

基于高通量 CALPHAD 的 TC4 钛合金多目标设计

宁 榛*, 朱焱麟, 吴 蝶, 廖哲晗, 柳溢航

(成都先进金属材料产业技术研究院股份有限公司, 四川 成都 610300)

摘 要: 为满足航空、深海及生物医用领域对 TC4 (Ti-6Al-4V) 钛合金高强-高韧协同性能的迫切需求, 基于 Thermo-Calc/TC-Python 搭建高通量 CALPHAD 计算 workflow, 对 6 241 组候选成分进行相平衡、固溶度及力学性能的快速筛选, 并以“屈服强度 > 950 MPa、Laves 相起始温度 < 850 K、Ti₃Al 相起始温度 < 800 K”为约束条件。结果显示: Al 含量是提高 α 相体积分数及固溶强化的主导因素; V 和 Fe 作为 β 稳定元素可显著调控 α/β 相比比例; O 虽可显著贡献固溶强化, 但因增强 V 在 β 相中的固溶度而间接降低 α 体积分数; 综合多目标约束后, 由 $w(\text{Al})=5.8\% \sim 6.3\%$ 、 $w(\text{V})=3.6\% \sim 4.2\%$ 、 $w(\text{Fe}) \leq 0.18\%$ 、 $w(\text{O})=0.09\% \sim 0.15\%$ 构成的成分窗口在保障强度的同时有效抑制了脆性相析出。与传统经验设计相比, 该数值策略将候选成分空间压缩至不足 2%, 显著降低试验试错成本, 并为后续强度-韧性-可加工性多目标优化奠定数据基础。

关键词: TC4 钛合金; 高通量 CALPHAD; Thermo-Calc; Laves 相; Ti₃Al 相

中图分类号: TF823

文献标志码: A

文章编号: 1004-7638(2026)03-0054-09

DOI: 10.7513/j.issn.1004-7638.2026.03.006

开放科学 (资源服务) 标识码 (OSID):



听
语
音
与
作
者
互
动
聊
科
研

High-throughput CALPHAD-guided multi-objective design of TC4 titanium alloy

NING Zhen*, ZHU Yanlin, WU Die, LIAO Zhehan, LIU Yihang

(Chengdu Advanced Metal Materials Industry Technology Research Institute Co., Ltd.,
Chengdu 610300, Sichuan, China)

Abstract: To address the pressing need for TC4 (Ti-6Al-4V) titanium alloys that combine high strength and toughness for aerospace, deep-sea, and biomedical applications, we established a high-throughput CALPHAD workflow based on Thermo-Calc/TC-Python. A total of 6,241 candidate compositions were rapidly screened for phase equilibria, solid solubility, and mechanical properties under the constraints of yield strength > 950 MPa, Laves-phase onset temperature < 850 K, and Ti₃Al-phase onset temperature < 800 K. The results show that Al content is the primary factor in increasing the α -phase volume fraction and solid-solution strengthening; V and Fe, as β stabilizers, markedly modulate the α/β phase fraction ratio. Although O strongly contributes to solid-solution strengthening, it indirectly reduces α -phase fraction by enhancing the solubility of V in the β phase. A multi-objective analysis identifies an optimal compositional window of Al 5.8–6.3 wt.%, V 3.6–4.2 wt.%, Fe ≤ 0.18 wt.%, and O 0.09–0.15 wt.%, which simultaneously meets the strength requirement and suppresses the formation of brittle phases. Compared with traditional empirical design, this numerical strategy narrows the candidate compositional

收稿日期: 2025-10-13; 修回日期: 2025-12-30; 接受日期: 2026-02-09

基金项目: 成都先进金属材料产业技术研究院股份有限公司基础项目“基于迁移学习方法的中高合金钢疲劳性能预测模型” (2023P4X1X01J)。

作者简介: 宁榛, 1987 年出生, 男, 辽宁鞍山人, 博士, 主要从事金属热变形组织演变的研究, E-mail: zhenning410@163.com。

space to <2 %, significantly lowering experimental trial-and-error costs and providing a solid data foundation for subsequent multi-objective optimization of targeting strength, toughness, and workability.

Key words: TC4 titanium alloy; high-throughput CALPHAD; Thermo-Calc; Laves phase; Ti_3Al phase

0 引言

Ti-6Al-4V(TC4)合金兼具较高比强度、良好耐腐蚀性、优异生物相容性及较成熟的加工应用基础,是目前应用最广泛的 $\alpha+\beta$ 型钛合金之一,已被广泛用于航空航天结构件、深海装备、能源化工部件及生物学植入体等高端领域^[1-4]。随着航空航天轻量化、海洋装备长寿命服役以及医疗植入体个性化制造等需求不断提升,TC4 合金在强度、韧性、组织稳定性和服役可靠性方面面临更高要求。尤其是在复杂热加工、热处理及中温服役过程中,合金元素含量的微小波动可能显著影响 α/β 相比比例、元素分配、固溶强化效果以及 Laves 相、 Ti_3Al 相等潜在脆性相的析出倾向,从而进一步影响合金的综合性能。因此,如何在满足强度要求的同时降低脆性相形成风险,是 TC4 合金成分优化设计中的关键问题。

传统钛合金成分优化主要依赖经验设计、小批量熔炼和反复试验验证。这类方法虽然可靠性较高,但存在试验周期长、成本高、变量耦合关系难以系统解析等不足,难以适应当前高效率、精准化和低成本合金研发的需求^[5-6]。对于 TC4 这类多组元合金体系而言,Al、V、Fe、O 等元素不仅分别影响 α 稳定性、 β 稳定性和固溶强化效果,还会通过元素间交互作用改变相平衡、元素分配及脆性相形成温度。若仅依赖单因素试验或经验窗口,很难全面揭示多元素协同作用下的成分-组织-性能关系。

基于热力学数据库的 CALPHAD 方法(Calculation of Phase Diagrams)为材料成分、相稳定性与组织演化之间建立了可计算的联系,可用于预测多组元合金体系中的相平衡、元素分配及相变温度等关键热力学信息^[7]。近年来,随着 Thermo-Calc、DICTRA 等商业软件逐步开放 Python 接口,高通量 CALPHAD 计算框架得以快速发展^[8-9]。该方法能够在虚拟成分空间中批量计算大量候选合金的热力学特征,并与强度模型、相稳定性判据等相结合,实现对候选成分的快速筛选和多目标优化,从而显著缩短合金设计周期、降低试验试错成本^[10]。

目前,针对 TC4 合金的研究多集中于热处理制度、显微组织演化、力学性能调控及增材制造工艺优化等方面,而从多元素成分空间出发,综合考虑相平衡、元素分配、固溶强化以及脆性相析出风险的高通量成分设计研究仍相对不足。特别是对于 Al、

V、Fe、O 四种关键元素而言,其含量变化对 α/β 相稳定性、强化贡献和 Laves/ Ti_3Al 相形成倾向具有耦合影响,有必要建立一种能够同时评价强度与组织稳定性的多目标筛选方法。

基于此,依托 Thermo-Calc 与 TC-Python 搭建高通量 CALPHAD 计算平台,针对 TC4 合金 Al、V、Fe、O 四元成分空间开展批量热力学计算,对候选成分的 α/β 相组成、元素分配、屈服强度以及 Laves 相和 Ti_3Al 相起始形成温度进行系统评估。在此基础上,结合本征强化与固溶强化模型,建立以屈服强度、Laves 相起始形成温度和 Ti_3Al 相起始形成温度为核心指标的多目标筛选策略,获得兼顾强度提升与脆性相析出风险控制的 TC4 合金推荐成分范围。可为 TC4 合金成分优化提供高效、可重复的计算设计方法,也可为其他钛合金体系的高通量成分筛选提供参考。

1 模型描述

双相钛合金屈服强度主要组成部分如表 1 所示,各种强化机制在双相钛合金中对屈服强度的贡献度如图 1 所示^[11-13]。可以看到,固溶强化和本征强化效应占据绝对的主导地位。从表 1 中本征强化和固溶强化效应的公式可以看到,计算所需的体积分数和合金元素溶解度都可以使用热力学计算的方法得到,因此这里使用本征强化和固溶强化之和来研究成分对钛合金强度的影响,并将此作为一个筛选条件。

TC4 钛合金中平衡相随温度变化如图 2 所示。从图 2 中可以看到,TC4 钛合金在一定的合金成分和温度下会有脆性相 Laves 相和 Ti_3Al 相出现,这些相能够极大地降低钛合金的韧性。因此,如何通过成分和工艺设计避免这两种相的形成也是需要关注的点。这里将 Laves 相和 Ti_3Al 相的开始形成温度作为另一个筛选条件。

TC4 钛合金的标准成分和选定的计算成分如表 2 所示,其中 Δ 是在标准成分区间内的成分步长,根据成分步长,总共计算了 6 241 组成分。为了获得 TC4 钛合金中的相分数和相组成,使用 Thermo-Calc 软件的单点平衡模块计算了 750 °C 时 TC4 钛合金中各个相的体积分数和合金元素的含量,并使用性质图模块计算了 Laves 相和 Ti_3Al 相的开始析出温度。

表 1 双相钛合金主要强化机制和计算公式

Table 1 Primary strengthening mechanisms and calculation formulas for dual-phase titanium alloys

Strengthening mechanism	Formula
Intrinsic strengthening of α and β phases	$(89 \times F_V^\alpha) + (45 \times F_V^\beta)$
Solid-solution strengthening of α phase	$F_V^\alpha \times (149.5 \times C_{Al}^{0.667} + 745 \times C_O^{0.667})$
Solid-solution strengthening of β phase	$F_V^\beta \times \left((34 \times C_V^{0.765})^{0.5} + (245 \times C_{Fe}^{0.765})^{0.5} \right)^{2.15}$
Hall-Petch strengthening of equiaxed α phase	$110 \times F_V^{\text{equiaxed-}\alpha} \times \text{Equiaxed}_{\text{size}}^{-0.5}$
Hall-Petch strengthening of lamellar α phase	$(1 - F_V^{\text{equiaxed-}\alpha}) \times \frac{\text{Colony}}{100} \times 180 \times LW^{-0.13} \times RT^{0.13}$
Strengthening from basket-weave microstructure	$(1 - F_V^{\text{equiaxed-}\alpha}) \times \frac{100 - \text{Colony}}{100} \times 0.2 \times SSS$

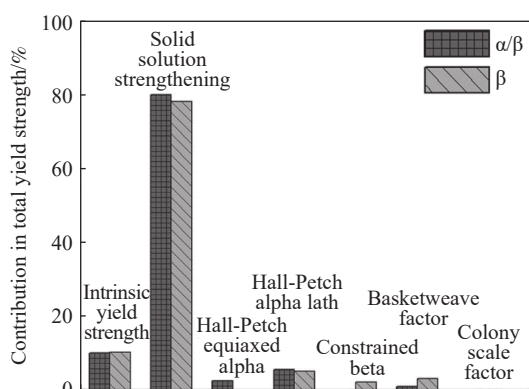


图 1 钛合金中各种强化机制贡献度的比较

Fig. 1 Comparison of the contribution degrees of various strengthening mechanisms in titanium alloys

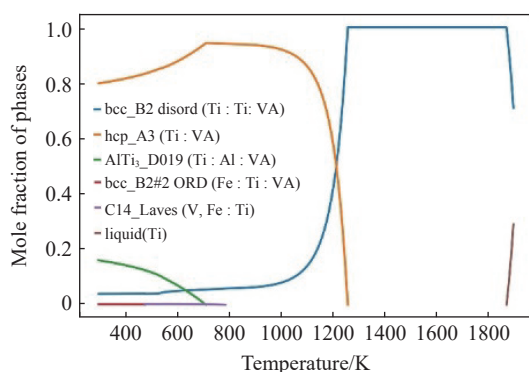


图 2 TC4 钛合金中各相摩尔分数随温度的变化

Fig. 2 Variation of molar phase fractions with temperature in TC4 titanium alloy

表 2 TC4 钛合金的标准成分和计算选择的成分

Table 2 Standard composition and selected computational compositions of TC4 titanium alloy %

Element	Ti	Al	V	Fe	O
Standard composition	Bal.	5.5~6.75	3.5~4.5	0.0~0.3	0.0~0.21
Computational step	Bal.	$\Delta=0.1$	$\Delta=0.1$	$\Delta=0.05$	$\Delta=0.03$

2 高通量计算流程

在 Thermo-Calc 环境下,单一成分的相平衡可

通过交互指令或执行 .tcm 脚本迅速完成;然而,逐一求解 6 241 组 TC4 候选配方仍面临显著的计算瓶颈^[14]。为提升计算效率,搭建了如图 3 所示的高通量计算 (High-Throughput Computing, HTC) 平台,整体框架划分为输入层、执行层与输出层。类似地,针对钛合金体系中成分依赖的扩散/动力学参数评估,已有研究基于 CALPHAD 热力学数据库并结合 HitDIC 等工具建立 bcc 相原子移动性数据库,实现扩散行为的快速计算与验证,为钛合金成分空间的高效评估提供了可复用的方法范式^[15]。

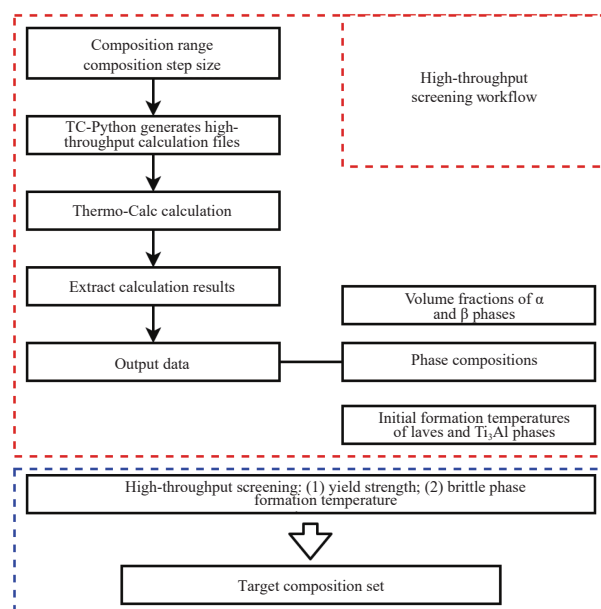


图 3 Thermo-Calc 高通量筛选流程

Fig. 3 High-throughput screening workflow of Thermo-Calc

在执行层面,主要包括三个步骤:生成计算文件、运行 Thermo-Calc 以及提取结果文件。在“生成计算文件”步骤中,基于选定的 6 241 组成分,利用 Python 自动生成符合 TC-Python 接口要求的计算指令文件(每个成分对应一段独立的计算指令块),

指令块中包含合金成分设定、计算温度、稳定相(或相状态)设置以及需要输出的相分数、相组成与相变起始温度等关键信息。为减少频繁启动/调用带来的开销,采用 Python 脚本对 6 241 个独立指令文件进行顺序合并,将其整合为一个可被 Thermo-Calc/TC-Python 一次性读取与执行的“主指令文件”。合并过程采用文本拼接方式实现,并在每个成分指令块的起始处写入该成分的“唯一标识”,用于后续结果追踪与对齐。

为确保各成分计算的独立性与结果不被上下文状态干扰,在主指令文件中对每个成分均设置“独立计算单元”,即在进入下一组成分计算前执行必要的状态重置(例如清空/重建系统状态、重新设定元素与组元、重新指定计算条件与输出变量),保证每一组成分的计算仅由其自身的成分与预设条件决定。同时,输出端以“唯一标识”作为索引,将每个成分对应的相分数、相内元素含量及 Laves/Ti₃Al 相起始温度等结果按行写入结果文件,从而实现“一条指令块——一条结果记录”的严格对应关系,提高流程的可追溯性与可重复性。

在“运行 Thermo-Calc”步骤中,系统在检测到输入文件后自动启动 Thermo-Calc 软件并执行预设命令。运行完成后,可获得所有 6 241 种成分的计算结果文件,其中包含重要热力学数据,如初生相的体积分数、相组成以及相形成温度等。

在“提取结果文件”步骤中,通过 TC-Python 模块直接读取输出数据。由于体积分数、相组成和形成温度等数据均按照 Thermo-Calc 预设的逻辑结构存储,因此可根据既定规则系统地提取所需数据。

在输出层面,所有提取的数据均以 Excel 格式存储,便于后续分析处理。为实现这一高通量计算(HTC)流程的自动化,开发了基于 Python 的程序,该程序整合了输入层、执行层和输出层功能,能够自动生成计算指令、执行 Thermo-Calc 计算并提取关键结果数据,显著提高了计算效率和结果可重复性。

3 结果与讨论

3.1 成分含量对 TC4 中 α 相和 β 相体积分数的影响

成分对 1 023 K 时 α 相和 β 相体积分数的影响如图 4、5 所示。 α 相体积分数随 V 和 Fe 元素含量的降低和 Al 元素含量的升高而变大,而 β 相反,这是因为 V 和 Fe 元素是 β 相稳定元素,而 Al 元素是 α 相稳定元素^[16]。出现反常的是, α 相的体积分数随着 α 相稳定元素 O 含量的增大而降低。这是因为 O 元素含量的升高提高了 V 元素在 β 中的平衡溶解度,而 V 元素对 β 相的稳定作用超过了 O 元素对 α 相的稳定作用。

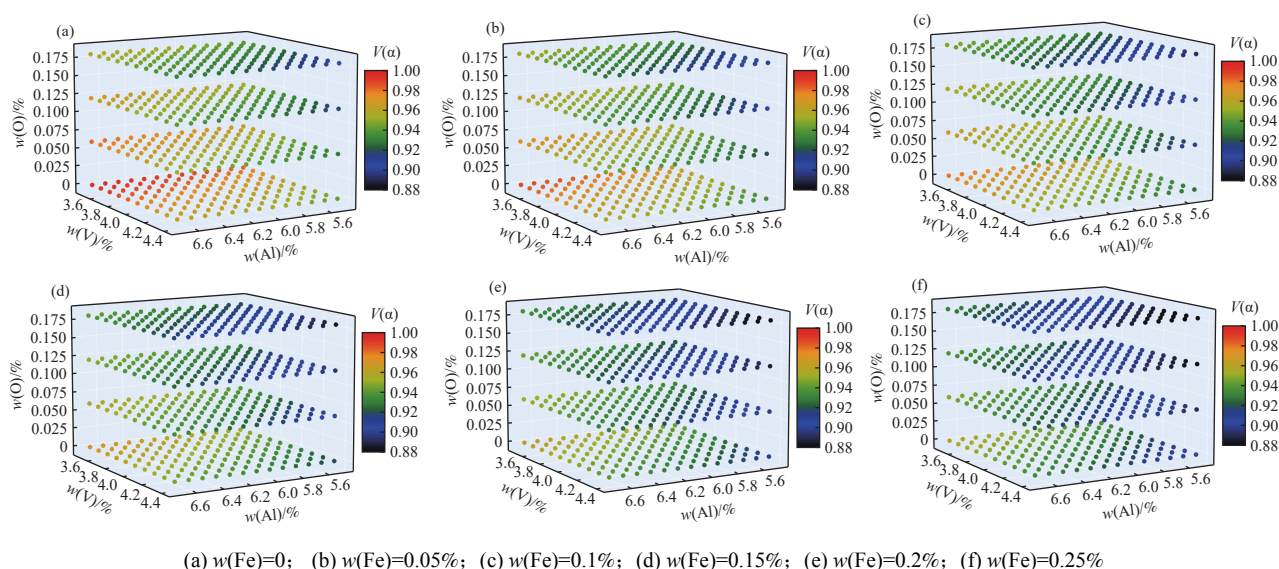


图4 不同 Fe 元素含量下合金元素含量对 TC4 钛合金 α 相体积分数的影响

Fig. 4 Effects of alloying element contents on volume fraction of α phase in TC4 titanium alloy with different Fe contents

3.2 成分对 α 相和 β 相成分的影响

通过响应面分析探究了合金元素质量分数对 α/β 相成分的影响(图 6~9)。为避免四元体系

(Al-V-Fe-O)中全变量分析导致的高维复杂性,并直观揭示其余元素对目标元素在相内平衡含量的调控作用,研究中将某一元素的整体质量分数固定于

TC4 典型成分范围内的代表值。以此在降维后的三维成分空间中考察其余三种元素变化对目标元素在 α 相或 β 相中含量的影响,从而有效规避因成分

总量改变带来的直接耦合效应(如总 Fe 增加必然导致 β 相中 Fe 含量上升),更清晰地识别出 Al、V、O 等元素对分配行为的具体影响规律。

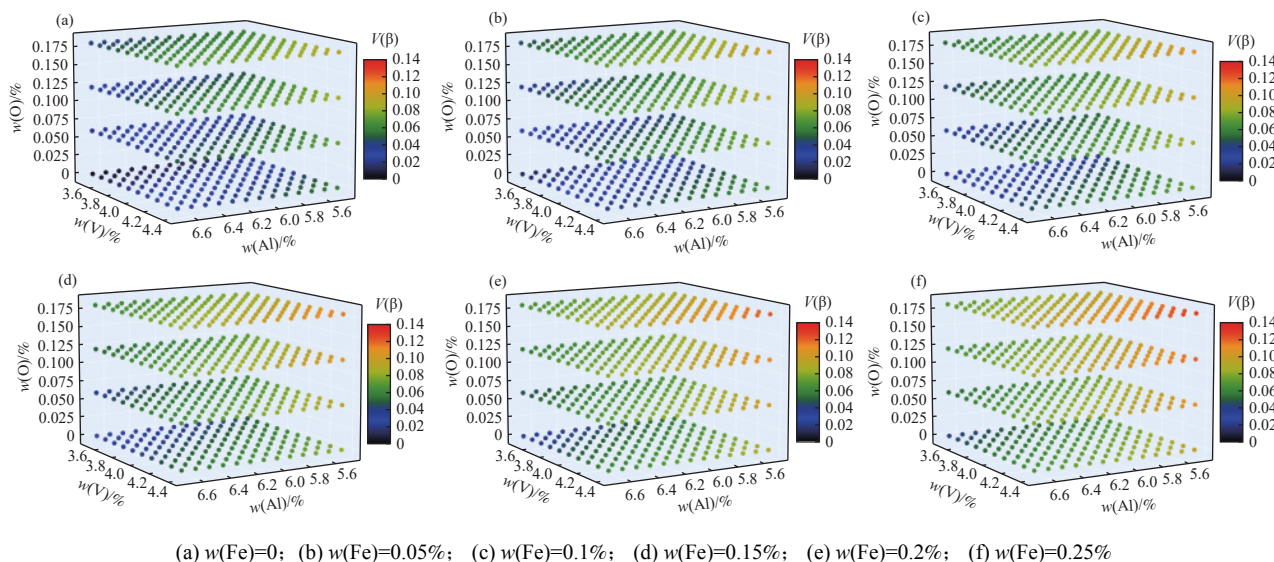


图 5 不同 Fe 元素含量下合金元素含量对 TC4 钛合金 β 相体积分数的影响

Fig. 5 Effects of alloying element contents on volume fraction of β phase in TC4 titanium alloy with different Fe contents

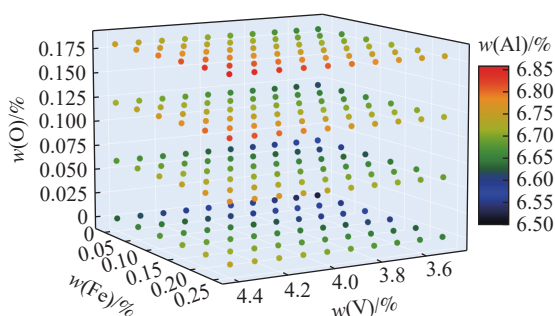


图 6 固定 Al 质量分数(6.5%)时 V、Fe、O 含量对 Al 在 α 相中含量的影响

Fig. 6 Effect of V, Fe, and O contents on Al content in α -phase at a fixed Al mass fraction of 6.5%

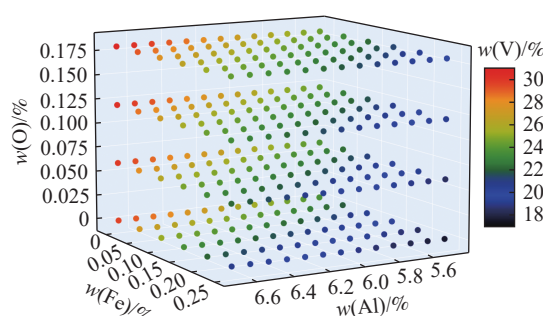


图 8 固定 V 质量分数(4.4%)时 Al、Fe、O 含量对 V 元素在 β 相中含量的影响

Fig. 8 Effect of Al, Fe, and O contents on V content in β -phase at a fixed V mass fraction of 4.4%

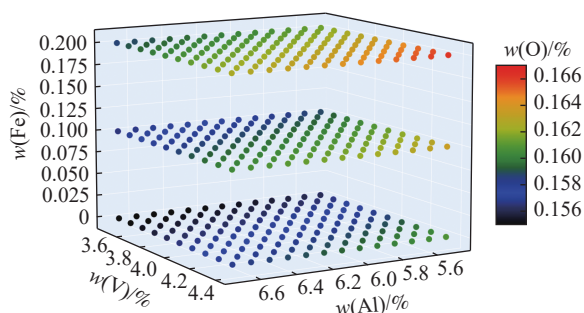


图 7 固定 O 质量分数(0.15%)时 Al、V、Fe 含量对 O 在 α 相中含量的影响

Fig. 7 Effect of Al, V, and Fe contents on the O content in the α -phase at a fixed O mass fraction of 0.15%

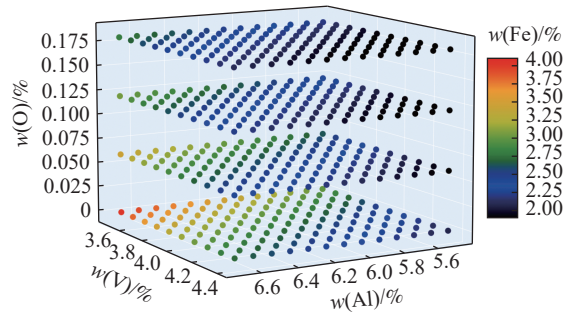


图 9 固定 Fe 质量分数(0.25%)时 Al、V、O 含量对 Fe 在 β 相中含量的影响

Fig. 9 Effect of Al, V, and O contents on Fe content in β -phase at a fixed Fe mass fraction of 0.25%

3.2.1 成分对 Al 和 O 元素在 α 相中含量的影响

在 Al 质量分数固定为 6.5% 条件下,成分对 Al 元素在 α 相中平衡溶解度的影响如图 6 所示,提高 V、Fe 和 O 元素的添加量,能够提高 Al 元素在 α 相中的平衡浓度。

在 O 质量分数固定为 0.15% 条件下,成分对 O 元素在 α 相中平衡溶解度的影响如图 7 所示,提高 V 和 Fe 元素的添加量,降低 Al 元素的添加量,能够提高 O 元素在 α 相中的平衡浓度。

3.2.2 成分对 V 和 O 元素在 β 相中含量的影响

在 V 质量分数固定为 4.4% 条件下,成分对 V 元素在 β 相中的平衡溶解度的影响如图 8 所示,提

高 Al 和 O 元素的添加量,降低 Fe 元素的添加量,能够提高 V 元素在 β 相中的平衡浓度。

在 Fe 质量分数固定为 0.25% 条件下,成分对 Fe 元素在 β 相中平衡溶解度的影响如图 9 所示,降低 Al、V 和 O 元素的添加量,能够提高 Fe 元素在 β 相中的平衡浓度。

3.3 成分对强度的影响

成分对屈服强度的影响如图 10 所示。从图 10 中可以看到,TC4 钛合金的屈服强度随着四种合金元素添加量的增大而升高,其中 Fe 和 O 元素的强化作用大于 Al 和 V 元素的作用。这是因为合金元素添加量的提高,显著增加了钛合金的固溶强化量^[17]。

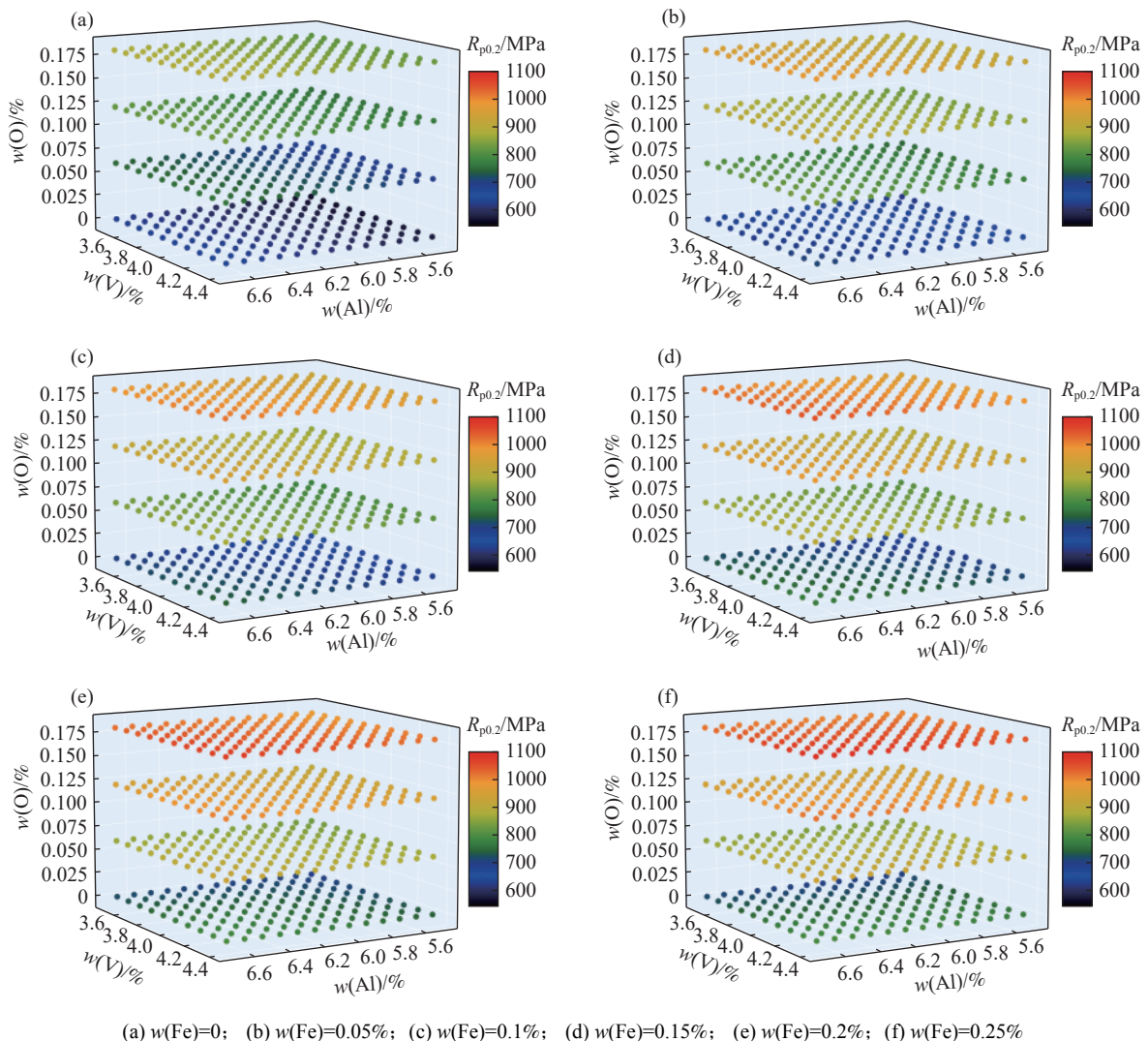


图 10 不同 Fe 元素含量下成分对屈服强度的影响
Fig. 10 Effects of alloy composition on yield strength with different Fe contents

3.4 成分对脆性相开始形成温度的影响

TC4 钛合金在中温热暴露或热处理过程中,若发生 Laves 相或 Ti_3Al 相等脆性相析出,将显著降低合金韧性与加工性能,因此在成分设计中需要对

其析出风险进行约束^[18]。采用 Thermo-Calc 性质图模块计算脆性相的开始形成温度,即在降温过程中该相由“无”到“有”的热力学起始析出温度,用于表征该相在给定成分下的热力学稳定性边界。

关于筛选阈值的设定:工程应用中 TC4 合金常涉及中温区间的热暴露或热处理窗口(如去应力/时效等工艺通常处于 500~600℃),该温区内若脆性相具有较高的热力学稳定性,将增加析出风险并对综合性能造成不利影响。为在成分筛选阶段提供一个保守且可操作的热力学判据,将 Laves 相与 Ti_3Al 相的起始形成温度上限分别设定为 850 K ($\approx 577^\circ\text{C}$)与 800 K ($\approx 527^\circ\text{C}$),即仅保留使两类脆性相在上述中温窗口内不易具备热力学析出条件或析出驱动力显著受限的候选成分,从而降低中温停留条件下发生脆性相析出的风险。相比之下, Ti_3Al 相对 Al、O 等元素更为敏感且对韧性影响更显著,因此其阈值采用更严格的 800 K。

3.4.1 合金元素含量对 Laves 相开始形成温度的影响

Laves 相作为钛合金中的脆性相会导致钛合金的韧性和加工性能降低,因此在成分和工艺设计过程中应该避免 Laves 相的形成^[18]。Laves 相开始形成温度随合金元素含量的变化如图 11 所示,从图 11 中可以看到, O 元素对 Laves 开始形成温度没有影响,提高 V 元素含量能够降低 Laves 相的开始

形成温度,提高 Al、Fe 元素的含量能够使 Laves 相的开始形成温度升高。结合设定的 850 K 筛选阈值可知, Al 与 Fe 含量过高将使开始形成温度上移,从而增加在中温热暴露/热处理窗口内发生 Laves 相析出的潜在风险;相反,适当提高 V 含量有助于使开始形成温度下移,从热力学角度降低 Laves 相形成倾向。

3.4.2 成分对 Ti_3Al 相开始形成温度的影响

Ti_3Al 相同样属于钛合金中的脆性相。尽管其在一定条件下可能伴随强度提升,但会显著降低钛合金的韧性与加工性能,且在工业生产中难以精确控制其形成与分布,因此也应对其析出倾向进行约束。 Ti_3Al 相开始形成温度随成分变化如图 12 所示。从图 12 可见, Al 与 O 元素含量对 Ti_3Al 相开始形成温度影响较大,随着 Al 与 O 含量增加, Ti_3Al 相开始形成温度显著升高。结合设定的 800 K 更严格阈值可以看出, Al、O 含量过高将使开始形成温度上移,增加中温窗口内 Ti_3Al 相形成的热力学可能性,因此需要在满足强度要求的同时对 Al、O 上限进行约束,以降低 Ti_3Al 析出风险。

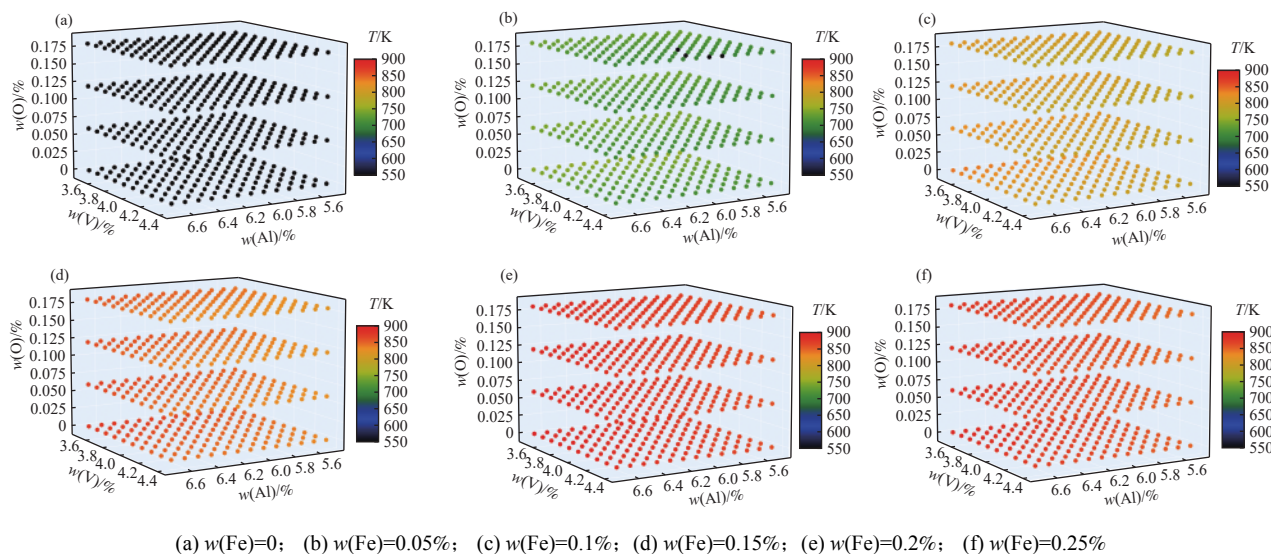


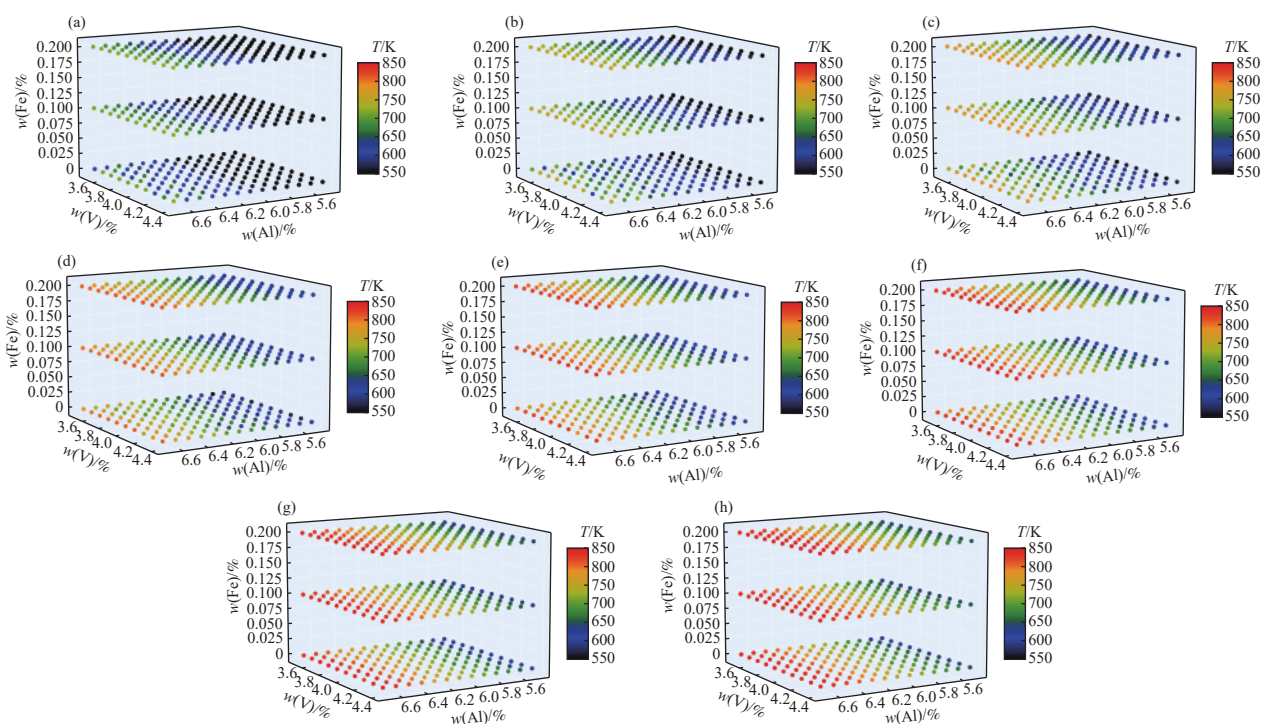
图 11 不同 Fe 元素含量下成分对 Laves 相开始析出温度的影响

Fig. 11 Effects of alloy composition on initial precipitation temperature of Laves phase with different Fe contents

3.5 成分筛选结果

根据前述计算与分析,采用的筛选标准为:屈服强度 > 950 MPa, Laves 相开始形成温度 < 850 K, Ti_3Al 相开始形成温度 < 800 K。筛选结果如图 13 所示。图中绿色区域(可行区)表示同时满足上述三项约束的成分组合;其余区域分别对应强度不足或 Laves/ Ti_3Al 脆性相形成温度约束不满足的成分范围。从图 13 可以看出,当 O 的质量分数 < 0.09% 时,候选成分均无法通过筛选,主要原因是此时屈服强度难以

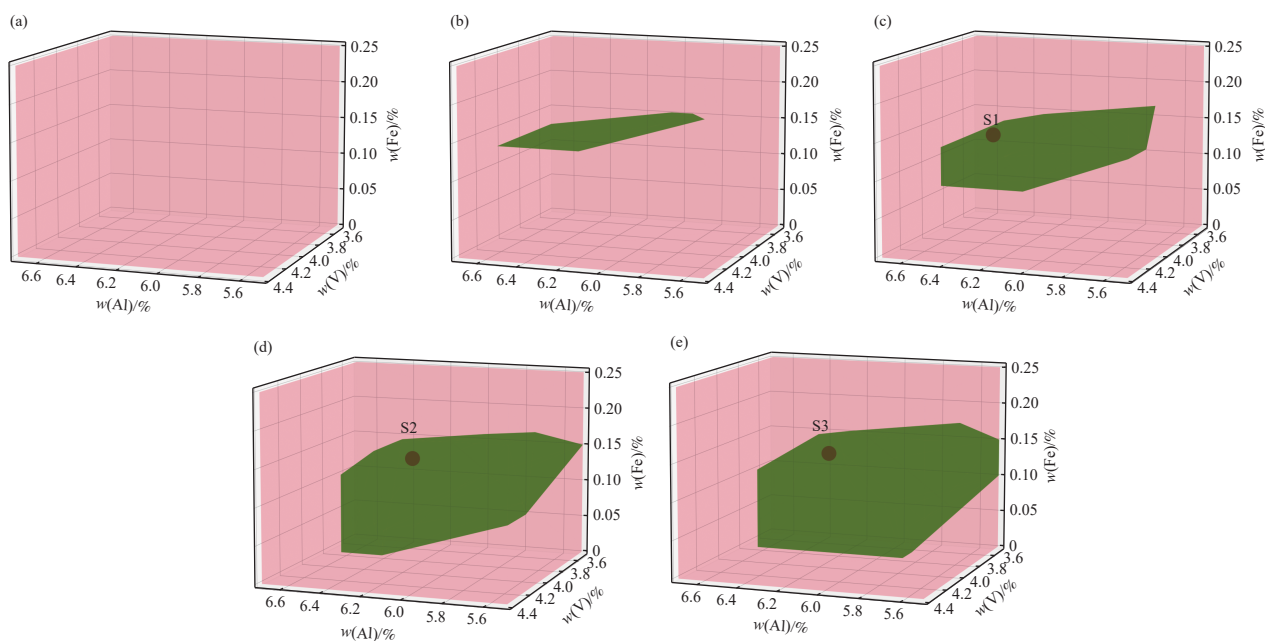
满足 > 950 MPa 的约束。随着 O 含量增加,逐步出现满足强度要求的成分范围,但受 Laves/ Ti_3Al 脆性相开始形成温度的限制, Al 与 Fe 的含量不能过高;综合图 13 的可行区边界,可得到 Al 含量应小于约 6.4%、Fe 含量应小于约 0.20% 的控制要求。进一步结合图 13 中各 O 含量截面内连续可行区的分布范围,并剔除靠近约束边界、成分波动容忍度较低的区域,可确定较稳健的推荐成分窗口为 $w(Al)=5.8\% \sim 6.3\%$ 、 $w(V)=3.6\% \sim 4.2\%$ 、 $w(Fe) \leq 0.18\%$ 、 $w(O)=0.09\% \sim 0.15\%$ 。



(a) $w(\text{O})=0$; (b) $w(\text{O})=0.03\%$; (c) $w(\text{O})=0.06\%$; (d) $w(\text{O})=0.09\%$; (e) $w(\text{O})=0.12\%$; (f) $w(\text{O})=0.15\%$; (g) $w(\text{O})=0.18\%$; (h) $w(\text{O})=0.21\%$

图 12 不同氧元素含量下成分对 Ti_3Al 相开始析出温度的影响

Fig. 12 Effects of alloy composition on initial precipitation temperature of Ti_3Al phase with different O contents



(绿色区域为满足筛选条件的可行区;黑点为试验验证样品 S1~S3。)

(a) $w(\text{O})=0.09\%$; (b) $w(\text{O})=0.12\%$; (c) $w(\text{O})=0.15\%$; (d) $w(\text{O})=0.18\%$; (e) $w(\text{O})=0.21\%$

图 13 不同 O 含量下 TC4 钛合金成分多目标筛选可行区及试验验证样品位置

Fig. 13 Feasible composition regions for multi-objective screening of TC4 titanium alloy with different O contents and locations of experimentally verified samples

为验证筛选窗口的有效性与工程可行性,在可行区内选取了三组代表性成分开展试验验证,

图 13 中以黑点(样品 S1~S3)标出其位置。样品选取遵循“位于可行区且具有代表性”的原则(例

如覆盖可行区的中心/边界或不同 O、Fe 水平的典型位置),以考察筛选结果对成分波动的鲁棒性。试验结果表明,三组样品的力学性能均满足设计要求。

4 结论

通过高通量热力学计算、强化模型评估及试验验证系统阐明了 TC4 钛合金成分-组织-性能之间的协同调控规律,并建立了一套可复制的快速成分设计范式。基于上述工作,得出以下结论:

1) 搭建了 Thermo-Calc/TC-Python 高通量 CALPHAD 计算平台,并通过 Python 脚本实现输入生成、批量求解与结果自动提取,能在小时级别完成 6 241

组 TC4 成分的 α/β 相体积分、元素分配以及 Laves 与 Ti_3Al 脆性相起始温度的系统计算,显著提升了数据获取效率和可重复性。

2) 计算结果表明: Al 含量主导 α 相体积分及固溶强化; V、Fe 作为 β 稳定元素可调控 α/β 相比例; O 虽显著提高固溶强化,但因增强 V 在 β 中的溶解而间接降低 α 相体积分。

3) 以“本征+固溶强化”屈服强度 > 950 MPa、Laves 相的起始温度 < 850 K、 Ti_3Al 相的起始温度 < 800 K 为多目标约束,筛选得到 $w(\text{Al})=5.8\% \sim 6.3\%$ 、 $w(\text{V})=3.6\% \sim 4.2\%$ 、 $w(\text{Fe}) \leq 0.18\%$ 、 $w(\text{O})=0.09\% \sim 0.15\%$ 的最优窗口;三组试验验证样品均满足力学性能要求,验证了筛选策略的可靠性。

参考文献

- [1] PETERS M, KUMPFERT J, WARD C H. Titanium alloys for aerospace applications[J]. *Advanced Engineering Materials*, 2003, 5(6): 419-427.
- [2] FROES F H. Titanium: Physical Metallurgy, Processing, and Applications[M]. Materials Park: ASM International, 2015.
- [3] BOYER R R. An overview on the use of titanium in the aerospace industry[J]. *Materials Science and Engineering: A*, 1996, 213(1/2): 103-114.
- [4] LÜTJERING G, WILLIAMS J C, LÜTJERING G, *et al.* Titanium matrix composites[M]. Berlin: Springer, 2003.
- [5] LEYENS C, PETERS M. Titanium and Titanium Alloys: Fundamentals and Applications[M]. Weinheim: Wiley-VCH, 2003.
- [6] FROST H J, ASHBY M F. Deformation-Mechanism Maps: The Plasticity and Creep of Metals and Ceramics[M]. Oxford: Pergamon Press, 1982.
- [7] SAUNDERS N, MIODOWNIK A P. CALPHAD (Calculation of Phase Diagrams): A Comprehensive Guide[M]. Oxford: Pergamon, 1998.
- [8] GHASSEMALI E, CONWAY P L J. High-throughput CALPHAD: a powerful tool towards accelerated metallurgy[J]. *Frontiers in Materials*, 2022, 9: 889771.
- [9] DONG F Y, LIU F, SHEN X Y, *et al.* Development status of high-entropy alloy powder preparation techniques and applications[J]. *China Powder Science and Technology*, 2025, 31(6): 92-106.
(董福宇, 刘峰, 申向阳, 等. 高熵合金粉体制备及应用的发展现状[J]. *中国粉体技术*, 2025, 31(6): 92-106.)
- [10] LIU Z K. CALPHAD and integrated computational materials engineering (ICME)[J]. *Calphad*, 2008, 32(3): 361-370.
- [11] JI S, WANG Q, XIA B, *et al.* Mechanical properties of multiphase materials and rocks: a phenomenological approach using generalized means[J]. *Journal of Structural Geology*, 2004, 26(8): 1377-1390.
- [12] GHAMARIAN I, HAYES B, SAMIMI P, *et al.* Developing a phenomenological equation to predict yield strength from composition and microstructure in β processed Ti-6Al-4V[J]. *Materials Science and Engineering: A*, 2016, 660: 172-180.
- [13] GHAMARIAN I, SAMIMI P, DIXIT V, *et al.* A constitutive equation relating composition and microstructure to properties in Ti-6Al-4V: as derived using a novel integrated computational approach[J]. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 2015, 46: 5021-5037.
- [14] ZHANG H Y, DING P, LIU F L, *et al.* High-throughput exploration of composition-dependent mechanical and diffusion properties of Ti-Al-V-Cr alloys[J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2025, 1021: 179651.
- [15] TONG J B, WANG X D, NIE J J, *et al.* Diffusion coefficients of bcc phase and atomic mobility in Ti-Al-Fe system[J]. *Foundry Technology*, 2024, 45(7): 672-680.
(佟健博, 王向东, 聂晶晶, 等. Ti-Al-Fe 体系 bcc 相扩散系数及原子移动性[J]. *铸造技术*, 2024, 45(7): 672-680.)
- [16] AHMED T, RACK H J. Phase transformations during cooling in $\alpha+\beta$ titanium alloys[J]. *Materials Science and Engineering: A*, 1998, 243(1/2): 206-211.
- [17] OH J M, LEE B G, CHO S W, *et al.* Oxygen effects on the mechanical properties and lattice strain of Ti and Ti-6Al-4V[J]. *Metals and Materials International*, 2011, 17: 733-736.
- [18] RABADIA C D, LIU Y J, CHEN L Y, *et al.* Deformation and strength characteristics of Laves phases in titanium alloys[J]. *Materials & Design*, 2019, 179: 107891.