯钛的凝固组织仅由 α' 相组成。文献[44]得出,Mo会导致六方 α' 相产生晶格畸变,对称性降低,因此当钛合金中Mo质量分数达到6%时,合金组织中出现 α'' 相;当Mo质量分数继续升高,达到10%时,马氏体相变被完全抑制, β 相被保留至室温,合金组织仅由 β 相组成。研究表明,所有的Ti-Mo合金的硬度与弯曲强度均显著高于纯钛,且在Mo质量分数为10%时基本达到峰值,体现了Mo的固溶强化作用。类似的组织与性能的演变规律,在Ti-20Zr-xMo合金中也有所体现^[45]。

Mo添加于Ti合金中可以形成 ω 相。Yi等^[46]研究了Ti-7Nb-10Mo合金在固溶时效热处理过程中的相演化,得出质量分数10%的Mo完全抑制了固溶处理冷却过程中的马氏体相变,转而促进了纳米尺度的绝热 ω 相

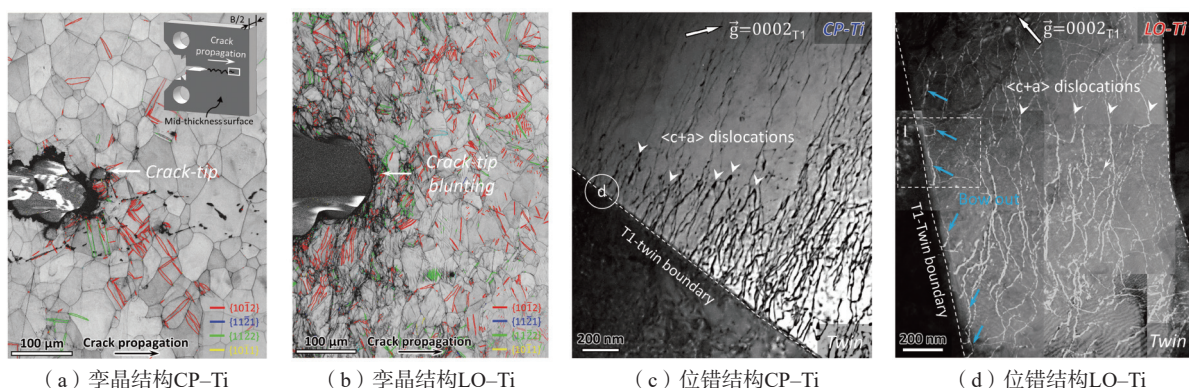


图5 裂纹尖端附近的组织对比^[38]

Fig.5 Comparison of microstructures near crack tips^[38]

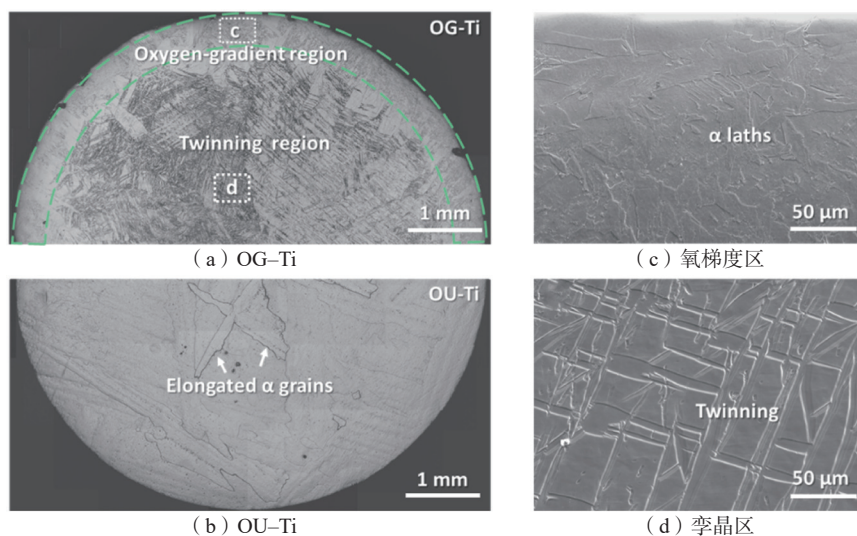


图6 拉伸断口的横截面显微结构^[39]

Fig.6 Cross-sectional microstructures in tensile fractured^[39]

的形成;随后的 350~500 °C 时效过程中,绝热 ω 相粗化形成尺寸更大的等温 ω 相,显著提升了合金的硬度和弹性模量,表明了 Mo 添加于 Ti 合金的时效析出强化效果,但等温 ω 相的析出会严重损害合金的塑性。毛彭龄等^[47]研究了 Ti-Al-Nb-Zr 合金在添加 Mo 之后的性能变化,发现在 920~950 °C 固溶 +500 °C 的时效处理之后,添加质量分数 1%Mo 的合金抗拉强度比不添加的提高了约 150 MPa,而延伸率相当。

Kotov 等^[48]研究了 Mo 含量对 Ni 和 Fe 改性的钛合金的显微组织、超塑性行为和力学性能的影响,发现随着 Mo 含量的增加,合金 β 相的体积分数增加,且温度越高, β 相的体积分数值越大;随着 Mo 质量分数从 1% 提高到 5%,合金的抗拉强度提高了 180 MPa,屈服强度提高了 170 MPa。图 7 展示了合金在 625~775 °C 范围的超塑性拉伸试验结果,可见 Mo 含量的上升对钛合金低温超塑性提升的影响显著,而对高温超塑性提升的影响有限,这是因为 Mo 能够提升低温下合金中 β 相的体积分数。

Huang 等^[49]研究了 Mo 含量对钛合金冲击性能的影响,发现 Ti-6Al 合金的冲击吸收总能量为 30 J,而添加质量分数 2% 的 Mo 后合金的冲击吸收总能量显著上升至 64 J。其中, Ti-6Al 合金的裂纹扩展能量仅为 14.4 J,而 Ti-6Al-2Mo 合金的裂纹扩展能量提升至 46.7 J,因此 Mo 主要通过增加裂纹扩展能量的方式提升钛合金的韧性。分析认为其机制在于:(1) Mo 能够降低 α -Ti 相的价电子密度,减少位错滑移阻力,从而提高位错迁移率;(2) Mo 诱导 α/β 界面处的位错塞积,作为孪晶形核点激活孪晶变形。基于 Mo 对于位错与孪晶的两种机制, Ti-6Al-2Mo 合金裂纹尖端区的塑性区相对扩大,因此耗散了更多的裂纹扩展能量,从而提升了其断裂韧性。证据在于, Ti-6Al 合金的端口呈现准解理脆性断裂的特征,而 Ti-6Al-2Mo 合金的断口呈现韧窝状韧性断裂的特征。

Mo 的合金化可以提升钛合金耐腐蚀能力。Xu 等^[50]研究了二元 Ti-Mo 合金的在室温下磷酸盐缓冲钾钠盐溶液中的抗电化学腐蚀能力,发现随着 Mo 含量增加, Ti-Mo 合金的腐蚀电流密度和钝化电流密度均逐渐降低,表明合金的腐蚀速率下降。Ti-20Mo 合金的腐蚀极化电阻达到了纯钛的 3.2 倍,表明 Mo 的合金化提升了钛合金的耐腐蚀能力。研究者认为其机制在于, Mo 在腐蚀过程中可以促进致密的、保护能力更强的 TiO_2 - MoO_3 复合钝化膜的形成,且 Mo 的合金化不会引入额外的阴离子空位,减少了氧化膜内的缺陷。

3.2 V 元素对钛合金的影响

V 也是钛的同晶型 β 稳定元素^[51]。Ti-V 和 Ti-Mo 二元合金的固态相变特征几乎完全相同。V 同样能与 β -Ti 无限互溶,600 °C 时在 α 钛中溶解度约 3.5%^[9]。V 的添加也会产生晶粒细化的效果。增加 V 含量可提高 β 相的稳定性,细化晶粒,增加晶界数量,减少第二相析出物的总量和单位晶界上的析出物数量,从而降低析出相对合金热暴露的不利影响,提高合金的热稳定性^[52-53]。Collins 等^[54]研究了不同 V 含量的激光增材制造 Ti-V 二元合金的组织,如图 8 所示,发现随着 V 含量的增加,组织中 β 相的体积分数上升, α 板条的平均宽度逐渐减小,并逐渐向粗大 α 晶粒 + 细 α 板条的组织过渡。刘晏硕等^[55]研究了 V 含量对激光熔化沉积 TC4 钛合金的组织及性能的影响,发现随着 V 含量的增加,组织中初生 α 相从粗大针状和短棒状逐渐过渡为细小的组织,并逐渐向等轴晶方向转化;同时,次生 α 相的片层宽度逐渐减小。合金的强度随着 V 含量的增加而提高,主要是因为 V 的固溶强化作用在塑性变形过程中阻碍位错在晶体中运动,使变形难以继续;但当 V 质量分数超过 6% 时,晶内偏析度的增加易引发应力集中,产生二次裂纹,使组织的力学性能分布不均匀,强度略有下降。Masumoto 等^[56]研究表明,当 Ti-V 二元合金中 V 质量分数达到 10% 以上时,合金的淬火组织中会出现 β 相,

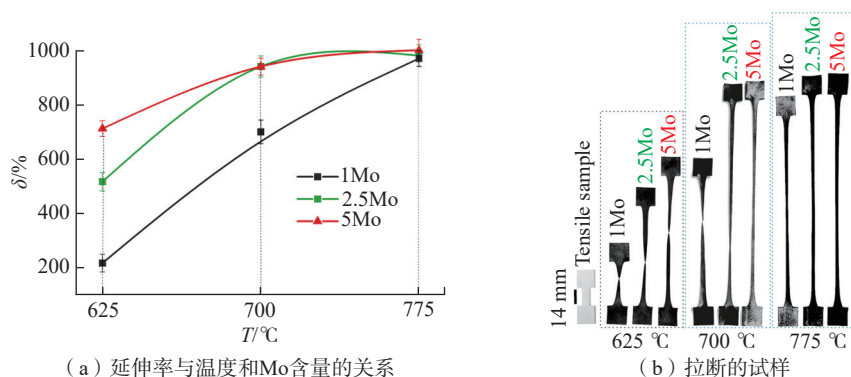
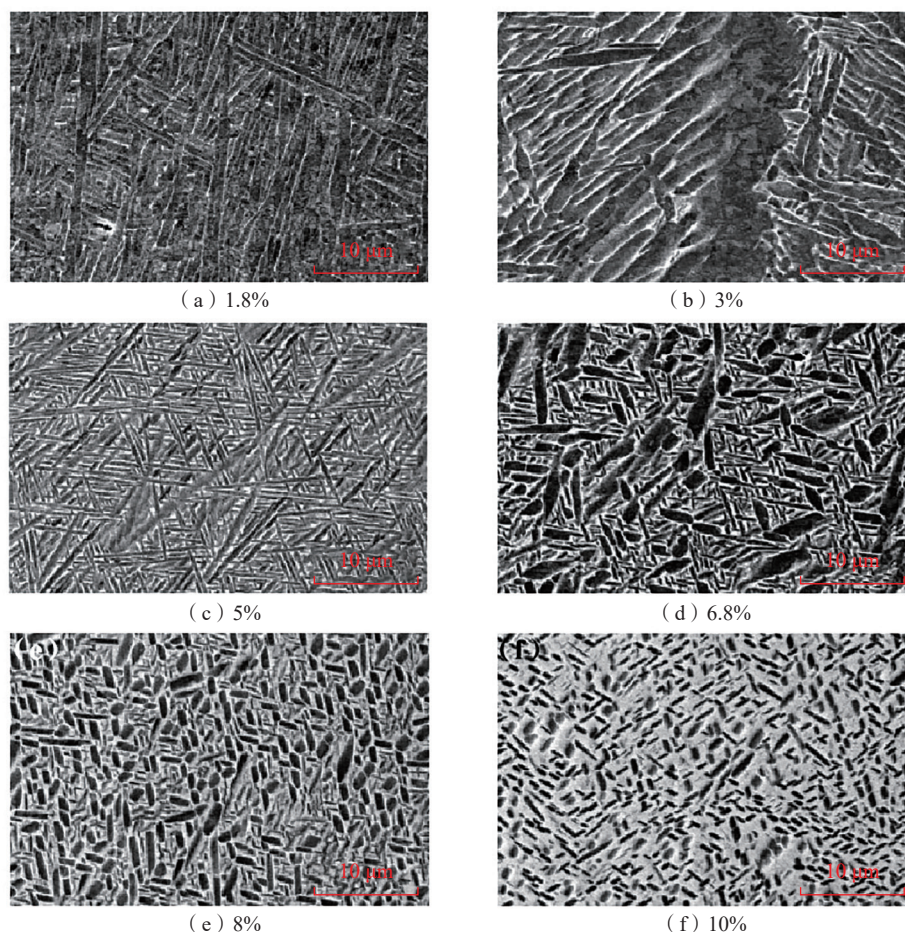


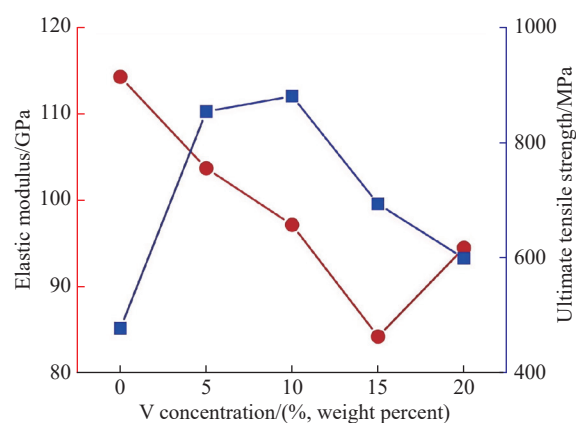
图 7 Ti-Mo 合金的超塑性^[48]
Fig.7 Superplasticity of Ti-Mo alloys^[48]

图8 不同V原子分数的Ti-V二元合金组织^[54]Fig.8 Microstructure of Ti-V binary alloy with different V atomic percent^[54]

而当V质量分数达到16%以上时,合金的淬火组织中将不存在 α 相或马氏体相。

Park等^[57]研究了铸造Ti-V二元合金的弹性模量及抗拉强度与V含量的关系,其结果如图9所示。Ti-V二元合金的抗拉强度随V质量分数的增加先升后降,在10%时达到强度峰值,原因在于V含量较低时,固溶强化起主导作用,而当超过10%后, β 相的粗化使得强度有所下降。Ti-V二元合金的弹性模量随V质量分数的增加先降后升,在15%时达到模量低值,这是因为随着V含量的升高,模量更低的 β 相体积占比增长,而当超过15%后, β 相晶格畸变的增大导致模量有所回升。

An等^[58]研究了V含量对增材制造Ti-6Al-(0, 2, 4)V合金力学性能的影响,结果如图10所示。可见,随V含量的上升,合金的强度增加,而塑性与韧性下降, Ti-6Al-4V合金裂纹扩展能仅有27.18 J,而Ti-6Al则为46 J。研究认为,强度上升的机制在于V的固溶强化作用,而塑性与韧性下降的机制较为复杂。首先,V促进 β 晶粒生长,降低了对裂纹扩展的阻力;另外,V升高引发了组织中针状马氏体的形成,作为硬脆相损害了

图9 Ti-V二元合金的弹性模量及抗拉强度与V含量的关系^[57]Fig.9 Relationship between elastic modulus and tensile strength of Ti-V binary alloys and V content^[57]

合金的韧性。

V的合金化可以提升钛合金耐腐蚀能力。Frayret等^[59]研究了Ti-V二元合金在浓盐酸环境中的腐蚀行为,发现V明显降低钛合金的稳态腐蚀电流,添加质量分数2%的V即可使腐蚀电流峰值降低30%;同时,V

使腐蚀电位正移,使合金更容易进入钝化状态;此外,随V的含量增加,合金的钝化膜溶解速率降低,因此可以认为V能够显著提升钛合金的耐腐蚀性能。研究认为其机制在于,V完全阻止了能够加速腐蚀的 TiH_2 的生成,同时促进了更加耐蚀的钛-钒复合氧化物层的形成,从而减缓了合金腐蚀溶解的动力学。

然而,V的合金化会降低钛合金的高温抗氧化能力^[60-62]。Song等^[61]研究发现,随着V含量的上升,Ti-V二元合金在900℃大气环境中10min的氧化增重显著增加。研究认为V合金化损害钛合金高温氧化性能的机制为:首先,V离子掺杂于 TiO_2 氧化层中,会增加氧空位的浓度,促进氧的内扩散;其次,V的合金化使合金的 β 相含量增加,其晶格间隙相较 α 相更大,因而更有利于氧的内扩散;此外,V会使 TiO_2 相产生晶格畸变,形成氧的内扩散快速通道。Takahashi等^[62]研究发现V能够降低钛合金的氧化活化能,认为V在氧化过程中会形成低熔点的 V_2O_5 氧化物,熔融在钛合金表面氧化物层中形成的孔隙和裂纹严重破坏了氧化层的保护能力。

3.3 Nb元素对钛合金的影响

同样,Nb属同晶型 β 稳定元素,通过固溶强化和晶界钉扎细化 β 晶粒,抑制 α 相析出。添加Nb可以提高钛基合金的强度和抗氧化性^[63-64]。Fu等^[65]研究了Nb含量对近 α 钛合金组织和断裂行为的影响,发现Nb的加入虽然与相构成无关,但显著降低 β 晶粒尺寸、 α 片层间距及 β 相厚度;并且Nb元素的加入可以诱导 Ti-1100 合金中 S_2 型硅化物的析出,这种硅化物作为位错钉扎点,可以增强滑移均匀性,减缓裂纹尖端应力集中。晶粒细化和硅化物析出使得裂纹尖端弯曲倾向改善,因此钛合金断裂韧性随Nb含量的增加而增大。

Huang等^[66]研究了Ti-4Nb合金在不同退火温度

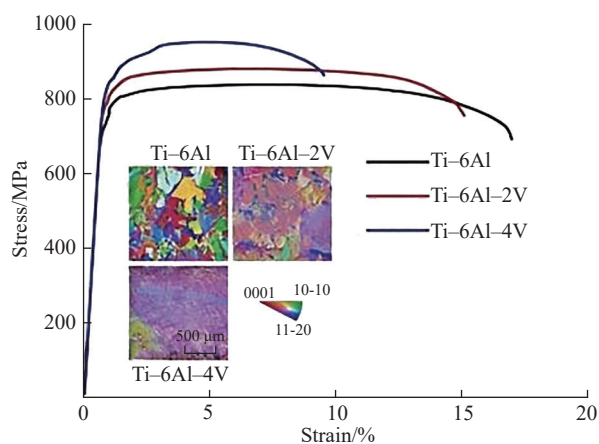


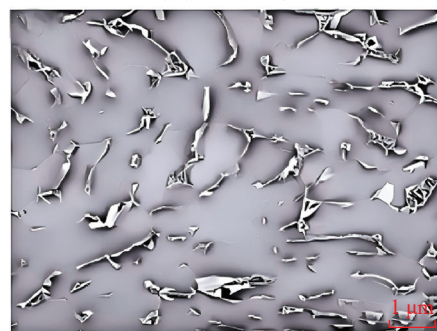
图10 Ti-6Al-xV合金的室温拉伸曲线^[58]

Fig.10 Room-temperature tensile curves of Ti-6Al-xV alloys^[58]

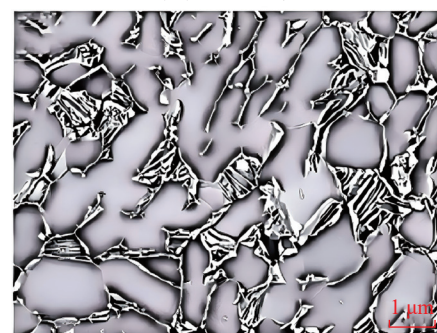
下Nb元素在 α 和 β 相中的分配行为及其对显微组织演化、拉伸性能和冲击性能的影响,由图11中可见,随退火温度升高,Nb在 β 相中质量分数由15.86%降至9.57%,在 α 相中几乎不变。 α 相球化且晶粒内孪生现象增多, β 相由条状、粒状向块状演变,这些组织变化使



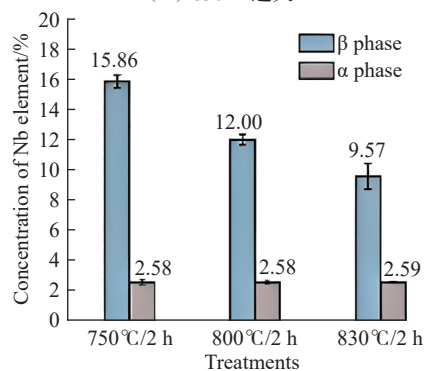
(a) 750℃退火



(b) 800℃退火



(c) 830℃退火



(d) EDS分析

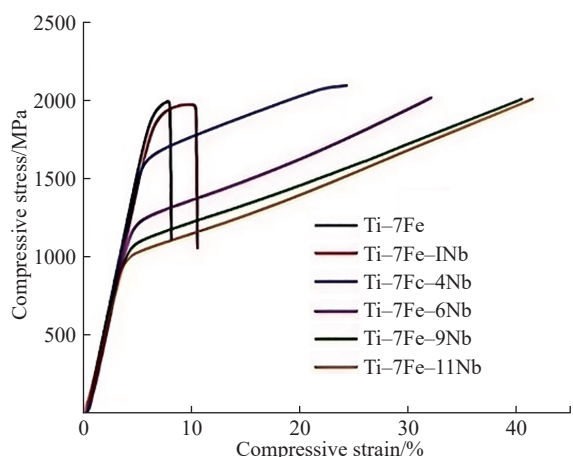
图11 α 相和 β 相中Nb元素的分布^[66]

Fig.11 Partition of Nb element in α and β phase^[66]

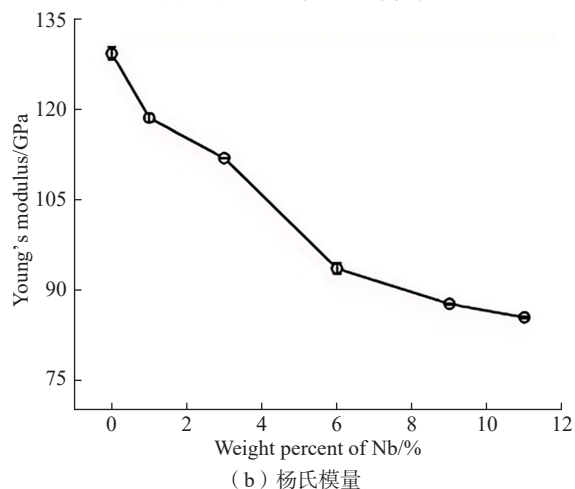
得 β 相对 α 基体强化作用减弱,导致了屈服强度下降, α/β 相失配降低使得裂纹更难传播,因此冲击性能上升。

Haghighi 等^[67]研究发现通过调控 Nb 含量控制 $\beta \rightarrow \alpha''$ 相变行为,是优化 Ti-Fe-Nb 医用钛合金显微组织与综合性能的关键路径。随着合金中 Nb 质量分数从 0 增至 11%, α'' 相体积分数显著降低,最终在 11% 时完全转为单一 β 相组织。 α'' 相是正交结构马氏体,相比 β 相更硬、更脆,随着 β 相稳定性增强,马氏体转变($\beta \rightarrow \alpha''$)被抑制。如图 12 所示,高 Nb 合金强度略低,但优于商业合金,弹性模量低,接近人骨;塑性变形行为最显著,适用于对弹性和生物相容性要求更高的植入物。

Gabriel 等^[68]研究了 Nb 含量对热处理 Ti-10Mo-xNb 合金硬度和弹性模量的影响,在 Ti-10Mo-xNb 合金中,随着 Nb 含量的增加,亚稳态 ω 相和马氏体 α' 相逐渐减少, β 相占比提高,合金硬度略有下降而弹性模量显著降低;Ti-10Mo-3Nb 合金在硬度与模量比值方面表现出最优的综合性能,显示出 Nb 在调控“高强度-



(a) 室温压缩应力-应变曲线



(b) 杨氏模量

图 12 Ti-7Fe-xNb 合金的应力应变曲线和杨氏模量^[67]

Fig.12 Tress-strain curves and Young's modulus of Ti-7Fe-xNb alloys^[67]

低模量”平衡方面的潜力。Nb 作为一种无毒、可生物相容的 β 稳定剂,能够通过调控相变行为与组织结构,在提升钛合金延展性、降低弹性模量、维持强度水平等方面发挥关键作用,具有重要的工程应用与生物医学价值。

3.4 Fe 元素对钛合金的影响

不同于 Mo、V 与 Nb, Fe 会与 Ti 形成金属间化合物,属于共析型 β 稳定元素^[69-70], Ti-Fe 二元相图见图 13^[71]。Fe 在 β -Ti 相中的最大固溶度为 25% (1085 $^{\circ}\text{C}$); Fe 在 α -Ti 相中最大固溶度为 0.5% (590 $^{\circ}\text{C}$),并在此温度发生 $\beta \rightarrow \alpha + \text{TiFe}$ 的共析转变,共析点在约 15% 的位置^[9]。Fe 元素的添加能够起到稳定 β 相的作用,抑制 α 相的析出和长大,可以显著减少钛合金晶粒尺寸,改变钛合金中相的组成。

Lu 等^[72]研究了 Fe 对 Ti-6Al-xFe 合金退火组织的影响,如图 14 所示;随着 Fe 含量的上升, Ti-6Al-xFe 合金的组织由羽毛状的 α 相逐渐转变到粗大的 α 板条结构到等轴 α 相,而组织中 β 相体积分数显著上升。文献 [73-75] 得到了相似的结果,可以相互验证。TiFe 析出相可以作为 α 相的形核点,促进纳米 α 相的形成^[76]。

Ti 的原子半径为 0.147 nm,而 Fe 的原子半径为 0.127 nm,两者差异明显。因此,当钛合金中固溶的 Fe 含量增多时,晶格畸变会上升,在变形过程中晶粒内部可动位错的滑移阻力增大,因而会提高合金的强度^[77]。微量的 Fe 元素添加,即可显著影响钛合金的力学性能。陈冬梅等^[78]研究了 TA15 合金中 Fe 质量分数由 0.05% 提升至 0.19% 后合金的性能变化,发现随着 Fe 含量的增加,合金强度产生了 15 MPa 的小幅提升,这是由于 Fe 元素在 β 相内富集,起到了固溶强化作用;但 Fe 含量增加后,合金 500 $^{\circ}\text{C}$ 下持久寿命明显降低,这是因为高温下 Fe 元素扩散迅速,加速了原子和空位的运

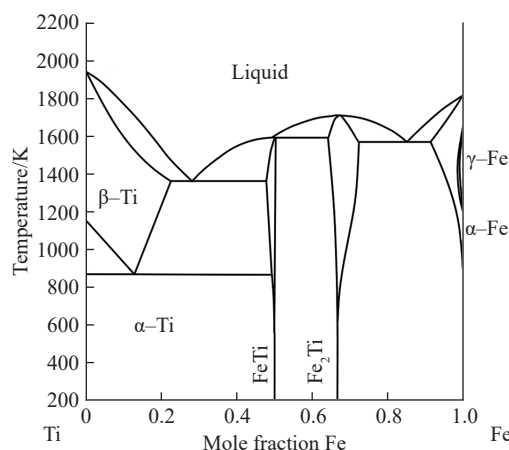


图 13 Ti-Fe 二元相图^[71]

Fig.13 Binary phase diagram of Ti-Fe^[71]

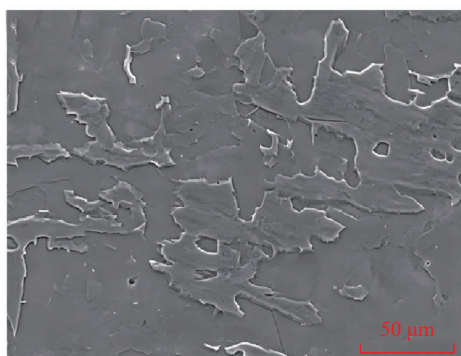
动,导致位错攀移阻力下降,继而影响持久寿命。樊亚军等^[79]研究了 Fe (质量分数 0.04%~0.26%)对轧制钛 Ti-6Al-4V 合金力学性能的影响(表 1),发现微量 Fe 元

素的添加能够显著提升 Ti-6Al-4V 合金的屈服强度与抗拉强度,略微提升硬度与弹性模量,并使断后延伸率略微下降。由于微量 Fe 元素的添加并不会显著改变合金中的 β 相体积分数,因而认为微量 Fe 元素提升钛合金强度主要由 Fe 的固溶强化作用贡献。

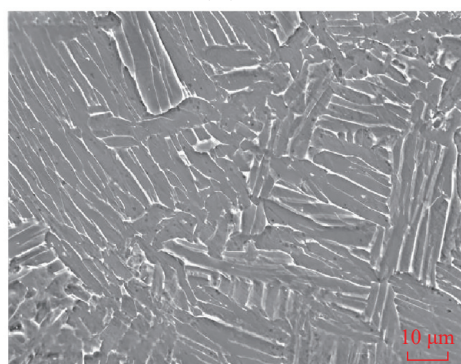
微量 Fe 元素添加改善钛合金的断裂韧性。Chen 等^[80]通过在 TC4 合金中添加质量分数 0.55% 的 Fe,将合金的 K_{IC} 由 $91 \text{ MPa} \cdot \text{m}^{1/2}$ 显著提升至 $110 \text{ MPa} \cdot \text{m}^{1/2}$;认为微量 Fe 导致的弹性模量改变是合金增韧的主要机制: Fe 作为强 β 稳定元素,在 β 相中优先置换 V 原子,引发更强烈的晶格收缩,提高了模量,贡献了约 70% 的韧性增益。此外,微量 Fe 提高了 β 相模量,还导致 α/β 界面结合力增强,迫使裂纹沿锯齿状路径扩展,消耗了额外能量。

微量的 Fe 元素损害近 α 钛合金的蠕变性能。Mishra 等^[81]研究了 Fe 质量分数由 0.24% 降至 0.0065% 的 IMI834 近 α 型高温钛合金的蠕变行为,发现在相同组织条件下,高 Fe 合金的断裂寿命和蠕变应变均显著低于低 Fe 合金的;高 Fe 合金的蠕变激活能更低,位错攀移更加活跃。研究者认为其机制在于,Fe 在 α -Ti 中会形成 Fe-空位对,加速 α -Ti 中的扩散行为,促进了合金的蠕变。

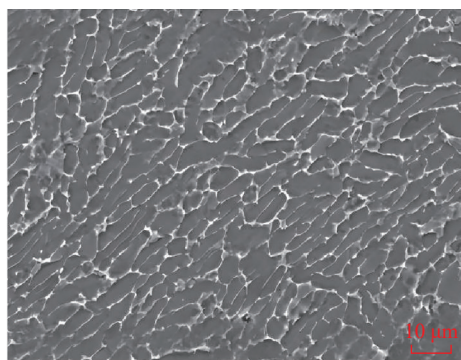
大量 Fe 的合金化提高钛合金的强度。Meng 等^[74]研究了粉末冶金法制备的 Ti-6Al-4V-(0,2,4)Fe 合金的性能特征,发现合金的屈服强度由 828 MPa 提高至 1117 MPa 和 1342 MPa;通过计算分析,Fe 对合金的固溶强化作用主导了合金强度的提升;此外,Fe 合金化导致的 α/β 层片结构细化对合金强度的提升也有贡献。Fe 细化组织的机制在于,Fe 原子在相变时被排向 α/β 界面,阻碍了 α 板条的粗化。然而,大量 Fe 的添加会迅速劣化合金的塑性,合金延伸率由 2Fe 合金的 8.2% 骤降至 1.6%。这是因为大量 Fe 固溶于 β 相,会使合金中的硬质 β 相与软质 α 相产生过高的强度失配,塑性变形集中分布在晶界 α 层,引发了早期裂纹,因而降低了



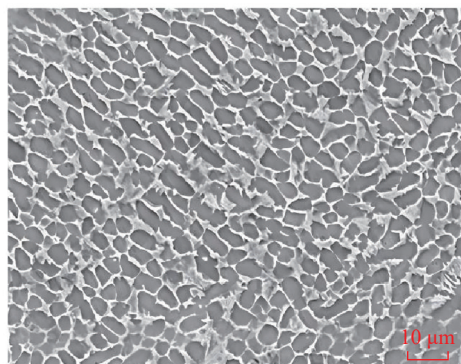
(a) 0Fe



(b) 1Fe



(c) 2Fe



(d) 4Fe

图 14 Ti-6Al-xFe 的组织^[72]

Fig.14 Microstructure of Ti-6Al-xFe alloys^[72]

表 1 Fe 对轧制态 Ti-6Al-4V 合金性能的影响^[79]

Table 1 Effect of Fe on the properties of rolled Ti-6Al-4V alloy^[79]

Fe 的质量 分数 /%	抗拉强度 σ_b/MPa	屈服强度 $\sigma_{0.2}/\text{MPa}$	断后 延伸率 /%	硬度 ($\text{HV}_{0.5}$)	弹性 模量 /GPa
0.04	923	812	20.0	285	105
0.08	938	844	19.5	290	109
0.13	950	888	19.0	295	109
0.18	978	921	19.0	298	110
0.26	1030	996	18.5	302	113

合金的塑性。类似的结论在 Sjafrizal 等^[82]针对 Ti-Al-xFe 合金的工作中也有提及,可以证明 Fe 对钛合金性能独立的影响作用。

大量 Fe 的合金化提高钛合金的耐腐蚀性能。Lu 等^[72]发现 Fe 含量的增加可以提升 Ti-6Al-xFe 合金耐电化学腐蚀的能力,原因在于 Fe 可以加速钛合金电化学腐蚀过程中的钝化膜形成,同时形成的钝化膜为 $\text{TiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Fe}_2\text{O}_3$ 的多层结构,相对 Ti-6Al 合金的钝化膜厚且致密。对比 Ti-6Al-4V 合金, Ti-6Al-4Fe 合金的腐蚀电流密度约为前者的 1/3,而极化电阻则约为前者的 2 倍,且钝化膜致密稳定。研究者认为其机制在于, $\text{Fe}^{3+}/\text{Fe}^{2+}$ 离子能够填充钝化层 TiO_2 中的空位,从而减少阴离子空位;此外,钝化过程形成的额外 $\text{Fe}_2\text{O}_3/\text{Al}_2\text{O}_3$ 多层结构能够起到内层屏障作用,显著抑制电化学腐蚀过程中膜的溶解,因而提升了钛合金的耐蚀性能。

4 中性元素对钛合金的影响

4.1 Zr 元素对钛合金的影响

Zr 与 Ti 在元素周期表中同属第四副族,在含量较低时,对钛合金的 α/β 相转变温度的影响很小,属于钛合金的中性元素^[83-84]。Zr 在 α -Ti 和 β -Ti 钛相中均能无限固溶^[85]。Zr 的原子半径为 0.160 nm,在钛合金中主要起固溶强化作用^[86-87]。此外,在 α 钛合金中, Zr 与 Al 共同添加还可以起到稳定 α 相的作用,因此 Zr 也是钛合金中常见的合金化元素。此外, Zr 与一定含量的 Fe 还能在钛合金中形成 ZrFe_2 相,可以通过合适的热处理调控其尺寸与分布,使合金得到强化^[9]。

钛合金中添加 Zr 可获得更细小的两相组织,显著减小晶粒尺寸,并提高强度^[88]。王宜平等^[89]研究了 Zr 合金化对 α 钛合金变形孪晶和力学性能的影响;发现在排除 O 元素影响的条件下,相比不含 Zr 的 TA4 合金,添加质量分数 15.9% Zr 的 TA4-Zr 合金的屈服强度提升近 200 MPa,证实了 Zr 对钛合金的固溶强化作用。此外, Zr 的合金化显著促进了 TA4-Zr 合金在压缩过程中 $\{10\bar{1}2\}<10\bar{1}1>$ 变形孪晶的形成,进一步提升了合金的拉伸-压缩屈服不对称性。费峻桢等^[90]的研究表明, Zr 能够显著提高 α -Ti 相 $\langle a \rangle$ 位错柱面滑移的 CRSS,因而可以提高钛合金的强度。

Jing 等^[91]研究了 Zr 合金化对 Ti-6Al-4V 合金组织与性能的影响,发现随着 Zr 含量的上升,合金组织中的 β 相含量增加,说明 Zr 能够扩大 TC4 合金的 β 相区并降低 β 相变温度。此外,当 Zr 质量分数为 5%~15%,原始 TC4 合金中的细小 α 板条转变为了层片状六方马氏体;当 Zr 质量分数达到 20% 时转变为细针状六方马氏体,表明 Zr 能够降低 TC4 合金的马氏体转变起始温度,促进针

状马氏体的形成。图 15 展示了 Ti-6Al-4V-xZr 合金的力学性能,随 Zr 含量的增加,合金强度持续上升,由 0Zr 合金的 996 MPa (抗拉强度)/872 MPa (屈服强度) 上升至 20Zr 合金的 1317 MPa (抗拉强度)/1078 MPa (屈服强度)。研究者认为强度上升的主导机制是 Zr 的固溶强化效应。此外, Zr 合金化促使 α/α' 相细化达成细晶强化,也为合金强度提升做出了贡献。然而随 Zr 含量的增加,合金塑性有所下降,这是由于元素分配导致的晶界 α 相软化。

Han 等^[92]对 Zr 质量分数 0~20% 的 Ti-xZr 二元合金在大气环境下的高温氧化行为进行了研究,发现 Ti-5Zr 合金具有最佳的抗氧化性能,其氧化增重仅为 CP-Ti 的 2/3。随着 Zr 含量继续升高,合金的抗氧化能力劣化。此研究认为,钛合金中 Zr 的添加促进形成致密、稳定的 $\text{TiO}_2/\text{ZrO}_2$ 复合氧化膜,能够有效阻止氧扩散;然而 Zr 含量增加会加剧钛合金晶格畸变,诱发晶界缺陷与层错,加速氧的内扩散;同时,过量的 ZrO_2 会引发表面应力,导致氧化膜开裂,因此 Zr 对钛合金抗氧化性能的提升具有临界阈值。

Zr 的添加提升钛合金的耐腐蚀性能^[93-94]。Xia 等^[94]对 Zr 质量分数 0~50% 的 Ti-6Al-4V-xZr 合金在 Cl 离

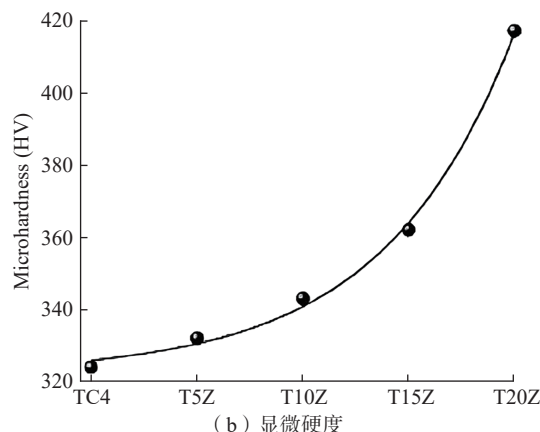
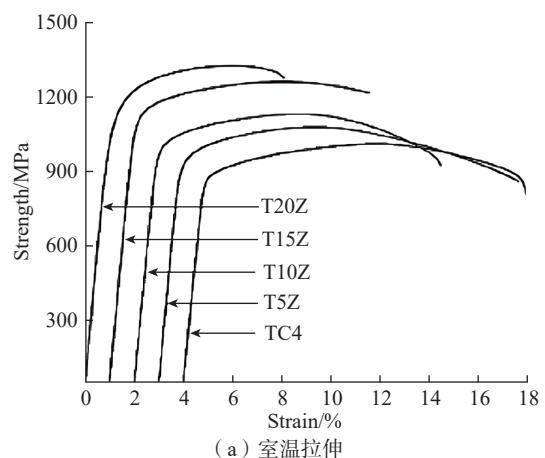


图 15 Ti-6Al-4V-xZr 合金的力学性能^[91]

Fig.15 Mechanical properties of Ti-6Al-4V-xZr alloys^[91]

子溶液环境中的腐蚀行为进行了研究,发现随 Zr 含量增加,合金在 Cl 离子环境中的腐蚀电位正向移动,腐蚀电流密度显著降低,腐蚀失重也显著下降;这表明 Zr 的添加提升了钛合金的耐腐蚀钝化能力,且效果随 Zr 含量的增加而增强。研究认为其机制在于, Zr 的添加形成了更加致密的 Zr-Ti 的双氢氧化物钝化膜,增强保护性;同时, Zr 的添加细化了组织中的 α 板条,钝化膜更致密均匀。

4.2 Sn 元素对钛合金的影响

类似于 Zr, Sn 在原子分数 <0.1% 时,对钛合金的 α/β 相转变温度的影响很小,属于钛合金的中性元素^[95]。Sn 的添加能够改变 α 与 $\alpha+\beta$ 钛合金的显微组织状态。Najafizadeh 等^[96]对 Ti-xSn 二元合金的研究表明,随着 Sn 含量的增加,合金的 α 片层厚度会逐渐下降,这是因为 Sn 的加入促进了 α/α' 层状结构的形成,取代了纯钛中的单一 α 层状结构,如图 16 所示。Rajadurai 等^[97]对 Ti-6Al-4V-xSn 合金的研究表明,随着 Sn 含量的增加,TC4 合金的魏氏体结构逐渐被抑制,与基体 TC4 合金的 $\alpha+\beta$ 魏氏体组织状态不同;当 Sn 质量分数超过 4% 后,合金组织中出现了等轴 α 晶粒和沿晶界分布的 β 相,这是因为 Sn 作为 α 相稳定元素,改变了 α 和 β 相的相对比例,促进 α 相形成并相对抑制了 β 相的生长。此外, Sn 还会显著影响 β 钛合金的相变行为。Cai 等^[98]研究表明,随着 Sn 含量增加, Ti-17Nb-xSn 合金的马氏体相变开始温度显著下降,当 Sn 原子分数达到 4% 时,合金在室温下完全由 β 相组成,马氏体相变被完全抑制;同时, Sn 有效抑制 ω 相的形成,原子分数 1%~4% 的 Ti-17Nb 合金中均未观察到 ω 相;这表明与在 α 与 $\alpha+\beta$ 钛合金中的

情况不同,在 β 钛合金中, Sn 可以提高 β 相的稳定性。

Sn 的合金化提高 α 钛合金的屈服强度与硬度。如图 17 所示^[96],随着 Sn 的质量分数由 0% 增至 15%, Ti-xSn 合金的屈服强度由 550 MPa 增至 900 MPa,显微硬度由 233HV 增至 310HV,这与 Sn 的合金化带来的细晶强化与固溶强化有关。然而, Sn 的合金化并不能提升 $\alpha+\beta$ 钛合金的强度,相比 Ti-6Al-4V 合金,添加质量分数 6% 的 Sn 后, Ti-6Al-4V-2Sn 合金的屈服强度由 1523 MPa 降至 1335 MPa,这与 Sn 的添加使合金中的 α 片层等轴化有关^[97]。

5 稀土元素对钛合金的影响

稀土元素是元素周期表中第三副族非放射性元素的总称。在钛合金中添加微量的稀土元素可有效改善合金的组织结构、力学性能和抗氧化性能^[99-101]。

Deng 等^[102]研究了微量 Sc 元素添加对 TC4 合金组织与性能的影响,发现 Sc 在钛合金中以固溶在 α -Ti 相中的 Sc、析出的 Sc_2O_3 颗粒与共格 Al_3Sc 相的形式存在。添加质量分数 0.3% Sc 的 TC4 合金的组织发生了显著细化。微量 Sc 的添加提升了抗拉强度与蠕变性能,将稳态蠕变速率降低了 5%。其机制在于,微量的 Sc 促进了共格 Al_3Sc 相与 Ti_3Al 相的析出,钉扎了位错的滑移与攀移,因此实现了对钛合金的强化。

Zeng 等^[103]研究了微量 Y 元素添加对 Ti-6Al-2.8Sn-4Zr-0.5Mo-0.4Si 合金组织与性能的影响,发现 Y 在钛合金中以亚微米与微米尺寸的 Y_2O_3 颗粒形式存在。添加质量分数 0.1%~0.2% Y 的钛合金的疲劳极限较基体合金均发生了显著的下降(11.2%~17.4%)。其原因在

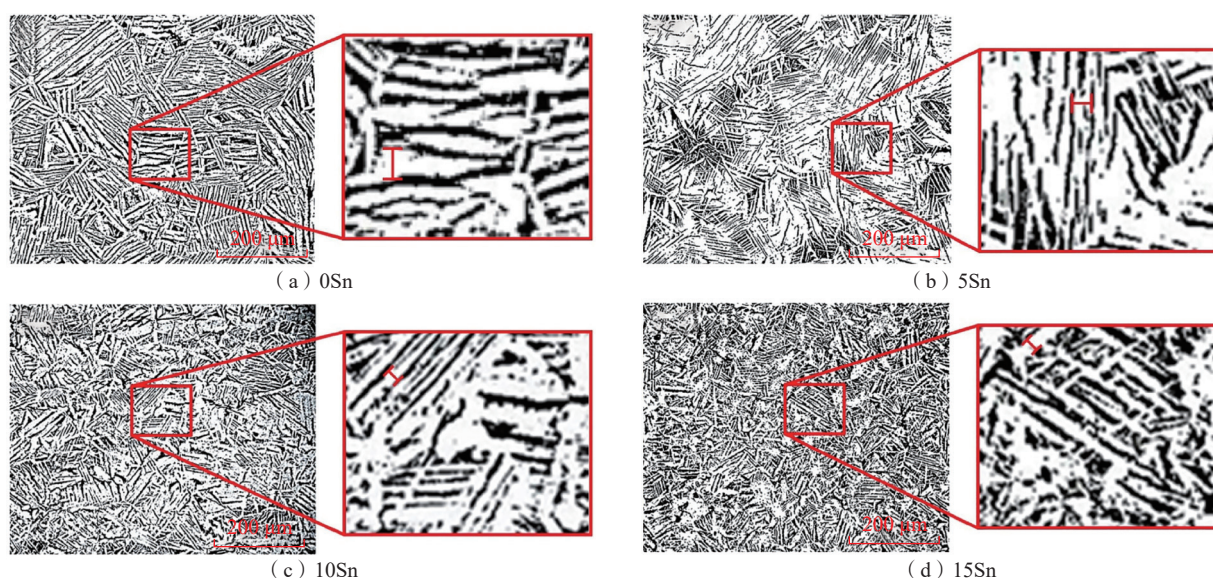


图 16 Sn 含量对于 Ti-Sn 合金显微组织的影响^[96]

Fig.16 Effect of Sn concentration on microstructure of Ti-Sn alloys^[96]

于,大尺寸 Y_2O_3 颗粒与基体存在热膨胀系数差异,导致局部应力集中,引发颗粒开裂。

Zhu 等^[104]研究了微量 La 元素添加对纯钛组织与性能的影响,发现微量的 La 会与纯钛中的杂质元素

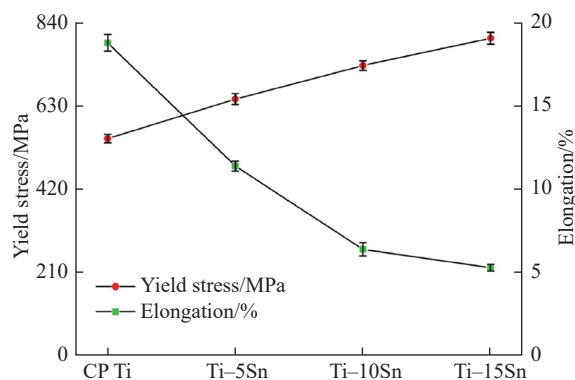
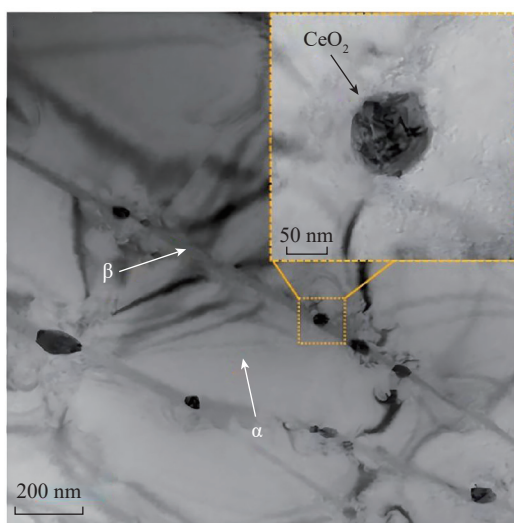


图 17 Sn 含量对于 Ti-Sn 合金室温拉伸性能的影响^[96]

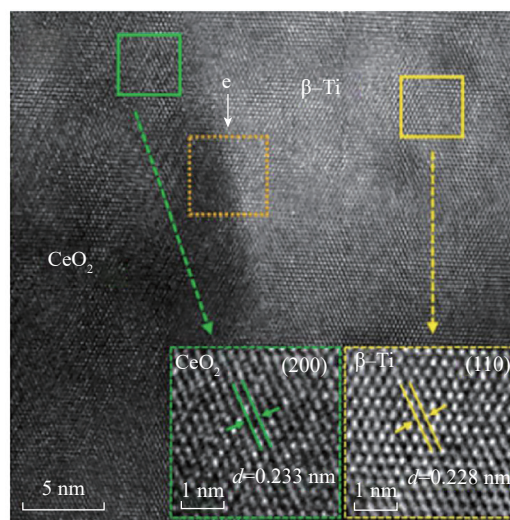
Fig.17 Effect of Sn concentration on room-temperature tensile properties of Ti-Sn alloys^[96]

O 与 Fe 结合,在晶界形成珠状析出相,包括纳米(La, Fe)相与微米 La_2O_3 颗粒。微量 La 可以显著细化晶粒,La 质量分数 0.5% 时,平均晶粒尺寸由 $270 \mu m$ 降至 $160 \mu m$ 。随着 La 含量增加,纯钛的延伸率逐渐增加,La 为 0.5% 时达到纯钛的近两倍,但强度降低了 20%。这主要是因为 La 清除了固溶 O、Fe 杂质,减少了晶格畸变,提升塑性的同时降低了强度。但当 La 含量过高时, La_2O_3 颗粒尺寸变大,会诱发脆性断裂,降低塑性。

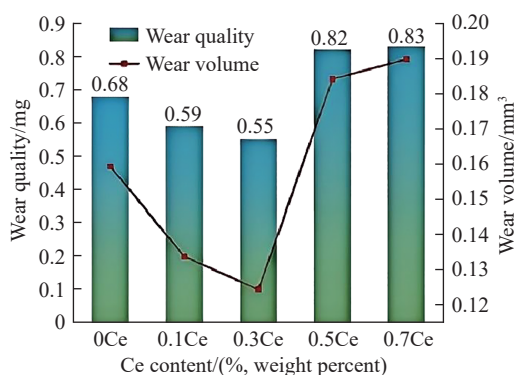
Xu 等^[105]研究了微量 Ce 元素添加对纯钛组织与性能的影响,发现 Ce 会吸附纯钛中的氧杂质形成 CeO_2 纳米颗粒(图 18 (a)),与 β -Ti 基体存在完全共格关系(图 18 (b)),能够抑制晶粒长大。微量 Ce 的添加不会对纯钛强度产生显著影响,但质量分数 0.3% 的 Ce 添加会明显提升纯钛的塑性,而过量(0.7%)的 Ce 添加则会损害塑性,如图 18 (c) 所示。其机制与上文中 La 的类似。此外,0.3% Ce 添加可以显著提升纯钛的磨损性能(图 18 (d)),这是因为 CeO_2 纳米颗粒增强了材料的界



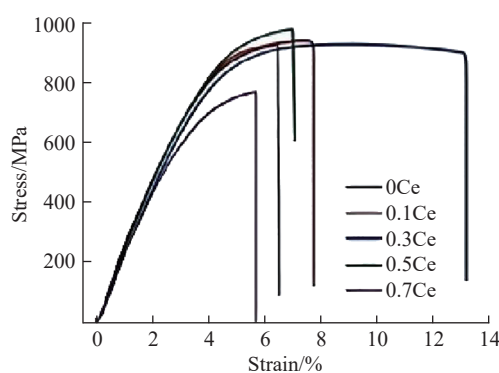
(a) CeO_2 纳米颗粒



(b) CeO_2/β -Ti 界面



(c) 拉伸性能



(d) 磨损性能

图 18 添加 Ce 的钛合金及性能^[105]

Fig.18 Titanium alloy and properties with Ce^[105]

面抗剪切能力。Yan 等^[106]研究了微量 Nd 元素添加对激光增材制造 TC11 合金组织与性能的影响,发现 Nd 在快速凝固过程中会形成均匀分布的 Nd₂O₃ 颗粒,从而细化凝固 β 晶粒;质量分数 1.0% 的 Nd 添加,将合金的抗拉强度由 991 MPa 提升至 1037 MPa,这是由于细晶强化与 Nd₂O₃ 颗粒析出强化的共同作用;然而塑性由 13.8% 降低至 7.7%,原因在于大尺寸的 Nd₂O₃ 颗粒在拉伸过程中破碎成为裂纹源,诱发合金断裂。Li 等^[107]研究了 Gd 元素添加对纯钛组织与性能的影响,发现 Gd 的添加使组织从片层状转变为等轴晶(质量分数 0~8% Gd)并细化了组织;Gd 在纯钛中以富 Gd 相、Gd 氧化物以及固溶于 α-Ti 的 Gd 的形式存在;4% Gd 的添加显著提升了纯钛的高温性能,抗拉强度由 90 MPa 增至 102 MPa,延伸率由 30% 升至 49%,由细晶强化所致;4% Gd 的添加提升了纯钛的耐蚀性能,是因为富 Gd 相的腐蚀电位比 Ti 基体更低,起到了保护作用。

由此可见,稀土元素在钛合金中多以异质形核氧化物颗粒的形式存在,一方面可以细化钛合金的晶粒,另一方面能够降低钛合金基体的氧含量从而提升塑性,此外还可以通过析出作用强化钛合金。但是稀土元素的含量过多则会导致氧化物颗粒粗化,产生裂纹源,损害钛合金的塑性与疲劳性能。

6 钛合金设计的经典理论与最新方法

类似于铝、钢等合金体系,钛合金的成分设计研究始于试错法。试错法又称经验法,是一种通过反复调整合金元素的种类与含量,并进行大量的试验验证,逐步逼近预期性能目标的合金设计方法^[108]。这种方法在钛合金发展的初期,如 Ti-6Al-4V 等经典牌号的诞生过程中,发挥了不可或缺的作用^[109]。其主要优点在于直观性,能够在成分设计理论尚不完善的阶段推动钛合金材料的发展。但也存在突出的缺点,例如高昂的时间与成本消耗、低效的设计与研发效率、缺乏理论依据难以重复,使之逐渐被更高效的设计方法取代。

为了摆脱试错法的盲目性,研究人员基于合金元素对钛合金相变影响的规律,提出了半经验的等效元素含量设计理论,其中最具代表性的是 Mo 当量法和 Al 当量法。如前文所述,钛的同素异构转变(β→α)特征对于钛合金的组织与性能具有决定性的作用。Mo 当量法是一种用于预测钛合金中 β 相稳定性的经验方法,其核心思想在于将各种 β 稳定元素对 β 相的稳定化效果,通过一个经验系数换算成等效的 Mo 含量,称之为 Mo 当量 [Mo]_{eq}。其通用表达式为^[110-111]

$$[\text{Mo}]_{\text{eq}} = \text{Mo}/1 + \text{Ta}/4 + \text{Nb}/3.3 + \text{W}/2 + \text{V}/1.4 + \text{Cr}/0.6 + \text{Ni}/0.8 + \text{Mn}/0.6 + \text{Fe}/0.5 + \text{Co}/0.9 - \text{Al}/1 \quad (1)$$

式中为质量分数。随着 Mo 当量的提高,钛合金的 β 转变温度下降,平衡条件下的 β 相含量升高,强度升高^[112]。Mo 当量法因简便直观而被广泛应用,被认为是获得高强度钛合金最简便有效的途径之一。尤其是在高强度 β 钛合金和亚稳 β 钛合金的初步成分筛选中,Mo 当量通常被控制在 11~17^[113]。

类似 Mo 当量法,Al 当量法的核心在于将不同 α 稳定元素的对 α 相稳定化的效果换算成等效的 Al 含量,称之为 Al 当量 [Al]_{eq}。其通用表达式为^[114]

$$[\text{Al}]_{\text{eq}} = \text{Al}/1 + \text{Sn}/3 + \text{Zr}/6 + \text{Ga}/2 + \text{O}/0.1 \quad (2)$$

Al 当量法在 α 型和近 α 型钛合金的设计中具有指导意义,可以快速评估新成分对 α 相稳定性以及与 α 相相关的性能,例如蠕变抗力、高温强度等的影响。Rosenberg^[115]认为将 Al 当量控制在 8 以内,可以保证合金具有可以接受的热稳定性。

然而作为半经验性的设计方法,Mo 当量法与 Al 当量法的局限性也非常明显。一方面,当量法只能预测平衡态下的相稳定性,无法精确描述复杂的相变过程,因此不能有效预测 ω、α' 等有害脆性相的形成,也无法为后续的固溶、时效等热处理工艺提供任何指导^[116];另一方面,当量法仅简单地将各元素作用线性叠加,忽略了元素之间复杂的交互、协同作用,不同情况与应用场景下的当量系数通常存在差异^[111,114]。因此,当量法的预测精度有限,尤其难以处理复杂多元体系和非平衡过程。

随着材料计算方法的发展与进步,钛合金设计逐渐摆脱了经验或半经验法的约束,从理论层面发展了一系列的成分设计与性能预测方法,其中最为典型的为 d 电子理论与 CALPHAD 方法。d 电子理论是以 Morinaga^[117]为首的日本科学家提出的一种基于第一性原理电子轨道计算的合金设计方法,将合金的微观组织、变形模式、宏观性能与过渡族金属元素价电子中的 d 电子轨道特征联系起来,从电子理论的层面解释了合金化的效应。d 电子理论引入两个关键参数用于描述电子的行为:键序(Bond order, BO)是描述相邻原子电子云重叠程度的参数,反映了合金化原子与钛原子之间共价键的强度,即合金元素的固溶强化能力;过渡元素 d 电子能级(M element d-electron energy level, Md)是描述过渡金属 d 电子轨道能级的参数,反映了合金化原子与钛原子之间的电子迁移情况,即形成金属间化合物与析出相强化的能力^[118]。将计算得到的不同合金化元素的 BO 与 Md 值在二维空间内线性叠加,就可以用于预测不同成分合金的性质,例如预测钛合金的稳定相组成类型(图 19)、变形模式与马氏体相变情况(图 20)等^[117]。

通过 d 电子理论, Morinaga 等^[119]设计了一种 β 型高

强 Ti-13V-3Cr-2Nb-2Al 合金,抗拉强度达到了 1500 MPa。此外, d 电子理论在生物钛合金开发^[120]、 β 相稳定性控制^[121] 等领域取得了显著的成功。然而,尽管 d 电子理论相较当量法具备了物理理论内涵,然而仍存在局限性。首先,受限于时代,其对电子轨道的计算基于简化的团簇模型,本质上是一种半定量的简化方法;其次,对于近 β 或 $\alpha+\beta$ 合金的预测可靠性有所下降,适用范围受限^[122]。

CALPHAD 方法是一种基于计算热力学的材料设计方法,其核心思想是通过建立描述体系中各个相的吉布斯自由能(Gibbs free energy)模型,来计算多元多相体系的相平衡关系和热力学性质^[123]。其中的热力学参数由针对大量二元、三元体系的试验相图与热力学数据的拟合得到,并通过内插以及外推的方法,推断与合金成分及温度有关的相图、相成分、相分数、相变驱动

力等一系列热力学关键信息,从而为合金设计提供依据^[124-125]。CALPHAD 方法在新型钛合金的设计与开发中成果显著。Zou 等^[126] 通过 CALPHAD 方法筛选设计了 Ti-26Nb-4Zr-4Sn-1Mo-Ta 医用钛合金,具有极低的弹性模量(36.6 GPa); Ding 等^[127] 利用 CALPHAD 方法筛选设计的低成本高强韧 Ti-6Al-10.9Cr 合金具有超细的 α 相结构,其屈服强度达到了 1437 MPa。针对航空航天极端服役环境, CALPHAD 方法被用于指导开发具有优异高温相稳定性的钛合金。例如, Lu 等^[128] 设计的新型 TiVTa 系合金,在不同温度下都能保持单一的 BCC 相,展现出优秀的热稳定性。

相比 d 电子理论, CALPHAD 方法在精确计算钛合金的 β 相转变温度、各相的析出温度区间和平衡相比例方面更加准确,可以为制定和优化固溶、时效等热处理

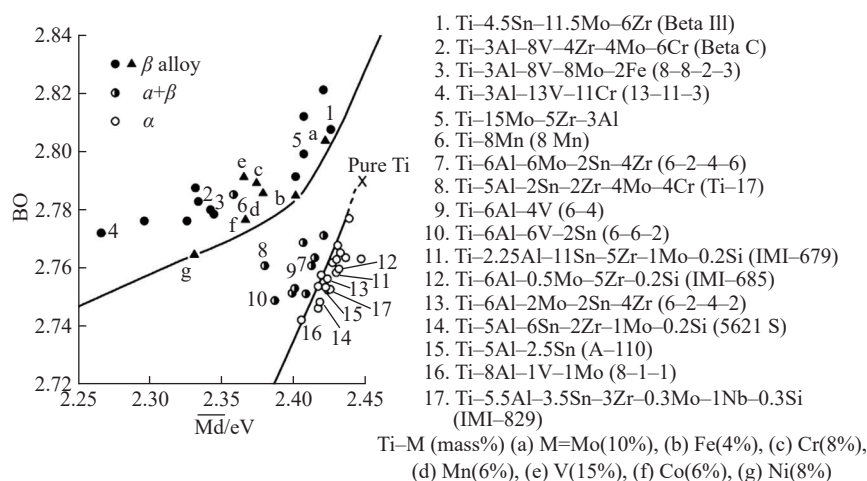


图 19 依据 BO-Md 方法将商用钛合金分为 α 型、 $\alpha+\beta$ 型和 β 型 3 类合金^[117]

Fig.19 Grouping of commercial titanium alloys into three types of α , $\alpha+\beta$ and β alloys on the BO-Md diagram^[117]

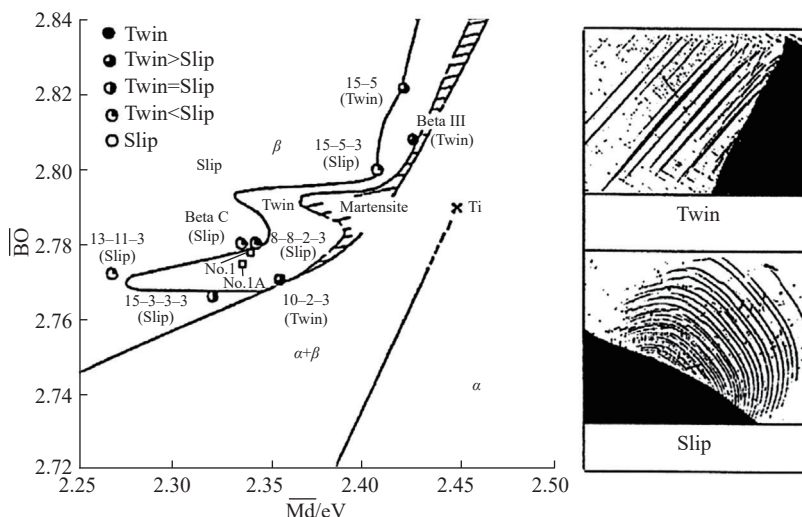


图 20 依据 BO-Md 方法判断钛合金的滑移 / 孪晶变形模式切换和马氏体相变区域^[117]

Fig.20 Slip/twin boundary and martensite region on BO-Md diagram^[117]

理工艺提供精确的理论指导,从而实现对合金显微组织和最终性能的精细调控。然而, CALPHAD 方法亦有其局限所在。一方面, CALPHAD 方法对于数据库的依赖性极强,尽管数据库不断完善,但对于包含多种微量元素的复杂体系,以及亚稳相和界面能等数据的准确性仍显不足,降低了外推预测的可靠性^[129];另一方面, CALPHAD 本质上是计算平衡或亚稳平衡态的方法,对于远离平衡的快速凝固、马氏体相变等极端条件下的过程, CALPHAD 方法的设计与预测能力不足^[124]。

总的来说,传统的钛合金设计方法主要依赖“试错法”和各种半经验、数据集模型,研发周期长、成本高、范围窄,应用受限。进入 21 世纪,尤其是最近 10 年,材料科学迎来了以数据为核心的“第四范式”^[130]。材料信息学应运而生,它融合了材料科学、数据科学和计算机科学,旨在利用大数据分析和计算工具,从海量数据中挖掘“成分-工艺-组织-性能”之间的复杂关系,从而实现材料的理性设计与性能预测。钛合金的设计理念与技术路径也在不断发展,其中最具发展应用潜力的方法为高通量计算试验大数据结合机器学习与人工智能的设计方法。

高通量的大数据是钛合金设计的基础。高通量的数据的获取在计算层面需要集成多种尺度模拟方法,例如使用第一性原理计算预测原子尺度的基本物理性质,结合计算热力学方法构建多元合金相图,并利用分子动力学和相场法模拟微观组织的动态演化过程,高效计算多尺度数据^[131-132];在试验层面,需要协同高通量制备技术(如增材制造成分梯度材料、扩散多元节等)与高通量表征技术(如自动化电镜技术、X 射线衍射等),高效获取微观结构和性能试验数据^[133-134]。通过两种数据的相互配合与紧密协同,构建材料研发与材料生态大数据库,从而支撑钛合金的成分开发与设计。

在高通量大数据的基础上,通过机器学习与人工智能结合的方法,充分挖掘数据的潜力与价值。其核心逻辑在于利用先进的算法与训练方法(例如支持向量机、人工神经网络、遗传算法、主动学习等),从现有的高通量大数据库中自动学习并挖掘出隐藏在数据背后的、高度复杂的非线性“成分-工艺-组织-性能”关系,并实现钛合金的正向设计与逆向优化。高通量计算试验大数据结合机器学习与人工智能的设计方法,在钛合金设计与预测方面成果颇丰。Zou 等^[135]构建了一种数据驱动的机器学习方法,用于设计新型高强韧钛合金:结合高通量第一性原理计算与支持向量机,计算了电子功函数、晶格畸变能等电子结构特征,并使用 Hall-Petch 和 Φ 模型量化强化贡献;引入位错宽度和层错能等缺陷工程描述符来评估塑性;从物理机制出发,成功

设计了同时具备高强度和高韧性的系列新型钛合金。Oh 等^[136]采用人工神经网络,基于小样本 30 组数据训练,同步优化了低成本钛合金的成分和热处理温度,设计了 Ti-4Al-2Fe-1.4Mn-0.18O 合金,实现了超高强度(1284 MPa)与优异塑性(34.1%)的完美结合。Yang 等^[137]结合金属簇理论与机器学习方法,使用 82 个 β -Ti 合金的数据集训练模型,并以簇公式和 Mo 当量作为约束条件,大幅缩小候选成分空间,采用遗传算法进行逆向设计,以最小化弹性模量为目标,预测并设计出了 Ti-2.8Mo-13.5Nb-4.4Zr-8Sn-8.8Ta 等一系列合金,弹性模量低至 46 GPa。

当然,大数据结合机器学习与人工智能的钛合金设计方法尚处于起步发展阶段,还存在一定的局限性和有效数据量稀疏、数据质量和准确性不足等问题。钛合金性能的影响因素涵盖了化学成分、微观组织结构、变形机理、加工工艺等多个方面,能够公开获取的有效试验数据有限,而企业和研究机构的试验数据往往涉及商业机密并不公开共享,部分公布的数据准确性较差,甚至存在错误,制约了人工智能模型的训练和优化。此外,大部分人工智能模型为“黑箱”模型,无法清晰解释为何输出的数据能实现目标性能,以及各因素的相互作用及其内在机制,需通过试验验证并进一步表征和机理分析。尽管目前存在一定的局限性,随着材料信息学兴起而发展的高通量计算试验大数据结合机器学习与人工智能,这种高效、广泛、迅速的合金设计方法仍然是钛合金设计领域的革命性突破,正在彻底变革钛合金的设计范式。

依托试错法、当量法等传统方法设计的钛合金通过实际验证,得到的大量测试数据积累,综合第一性原理等设计理论方法,是高通量制备与计算快速生成海量数据的基础。借助机器学习模型与人工智能模型,挖掘钛合金“成分-工艺-组织-性能”之间的复杂非线性关系,从而实现钛合金性能的精准预测与成分的逆向设计。在显著降低钛合金设计研发周期和成本的同时,有望发现超越既有知识体系的新材料基因与优化路径,极大加速面向特定高性能需求的合金设计,这是钛合金设计的未来发展方向。尤其针对航空航天领域用钛合金的高强韧、轻量化、低成本的复杂设计需求,大数据+机器学习+人工智能的钛合金设计方法,无疑具有革命性的优势。

7 结论与展望

本文讨论了钛合金中常用的部分合金元素对钛合金组织和性能的影响以及内在机制,包括常见的 α 稳定元素、 β 稳定元素(共析型和同晶型)、中性元素及稀土元素。合金元素对钛合金组织性能影响的机制主要在于影响相变温度、固溶强化、晶粒细化、位错运动、变形

孪晶开动及诱发析出物等方面。同时,概括了钛合金设计方法的发展变化及存在的问题。以下重点展望未来的研究方向。

(1) α 稳定元素主要通过 α 相中置换固溶强化(如 Al)或间隙固溶强化(如 O)的方式,提升位错滑移的临界分切应力,抑制位错运动和孪晶变形,从而大幅提高合金强度,但导致塑性和韧性的下降; β 稳定元素主要是置换固溶,通过固溶强化和晶界钉扎,促进 β 相区的扩大和稳定,抑制 α 相的析出并细化晶粒,从而影响钛合金的性能,提升强度和韧性;此外,共析型 β 稳定元素(Fe 等),还能与 Ti 形成金属间化合物,作为异质形核点从而实现晶粒细化,影响合金性能;中性元素对相结构改变较小,主要通过置换固溶强化的方式,同时一定程度细化晶粒,从而提升合金强度和塑性;微量稀土元素易与杂质元素形成微米颗粒物,显著细化晶粒并净化晶界,提升钛合金强度和塑性,但过量时颗粒物粗化会损害塑性。

(2) 在多元合金中,各元素对钛合金的性能的作用会相互耦合、相互影响。但目前的研究大部分只针对单一元素的影响,多种元素之间的耦合影响研究不足。多种合金元素共存时,其交互作用机制尚未完全明确,缺乏清晰的机理分析,难以精确预测合金的组织与性能;未来需从原子尺度与晶体层面深入探索元素相互作用引发的位错失配、析出相动态演变等微观过程。

(3) 钛合金设计的经典理论与方法从发展初期的“试错法”,发展为半经验的“当量法”,再从理论层面发展了“d 电子理论法”和“CALPHAD 法”,每种方法在各自发展阶段均获得显著成果,但也存在各自的局限性与不足。随着大数据学习和人工智能的发展,通过高通量制备与计算快速生成海量数据,借助机器学习模型与人工智能模型,对钛合金“成分-工艺-组织-性能”之间的复杂非线性关系进行挖掘,从而实现钛合金性能的精准预测与成分的逆向设计,能够显著降低钛合金设计研发周期和成本,有望发现超越既有知识体系的新材料基因与优化路径,极大加速面向特定高性能需求的合金设计。高通量计算试验大数据结合机器学习与人工智能的设计方法,是未来钛合金设计的重要发展方向。

参考文献

- [1] 朱知寿, 王新南, 商国强, 等. 新型高性能钛合金研究与应[J]. 航空材料学报, 2016, 36(3): 7-12.
- [2] SHAO L, LI W S, LI D Y, et al. A review on combustion behavior and mechanism of Ti alloys for advanced aero-engine[J]. Journal of Alloys and Compounds, 2023, 960: 170584.
- [3] CHEN W, LI Q F, ZHOU L B, et al. Oxidation mechanism of a near β -Ti alloy[J]. Materials & Design, 2022, 223: 111144.
- [4] CANUMALLA R, JAYARAMAN T V. Decision science-driven assessment of Ti alloys for aircraft landing gear beams[J]. Aerospace, 2024, 11(1): 51.
- [5] WANG J L, MA Y X, PENG W J, et al. Evaluation of the effect of surface roughness parameters on fatigue of TC17 titanium alloy impeller using machine learning algorithm and finite element analysis[J]. Engineering Failure Analysis, 2023, 153: 107586.
- [6] ZHU S Y, ZHANG Y, CHEN X, et al. A multi-algorithm integration machine learning approach for high cycle fatigue prediction of a titanium alloy in aero-engine[J]. Engineering Fracture Mechanics, 2023, 289: 109485.
- [7] 周宗熠, 相志磊, 马小昭, 等. 高强 β 钛合金的发展现状与强化方法[J]. 北京工业大学学报, 2024, 50(5): 620-631.
- [8] ZHOU Zongyi, XIANG Zhilei, MA Xiaozhao, et al. Development status and strengthening methods of high-strength β -titanium alloys[J]. Journal of Beijing University of Technology, 2024, 50(5): 620-631.
- [9] 杨家坤, 包翔云, 张金钰, 等. 亚稳 β 钛合金的设计方法及室温变形机制的研究进展[J]. 材料导报, 2021, 35(19): 19170-19180.
- [10] YANG Jiakun, BAO Xiangyun, ZHANG Jinyu, et al. A review on design methods and deformation mechanisms at room temperature of metastable β -titanium alloys[J]. Materials Reports, 2021, 35(19): 19170-19180.
- [11] 《稀有金属材料加工手册》编写组. 稀有金属材料加工手册[M]. 北京: 冶金工业出版社, 1984.
- [12] The Editorial Group of Handbook of Rare Metal Materials Processing. Handbook of rare metal materials processing[M]. Beijing: Metallurgical Industry Press, 1984.
- [13] 顾苏怡, 周正存, 敖培. 合金元素对 Ti-Mo 合金的相结构和力学性能的影响[J]. 上海金属, 2022, 44(2): 38-41.
- [14] GU Suyi, ZHOU Zhengcun, AO Pei. Effect of alloying elements on phase structure and mechanical properties of Ti-Mo alloys[J]. Shanghai Metals, 2022, 44(2): 38-41.
- [15] 赵永庆, 洪权, 葛鹏. 钛及钛合金金相图谱[M]. 长沙: 中南大学出版社, 2011.
- [16] ZHAO Yongqing, HONG Quan, GE Peng. Metallographic atlas of titanium and its alloys[M]. Changsha: Central South University Press, 2011.
- [17] VEIGA C, DAVIM J P, LOUREIRO A J R. Properties and applications of titanium alloys: A brief review[J]. Reviews on Advanced Materials Science, 2012, 32(2): 133-148.
- [18] 戴全春, 王楠, 戴国庆. 典型元素微合金化对钛合金组织与性能影响研究进展[J]. 钛工业进展, 2024, 41(6): 39-49.
- [19] DAI Quanchun, WANG Nan, DAI Guoqing. Research progress on the effects of typical element microalloying on the microstructure and properties of titanium alloys[J]. Titanium Industry Progress, 2024, 41(6): 39-49.
- [20] 韩易恒, 陈文韬, 戴锦华, 等. Mo、Zr 元素对新型 $\alpha+\beta$ 钛合金显微组织与力学性能影响研究[J]. 铸造技术, 2025, 46(7): 673-679.

HAN Yiheng, CHEN Wentao, DAI Jinhua, et al. Effect of Mo and Zr addition on the microstructure and mechanical properties of a novel $\alpha+\beta$ titanium alloy[J]. Foundry Technology, 2025, 46(7): 673–679.

[15] 刘宏宇, 刘田雨, 刘鸿羽, 等. β 稳定元素 Mo、Nb、Ta、W 对铸造高温钛合金组织性能的影响研究[J]. 材料导报, 2025, 39(S2): 599–602.

LIU Hongyu, LIU Tianyu, LIU Hongyu, et al. Research on the effect of β -stabilizing elements Mo, Nb, Ta and W on the microstructure and properties of cast high-temperature titanium alloys[J]. Materials Reports, 2025, 39(S2): 599–602.

[16] HUANG S X, ZHAO Q Y, WU C, et al. Effects of β -stabilizer elements on microstructure formation and mechanical properties of titanium alloys[J]. Journal of Alloys and Compounds, 2021, 876: 160085.

[17] WENG H B, WANG Q, MA Y J, et al. Effect of Al content on the fracture toughness and deformation behavior of Ti–Al binary alloys[J]. Materials Science and Engineering: A, 2024, 911: 146914.

[18] CAO S, ZHANG S Z, LIU J R, et al. Interaction between Al and other alloying atoms in α -Ti for designing high temperature titanium alloy[J]. Computational Materials Science, 2021, 197: 110620.

[19] 吴欢, 林成, 尹桂丽, 等. 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[J]. 钛工业进展, 2024, 41(6): 1–6.

WU Huan, LIN Cheng, YIN Guili, et al. Research on effect of Al element on hardness and room tensile properties of Ti–Al alloy solid solution and quantitative modeling[J]. Titanium Industry Progress, 2024, 41(6): 1–6.

[20] CHONG Y, ZHANG R P, HOOSMAND M S, et al. Elimination of oxygen sensitivity in α -titanium by substitutional alloying with Al[J]. Nature Communications, 2021, 12: 6158.

[21] WILLIAMS J C, BAGGERLY R G, PATON N E. Deformation behavior of HCP Ti–Al alloy single crystals[J]. Metallurgical and Materials Transactions A, 2002, 33(13): 837–850.

[22] KWASNIAK P, GARBACZ H, KURZYDŁOWSKI K J. Solid solution strengthening of hexagonal titanium alloys: Restoring forces and stacking faults calculated from first principles[J]. Acta Materialia, 2016, 102: 304–314.

[23] YU H, CAO S, YOUSSEF S S, et al. Generalized stacking fault energies and critical resolved shear stresses of random α -Ti–Al alloys from first-principles calculations[J]. Journal of Alloys and Compounds, 2021, 850: 156314.

[24] ZHANG H, WEI B Q, OU X Q, et al. Enhancing $\{10\bar{1}2\}$ twin boundary migration capability in Ti–Al solid solution alloys with increasing Al content[J]. Journal of Materials Science & Technology, 2023, 147: 217–223.

[25] FITZNER A, PRAKASH D G L, DA FONSECA J Q, et al. The effect of aluminium on twinning in binary alpha-titanium[J]. Acta Materialia, 2016, 103: 341–351.

[26] HUANG S X, ZHAO Q Y, YANG Z, et al. Strengthening effects of Al element on strength and impact toughness in titanium alloy[J]. Journal of Materials Research and Technology, 2023, 26: 504–516.

[27] LIU C C, ZHANG L M, LIU Z, et al. Exploring the impact of

Al alloying on microstructure and hot nitric acid corrosion resistance of Ti–xAl (x=0, 1, 2, 3, 4, 5) alloys[J]. Corrosion Science, 2024, 232: 112010.

[28] MAO Y M, ZHAO Q Y, ZHANG R Q, et al. Trifunctional local-range order oxygen structure enhanced strength-ductility and fatigue resistance in large-scale metastable titanium alloy[J]. Nature Communications, 2025, 16: 7168.

[29] 王佩, 林希衡, 韩卫忠. 金属表面梯度渗氧强化[J]. 中国材料进展, 2024, 43(11): 995–1006.

WANG Pei, LIN Xiheng, HAN Weizhong. Surface gradient oxygen-charging strengthening of metals[J]. Materials China, 2024, 43(11): 995–1006.

[30] YU Q, QI L, TSURU T, et al. Origin of dramatic oxygen solute strengthening effect in titanium[J]. Science, 2015, 347(6222): 635–639.

[31] REN Y J, XU J J, WEI Y K, et al. Effect of interstitial oxygen on the microstructure and mechanical properties of titanium alloys: A review[J]. Crystals, 2025, 15(7): 618.

[32] LONG J B, LIU X T, GU J, et al. Breaking strength and ductility trade-off for powder metallurgy Ti alloys with high content of oxygen[J]. Materials Science and Engineering: A, 2025, 940: 148529.

[33] BARTÁKOVÁ S, MÁLEK J, PRACHÁR P. The effect of oxygen addition on microstructure and mechanical properties of various beta-titanium alloys[J]. JOM, 2020, 72(4): 1656–1663.

[34] WILLIAMS J C, SOMMER A W, TUNG P P. The influence of oxygen concentration on the internal stress and dislocation arrangements in α titanium[J]. Metallurgical Transactions, 1972, 3(11): 2979–2984.

[35] ZOU X W, HAN W Z. Playing with limp dislocations[J]. Advanced Engineering Materials, 2025, 27(12): 2500082.

[36] HUANG S X, ZHAO Q Y, LIN C, et al. Effects of oxygen content on Charpy impact properties and crack resistance of α titanium alloys[J]. Materials Science and Engineering: A, 2021, 818: 141394.

[37] BRANDES M C, BAUGHMAN M, MILLS M J, et al. The effect of oxygen and stress state on the yield behavior of commercially pure titanium[J]. Materials Science and Engineering: A, 2012, 551: 13–18.

[38] ZOU X W, HAN W Z, MA E. Uncovering the intrinsic high fracture toughness of titanium via lowered oxygen impurity content[J]. Advanced Materials, 2024, 36(40): 2408286.

[39] WANG X Q, HAN W Z. Oxygen-gradient titanium with high strength, strain hardening and toughness[J]. Acta Materialia, 2023, 246: 118674.

[40] 王一心, 炊鹏飞, 李文刚, 等. Mo 含量对生物医用 Ti–Zr–Nb 合金组织与性能的影响[J]. 铸造技术, 2022, 43(3): 187–190.

WANG Yixin, CHUI Pengfei, LI Wengang, et al. Effect of Mo content on microstructure and properties of Ti–Zr–Nb alloy for biomedical application[J]. Foundry Technology, 2022, 43(3): 187–190.

[41] AWAD A H, SAOOD M, ALY H A, et al. Role of Mo and Zr additions in enhancing the behavior of new Ti–Mo alloys for implant materials[J]. Metals and Materials International, 2025, 31(5): 1232–1253.

[42] SHI Y M, WANG Q Q, YANG Q G, et al. Effect of Mo alloying on vacancy-defect evolution and irradiation damage in titanium

alloy[J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2023, 968: 172130.

[43] MOSHOKO A N, RAGANYA M L, MACHAKA R, et al. The effect of molybdenum content on the microstructural evolution and tensile properties of as-cast Ti-Mo alloys[J]. *Materials Today Communications*, 2021, 27: 102347.

[44] HO W F, JU C P, CHERN LIN J H. Structure and properties of cast binary Ti-Mo alloys[J]. *Biomaterials*, 1999, 20(22): 2115-2122.

[45] KURODA P A B, BUZALAF M A R, GRANDINI C R. Effect of molybdenum on structure, microstructure and mechanical properties of biomedical Ti-20Zr-Mo alloys[J]. *Materials Science and Engineering: C*, 2016, 67: 511-515.

[46] YI R W, LIU H Q, YI D Q, et al. Precipitation hardening and microstructure evolution of the Ti-7Nb-10Mo alloy during aging[J]. *Materials Science and Engineering: C*, 2016, 63: 577-586.

[47] 毛彭龄, 曹振新. STi80 钛合金中合金元素对力学性能的影响[J]. *上海钢研*, 2001(4): 10-13.

MAO Pengling, CAO Zhenxin. A study of effect of compositions on mechanical properties of titanium alloy STi80[J]. *Shanghai Steel & Iron Research*, 2001(4): 10-13.

[48] KOTOV A D, POSTNIKOVA M N, MOSLEH A O, et al. Effect of Mo content on the microstructure, superplastic behavior, and mechanical properties of Ni and Fe-modified titanium alloys[J]. *Materials Science and Engineering: A*, 2023, 877: 145166.

[49] 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.

[50] XU W, CHEN M, LU X, et al. Effects of Mo content on corrosion and tribocorrosion behaviours of Ti-Mo orthopaedic alloys fabricated by powder metallurgy[J]. *Corrosion Science*, 2020, 168: 108557.

[51] UWANYUZE R S, ALPARY S P, SCHAFFÖNER S, et al. A first principles analysis of oxidation in titanium alloys with aluminum and vanadium[J]. *Surface Science*, 2022, 719: 122026.

[52] ZHAO Y Q, XIN S W, ZENG W D. Effect of major alloying elements on microstructure and mechanical properties of a highly β stabilized titanium alloy[J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2009, 481(1-2): 190-194.

[53] SUN S C, FANG H Z, LI Y L, et al. Regulating phase ratio of β/α and static recrystallization of Ti-5Al-5Mo-5Cr-3Nb-2Zr with high plasticity alloyed by vanadium[J]. *Materials Characterization*, 2023, 203: 113090.

[54] COLLINS P C, BANERJEE R, BANERJEE S, et al. Laser deposition of compositionally graded titanium-vanadium and titanium-molybdenum alloys[J]. *Materials Science and Engineering: A*, 2003, 352(1-2): 118-128.

[55] 刘晏硕, 徐诺, 徐国建, 等. 钒钎对激光熔化沉积钛合金组织及性能的作用机制[J]. *中国激光*, 2022, 49(14): 1402106.

LIU Yanshuo, XU Nuo, XU Guojian, et al. Mechanism of vanadium on microstructure and properties of titanium alloy by laser melting deposition[J]. *Chinese Journal of Lasers*, 2022, 49(14): 1402106.

[56] MATSUMOTO H, WATANABE S, MASAHASHI N, et al.

Composition dependence of Young's modulus in Ti-V, Ti-Nb, and Ti-V-Sn alloys[J]. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 2006, 37(11): 3239-3249.

[57] PARK K H, HWANG M J, SONG H J, et al. Electrochemical and mechanical properties of cast Ti-V alloys for dental applications[J]. *International Journal of Electrochemical Science*, 2016, 11(7): 5552-5563.

[58] AN F P, ZHANG B B, YAN Y Y, et al. Effect of vanadium contents on microstructure and mechanical properties of Ti-6Al-xV components produced by wire + arc additive manufacturing[J]. *Materials Transactions*, 2021, 62(8): 1071-1078.

[59] FRAYRET J P, CAPRANI A, JASZAY T, et al. Influence of aluminum and vanadium on the anodic dissolution of Ti-Al and Ti-V binary alloys in concentrated hydrochloric acid[J]. *Corrosion*, 1985, 41(11): 656-664.

[60] 胡秋野, 王艳晶, 李昊, 等. 变钒含量钛铝基合金组织和性能研究[J]. *热加工工艺*, 2021, 50(6): 59-61, 66.

HU Qiuye, WANG Yanjing, LI Hao, et al. Study on microstructure and properties of titanium-aluminum-based alloy with variable vanadium content[J]. *Hot Working Technology*, 2021, 50(6): 59-61, 66.

[61] SONG H J, LEE H W, LEE J Y, et al. Characteristics and oxidation mechanism of thermal oxide on Ti-xCr and Ti-xV ($x = 5, 10, 15$) alloys[J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2020, 815: 152390.

[62] TAKAHASHI T, MINAMINO Y, HIRASAWA H, et al. High-temperature oxidation and its kinetics study of Ti-Al and Ti-V alloys in air[J]. *Materials Transactions*, 2014, 55(2): 290-297.

[63] PAUL J D H, APPEL F, WAGNER R. The compression behaviour of niobium alloyed γ -titanium aluminides[J]. *Acta Materialia*, 1998, 46(4): 1075-1085.

[64] SUN S C, FANG H Z, HAO J Q, et al. Influence of Nb addition on microstructure evolution and superplastic behavior of Ti-5Al-5Mo-5Cr-2Zr-xNb titanium alloy at 923 K[J]. *China Foundry*, 2026, 23(1): 55-61.

[65] FU B G, WANG H W, ZOU C M, et al. The effects of Nb content on microstructure and fracture behavior of near α titanium alloys[J]. *Materials & Design*, 2015, 66: 267-273.

[66] HUANG S X, ZHAO Y Q, YU J S, et al. Partition of Nb element on microstructure, tensile and impact properties of a near α Ti-4Nb alloy[J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2020, 826: 154128.

[67] HAGHIGHI S, LIU Y J, CAO G H, et al. Influence of Nb on the $\beta \rightarrow \alpha''$ martensitic phase transformation and properties of the newly designed Ti-Fe-Nb alloys[J]. *Materials Science and Engineering: C*, 2016, 60: 503-510.

[68] GABRIEL S B, DILLE J, NUNES C A, et al. The effect of niobium content on the hardness and elastic modulus of heat-treated Ti-10Mo-xNb alloys[J]. *Materials Research*, 2010, 13(3): 333-337.

[69] 毛成亮, 赵彬, 贾蔚菊, 等. Fe 元素含量对钛合金性能的影响[J]. *钛工业进展*, 2019, 36(2): 42-46.

MAO Chengliang, ZHAO Bin, JIA Weijiu, et al. Effect of Fe element content on properties of titanium alloy[J]. *Titanium Industry Progress*, 2019, 36(2): 42-46.

[70] 白家元, 杨家典, 瞿兆银, 等. Fe 元素对 TC4 钛合金显微组

织和力学性能的影响[J]. 金属加工 (热加工), 2024(7): 94–98.

BAI Jiayuan, YANG Jiadian, QU Zhaoyin, et al. The effect of Fe element on the microstructure and mechanical properties of TC4 titanium alloy[J]. MW Metal Forming, 2024(7): 94–98.

[71] KRIEGEL M J, WETZEL M H, TREICHEL A, et al. Binary Ti–Fe system. Part I: Experimental investigation at high pressure[J]. Calphad, 2021, 74: 102322.

[72] LU J W, ZHAO Y Q, NIU H Z, et al. Electrochemical corrosion behavior and elasticity properties of Ti–6Al–xFe alloys for biomedical applications[J]. Materials Science and Engineering: C, 2016, 62: 36–44.

[73] GUO C B, DAI G Q, NIU J Z, et al. Fe nanoparticles modified pure Ti alloy on microstructure evolution and fine crystallization mechanism fabricated by additive manufacturing[J]. Journal of Materials Research and Technology, 2023, 26: 5860–5872.

[74] MENG L, ZHANG Y Y, ZHAO X L, et al. The effects of Fe content on the microstructural evolution and tensile properties in Ti–6Al–4V–(2,4)Fe alloys fabricated by thermomechanical powder consolidation[J]. Materials Science and Engineering: A, 2021, 825: 141877.

[75] LIN D J, CHERN LIN J H, JU C P. Effect of omega phase on deformation behavior of Ti–7.5Mo–xFe alloys[J]. Materials Chemistry and Physics, 2002, 76(2): 191–197.

[76] WANG X, ZHANG L J, NING J, et al. Fe element promotes the transformation from columnar to equiaxed grains and the formation of ultrafine microstructure of Ti–6Al–4V alloy by laser wire deposition[J]. Additive Manufacturing, 2021, 48: 102442.

[77] 陶欢, 宋德军, 杨胜利, 等. Fe 含量对 Ti80 合金显微组织和性能的影响[J]. 材料开发与应用, 2021, 36(6): 7–11.

TAO Huan, SONG Dejun, YANG Shengli, et al. Effects of Fe content on the microstructures and properties of Ti80 alloy[J]. Development and Application of Materials, 2021, 36(6): 7–11.

[78] 陈冬梅, 黄森森, 贺飞, 等. Fe 元素对 TA15 钛合金显微组织和力学性能的影响[J]. 钛工业进展, 2017, 34(2): 14–18.

CHEN Dongmei, HUANG Sensen, HE Fei, et al. Effects of Fe on the microstructures and mechanical properties of TA15 titanium alloy[J]. Titanium Industry Progress, 2017, 34(2): 14–18.

[79] 樊亚军, 曹继敏, 杨华斌, 等. Fe 含量对 Ti–6Al–4V 钛合金力学性能的影响[J]. 金属热处理, 2013, 38(3): 21–23.

FAN Yajun, CAO Jimin, YANG Huabin, et al. Effect of Fe content on mechanical properties of Ti–6Al–4V alloy[J]. Heat Treatment of Metals, 2013, 38(3): 21–23.

[80] CHEN F W, GU Y L, XU G L, et al. Improved fracture toughness by microalloying of Fe in Ti–6Al–4V[J]. Materials & Design, 2020, 185: 108251.

[81] MISHRA H, GHOSAL P, NANDY T K, et al. Influence of Fe and Ni on creep of near α -Ti alloy IMI834[J]. Materials Science and Engineering: A, 2005, 399(1–2): 222–231.

[82] SJAFRIZAL T, DEGHAN-MANSHADI A, KENT D, et al. Effect of Fe addition on properties of Ti–6Al–xFe manufactured by blended elemental process[J]. Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials, 2020, 102: 103518.

[83] 陈思源, 孟晓凯, 朱金才. 钛锆基形状记忆合金的研究进展[J]. 材料热处理学报, 2025, 46(3): 1–13.

CHEN Siyuan, MENG Xiaokai, ZHU Jincai. Research progress of Ti–Zr based shape memory alloys[J]. Transactions of Materials and Heat Treatment, 2025, 46(3): 1–13.

[84] AWAD A H, ABDELGHANY A W, JASKARI M, et al. A comprehensive evaluation of cost-effective forged and aged β -type Ti–14Mn–Zr alloys with variable Zr content for biomedical implant applications[J]. Journal of Materials Research and Technology, 2025, 37: 3125–3141.

[85] WU J N, LIU D X, ZHANG X H, et al. Enhancing high-temperature fatigue resistance of TC11 titanium alloy through combined plasma zirconizing and ultrasonic surface rolling[J]. International Journal of Fatigue, 2025, 198: 108993.

[86] AWAD A H, ABDEL-HADY GEPREEL M. Basic characterization of new Ti–Mn–Zr alloys[J]. Materials Today: Proceedings, 2020, 33: 1904–1908.

[87] YILMAZ E, GÖKÇE A, FINDIK F, et al. Assessment of Ti–16Nb–xZr alloys produced via PIM for implant applications[J]. Journal of Thermal Analysis and Calorimetry, 2018, 134(1): 7–14.

[88] TERLIKBAEVA A Z, ALIMZHANOVA A M, MALDYBAYEV G, et al. The influence of zirconium addition on the structure and properties of Ti–2.5Al–5V–5mo alloy sheets[J]. Case Studies in Chemical and Environmental Engineering, 2024, 10: 100964.

[89] 王宜平, 王小祥. 锆元素对 TA4 变形孪晶和力学性能的影响[J]. 材料科学与工程学报, 2024, 42(4): 544–552.

WANG Yiping, WANG Xiaoxiang. Deformation twins and mechanical properties of zirconium doped TA4[J]. Journal of Materials Science and Engineering, 2024, 42(4): 544–552.

[90] 费峻桢, 王小祥. Zr、O 元素固溶强化对钛合金力学性能各向异性的影响[J]. 材料科学与工程学报, 2024, 42(6): 888–896, 904.

FEI Junzhen, WANG Xiaoxiang. Effect of Zr and O solution strengthening on the anisotropy of mechanical properties of Ti alloys[J]. Journal of Materials Science and Engineering, 2024, 42(6): 888–896, 904.

[91] JING R, LIANG S X, LIU C Y, et al. Structure and mechanical properties of Ti–6Al–4V alloy after zirconium addition[J]. Materials Science and Engineering: A, 2012, 552: 295–300.

[92] HAN M K, HWANG M J, YANG M S, et al. Effect of zirconium content on the microstructure, physical properties and corrosion behavior of Ti alloys[J]. Materials Science and Engineering: A, 2014, 616: 268–274.

[93] ALHARBI H F, BAHRI Y A, SHERIF E M. Influence of zirconium on the corrosion passivation of titanium in simulated body fluid[J]. Crystals, 2021, 11(11): 1391.

[94] XIA C Q, ZHANG Z G, FENG Z H, et al. Effect of zirconium content on the microstructure and corrosion behavior of Ti–6Al–4V–xZr alloys[J]. Corrosion Science, 2016, 112: 687–695.

[95] YIN F C, TEDENAC J C, GASCOIN F. Thermodynamic modelling of the Ti–Sn system and calculation of the Co–Ti–Sn system[J]. Calphad, 2007, 31(3): 370–379.

[96] NAJAFIZADEH M, BOZORG M, GHASEMPOUR-

MOUZIRAJI M, et al. The effect of adding Sn on the mechanical properties and microstructure of the titanium[J]. *Materials Letters*, 2023, 351: 135044.

[97] RAJADURAI M, ANNAMALAI A R. Effect of Sn addition on the microstructural characteristics and mechanical properties of the titanium alloy (Ti6Al4V)[J]. *Metallic Materials*, 2018, 56(3): 191–198.

[98] CAI S, WANG L, SCHAFFER J E, et al. Influence of Sn on martensitic beta Ti alloys[J]. *Materials Science and Engineering: A*, 2019, 743: 764–772.

[99] 时尚, 王道永, 周勇汉, 等. 稀土元素对钛合金的作用机制的研究现状[J]. *世界有色金属*, 2024(24): 31–33.

SHI Shang, WANG Daoyong, ZHOU Yonghan, et al. Research status of effect mechanism of rare earth elements on titanium alloys[J]. *World Nonferrous Metals*, 2024(24): 31–33.

[100] 王林林, 刘梦君, 焦树强, 等. 稀土元素对钛合金的影响研究[J]. *稀土*, 2025, 46(4): 139–151.

WANG Linlin, LIU Mengjun, JIAO Shuqiang, et al. Review on the effect of rare earth elements on titanium alloys[J]. *Chinese Rare Earths*, 2025, 46(4): 139–151.

[101] 蒋焱鸿, 姜中涛. 稀土元素对钛合金组织与性能的影响研究进展[J]. *粉末冶金工业*, 2021, 31(5): 81–86.

JIANG Hanhong, JIANG Zhongtao. The effects of addition of rare earth elements on microstructure and properties of titanium alloys[J]. *Powder Metallurgy Industry*, 2021, 31(5): 81–86.

[102] DENG T S, LI S, LIANG Y Q, et al. Effects of scandium and silicon addition on the microstructure and mechanical properties of Ti–6Al–4V alloy[J]. *Journal of Materials Research and Technology*, 2020, 9(3): 5676–5688.

[103] ZENG L Y, HONG Q, MAO X N, et al. Effect of rare earth element content on high cycle fatigue property of titanium alloys[J]. *Journal of Physics: Conference Series*, 2019, 1347(1): 012005.

[104] ZHU Y Y, DENG Y C, AN Y X, et al. Effect of rare earth lanthanum addition on microstructure and properties of pure titanium[J]. *Journal of Materials Engineering and Performance*, 2025, 34(6): 4669–4679.

[105] XU Y, LIU Z, ZHU X H, et al. Effect of rare earth Ce addition on microstructure and mechanical properties of titanium alloy Ti–6Al–4V[J]. *Materials Letters*, 2023, 330: 133244.

[106] YAN W G, WANG H M, TANG H B, et al. Effect of Nd addition on microstructure and tensile properties of laser additive manufactured TC11 titanium alloy[J]. *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*, 2022, 32(5): 1501–1512.

[107] LI J Y, MAO N, ZHANG X W, et al. Effect of gadolinium addition on microstructure, mechanical properties and corrosion behavior of titanium alloys for spent fuel storage and neutron shielding[J]. *Journal of Rare Earths*, 2025, 43(9): 1996–2004.

[108] MA X L, MATSUGI K, LIU Y. Design of near α -Ti alloys with optimized mechanical and corrosion properties and their characterizations[J]. *Metals*, 2024, 14(1): 81.

[109] LÜTJERING G, WILLIAMS J C. *Titanium*[M]. 2nd ed. Berlin, Heidelberg: Springer, 2007.

[110] ZHENG Z Z, LU Z C, YANG J H, et al. Microstructure

evolution and cryogenic deformation mechanism of titanium alloy with different Mo equivalent[J]. *Rare Metal Materials and Engineering*, 2025, 54: 2086–2093.

[111] GUO Y H, NIU J Z, CAO J X, et al. Relative strength of β phase stabilization by transition metals in titanium alloys: The Mo equivalent from a first principles study[J]. *Materials Today Communications*, 2023, 35: 106123.

[112] YU Z T, YU S, CHENG J, et al. Development and application of novel biomedical titanium alloy materials[J]. *Acta Metallurgica Sinica*, 2017, 53(10): 1238–1264.

[113] LI C C, XIN C, WANG Q, et al. A novel low-cost high-strength β titanium alloy: Microstructure evolution and mechanical behavior[J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2023, 959: 170497.

[114] LI D, WAN X J. On the thermal stability of Ti alloys III. The criterion for thermal stability and its application[J]. *Acta Metallurgica Sinica*, 1984, 20(6): 391–397.

[115] ROSENBERG H W. The science, technology and application of titanium[C]//*Proceeding of 1st International Conference of Titanium*. London: Pergamon, 1970.

[116] FENG Q S, DUAN B H, MAO L, et al. Thermodynamic assessment of Ti–Al–Fe–V quaternary system applied to novel titanium alloys designing[J]. *Metals*, 2022, 12(3): 444.

[117] MORINAGA M. Theory for alloy design[M]//*A Quantum Approach to Alloy Design*. Amsterdam: Elsevier, 2019: 9–17.

[118] MORINAGA M. The molecular orbital approach to titanium alloy design[J]. *Key Engineering Materials*, 2018, 770: 217–223.

[119] MORINAGA M, KATO M, KAMIMURA T, et al. Theoretical design of β -type titanium alloys[C]//*Proceedings of the 7th world Conference on Titanium*. Warrendale: TMS, 1992.

[120] MORINAGA M. The molecular orbital approach and its application to biomedical titanium alloy design[M]//*Titanium in Medical and Dental Applications*. Amsterdam: Elsevier, 2018: 39–64.

[121] ABDEL-HADY M, HINOSHITA K, MORINAGA M. General approach to phase stability and elastic properties of β -type Ti–alloys using electronic parameters[J]. *Scripta Materialia*, 2006, 55(5): 477–480.

[122] TIAN Y Y, JIANG K W, DENG Z X, et al. Integration of CALPHAD calculations and nanoindentation test for the design of low-modulus near- β titanium[J]. *Journal of Central South University*, 2023, 30(12): 3940–3949.

[123] WU D, LIU L B, ZENG L J, et al. Designing high-strength titanium alloy using pseudo-spinodal mechanism through diffusion multiple experiment and CALPHAD calculation[J]. *Journal of Materials Science & Technology*, 2021, 74: 78–88.

[124] GHASSEMALI E, CONWAY P L J. High-throughput CALPHAD: A powerful tool towards accelerated metallurgy[J]. *Frontiers in Materials*, 2022, 9: 889771.

[125] GHOSH S, RAMAN L, SRIDAR S, et al. High-entropy engineering in thermoelectric materials: A review[J]. *Crystals*, 2024, 14(5): 432.

[126] ZOU H, TIAN Y Y, ZHANG L G, et al. Integrating machine learning and CALPHAD method for exploring low-modulus near- β -Ti

alloys[C]//Proceedings of the 50th International Conference on Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry. Cambridge, 2023.

[127] DING C Y, LIU C, ZHANG L G, et al. Design of low-cost and high-strength titanium alloys using pseudo-spinodal mechanism through diffusion couple technology and CALPHAD[J]. Materials, 2021, 14(11): 2910.

[128] LU S Q, ZHANG Z R, TANG Y, et al. Enhancing phase stability in low-activation TiV-Ta-based alloys through CALPHAD-guided design[J]. JOM, 2025, 77(3): 1524–1535.

[129] KRISHNA R. Titanium-based alloys with high-performance: Design and development[M]//Titanium Alloys-Recent Progress in Design, Processing, Characterization, and Applications. London: IntechOpen, 2023.

[130] 干勇, 任家荣, 谢曼. 面向 2035 的新材料技术创新思考与展望[J]. 前瞻科技, 2025, 4(1): 6–15.

GAN Yong, REN Jiarong, XIE Man. Thoughts and prospects on new material technology innovation towards 2035[J]. Science and Technology Foresight, 2025, 4(1): 6–15.

[131] ZHU W G, XIN S W, WU D, et al. Research progress of titanium alloy design from empirical methodology to integrated calculation[J]. Rare Metal Materials and Engineering, 2021, 50(6): 2229–2236.

[132] 孙巧艳, 杜勇, 刘立斌, 等. 高性能钛合金的关键“基

因”及高通量实验与计算技术的应用[J]. 中国材料进展, 2018, 37(4): 297–303.

SUN Qiaoyan, DU Yong, LIU Libin, et al. Key material genome of titanium alloys and application of high-throughput experiment and computation[J]. Materials China, 2018, 37(4): 297–303.

[133] ZHANG W Y, REN Q, WAN W H, et al. High-throughput microstructure characterization of titanium alloy by a multi-dimensional information strategy[J]. Materials Today Communications, 2024, 38: 108360.

[134] LING J F, HUANG D D, BAI K W, et al. High-throughput development and applications of the compositional mechanical property map of the β titanium alloys[J]. Journal of Materials Science & Technology, 2021, 71: 201–210.

[135] ZOU C X, LI J S, WANG W Y, et al. Integrating data mining and machine learning to discover high-strength ductile titanium alloys[J]. Acta Materialia, 2021, 202: 211–221.

[136] OH J M, NARAYANA P L, HONG J K, et al. Property optimization of TRIP Ti alloys based on artificial neural network[J]. Journal of Alloys and Compounds, 2021, 884: 161029.

[137] YANG F, LI Z, WANG Q, et al. Cluster-formula-embedded machine learning for design of multicomponent β -Ti alloys with low Young's modulus[J]. NPJ Computational Materials, 2020, 6: 101.

(责编 逸飞)