

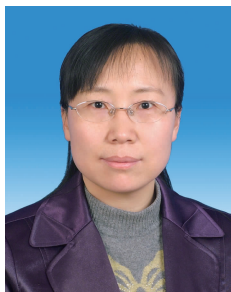
# 高性能钛合金的关键“基因”及高通量实验与计算技术的应用

孙巧艳<sup>1</sup>, 杜勇<sup>2</sup>, 刘立斌<sup>2</sup>, 胡青苗<sup>3</sup>, 肖林<sup>1</sup>, 孙军<sup>1</sup>

(1. 西安交通大学 金属材料强度国家重点实验室, 陕西 西安 710049)

(2. 中南大学 粉末冶金国家重点实验室, 湖南 长沙 410083)

(3. 中国科学院金属研究所 沈阳材料科学国家实验室, 辽宁 沈阳 110016)



孙巧艳

**摘要:** 加快高性能钛合金的研发速度、降低研发成本对我国高端装备制造至关重要。作为关键结构材料, 强度、塑性与韧性是保障钛合金构件安全运行的关键力学性能指标。通过高通量计算可预测合金的模量、比热、热膨胀系数等多种物理性能指标, 但是对于强度、塑性与韧性等力学性能指标尚缺少预测模型和公式, 原因是力学性能间接依赖合金的化学成分, 直接影响力学性能的因素是合金的微观组织。高性能钛合金的关键“基因”是成分、相/组织结构与晶体缺陷。高通量计算和扩散多元节建立合金成分与相的对应关系, 相场动力学计算与模拟实现对相与微观组织演化的预测, 通过微纳尺度力学性能测试技术获得微观组织结构的力学性能数据。期望通过以上各环节研究结果与数据的有机整合, 建立钛合金成分、相与微观组织、力学性能数据库, 有助于提升高性能钛合金的研发速度, 满足我国关键技术领域对先进钛合金的需求。

**关键词:** 钛合金; 高通量实验与计算; 微观组织; 力学性能; 材料基因

中图分类号: TB3

文章标识码: A

文章编号: 1674-3962(2018)04-0297-07

## Key Material Genome of Titanium Alloys and Application of High-Throughput Experiment and Computation

SUN Qiaoyan<sup>1</sup>, DU Yong<sup>2</sup>, LIU Libin<sup>2</sup>, HU Qingmiao<sup>3</sup>, XIAO Lin<sup>1</sup>, SUN Jun<sup>1</sup>

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

(2. State Key Laboratory for Powder Metallurgy, Central South University, Changsha 410083, China)

(3. Institute of Metal Research, Chinese Academy of Sciences, Shenyang National Laboratory for Materials Science, Shenyang 110016, China)

**Abstract:** To accelerate researching new-type titanium alloys with improved mechanical properties and to lower cost at the same time are very important for the advanced equipments of our country. As structural material, strength, ductility and toughness are key factors for performance of structural parts. Some physical properties, such as elastic modulus, heat conductivity, diffusion coefficient, thermal expansion coefficient and specific heat, have been calculated or measured with high-throughput computation and experiments. However, mechanical properties, such as strength, ductility and toughness, cannot be calculated with computational methods due to lack of models and enough data. The mechanical properties are much more dependent on microstructures than compositions. Therefore, the key genes for advanced titanium alloys are compositions, phases/microstructures and defects of crystals. The relationship between chemical composition and phase can be founded with first-principles calculation, and dependence of phase on composition can be measured with diffusion-multiple approach efficiently. Microstructural evolution can be predicted with phase-field models. The mechanical properties of individual unit of microstructures can be measured with nano-mechanical methods, such as nano indentation and compressive or tensile methods. The above results and data should be integrated into database for titanium alloys and be used to accelerate researching new-type titanium alloys to meet great needs of advanced titanium alloys in key industrial fields of our country.

**Key words:** titanium alloys; high-throughput experiments and computation; microstructure; mechanical properties; materials genome

收稿日期: 2017-09-18

基金项目: 科技部“973”计划项目(2014CB644000, 2014CB644003)

第一作者: 孙巧艳, 女, 1972年生, 教授, Email: qysun@mail.xjtu.edu.cn

DOI: 10.7502/j.issn.1674-3962.2018.04.07

## 1 前言

人类进入 20 世纪以来,科学技术以前所未有的速度蓬勃发展。尤其是 20 世纪中叶及后期,电子计算机、超大规模集成电路技术不断进步,促使计算机的性能每 18 ~ 24 个月提升一倍,并保持价格不变(即摩尔定律)。计算机的普及对研究人员来讲是莫大的福音,计算机的高速运算(每秒亿万次的计算速度)将科研人员从枯燥、重复、耗时的计算中解脱出来,同时极大地提高了效率和准确性,这为执行需要大量计算的科研任务提供了技术支撑。基于此,1985 年美国能源部提出“人类基因组计划”(human genome project, HGP)草案,经过 5 年的讨论和论证,于 1990 年开始执行,由美国、德国、日本、英国、法国、中国等 6 个国家的科学家共同完成。人类基因组计划的核心任务是利用第一代基因测序技术,检测人体约 2.5 万个基因中 30 亿个碱基对组成的核苷酸序列、人类基因的鉴定、人类基因组研究技术与信息系统等建立等方面,明确所有基因的结构和功能,为人类疾病的预防和诊治提供科学依据,更好地认识和保护生命体。人类基因组计划历时 16 年(1990 ~ 2006),确定了人类基因组的基因图构建和序列,完成了人类 1 号染色体的基因序列图,使人类第一次在分子水平认识自我。目前科研人员正在探索将基因技术用于威胁人类健康的重大疾病的治疗,比如肿瘤以及各种与基因突变相关疾病的预防与治疗,期望在人类抵抗疾病的免疫方面能有所突破。同时,近年来 DNA 技术已经成为刑事案件、儿童拐卖案件侦破的关键技术,在维护社会安全与稳定、保障人民群众家庭幸福等方面发挥重要作用。

实际上我们对材料性能的要求类似于对人的品性与技能的要求。比如,我们希望一个人既有高超的专业技术,又能与他人很好得沟通协作,并且具有抵抗挫折的能力,即一个人应该具有良好的综合素质。那么一个人从出生后就要经历学习和培训,以获得特定的品质和技能,最终服务社会。对于材料(比如金属结构材料),我们要求合金具有高强度、高塑性、韧性,即材料也要具有良好的综合性能。另外材料成本不能太高,否则大家用不起。炼钢厂将钢水浇铸成铸锭(相当于人的初生),铸锭经过锻打、轧制、加工等各种处理,与人接受教育和培训相似,最后实现我们需要的各项性能指标。图 1 给出材料制备加工与人类成长经历的相似过程。

鉴于此,美国在 2011 年率先提出了“材料基因组计划”(materials genome initiative, GMI),明确提出“将先进材料的发现、开发、制造和使用的速度提高一倍”<sup>[1]</sup>。美国的材料基因组计划一经公布,立即引起了国际广泛关注,中国、欧盟、日本、印度等纷纷跟进,先后提出了

各自的材料基因组计划<sup>[2-4]</sup>。目前,尽管各国材料基因组计划的具体名称有所不同,但是其任务相似,都是围绕集成计算工具、实验工具和数据库来加快材料设计和应用展开。实际上使用的材料多种多样,比如电子材料、能源材料、生物材料、高性能合金等等,对于每一类材料,需要根据其具体的使用性能寻求各自的材料基因表达和内涵。

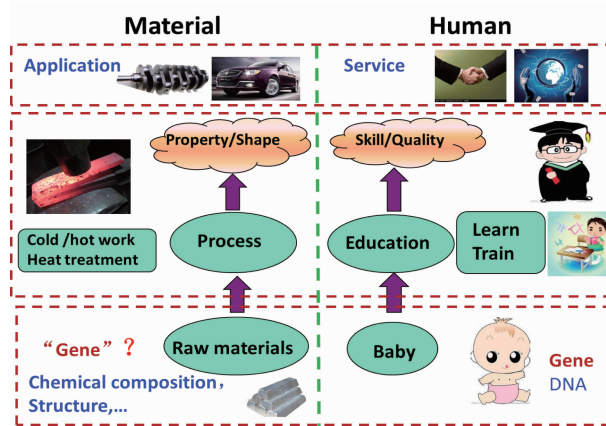


图 1 材料的制备、应用与人成长过程的相似性

Fig. 1 Similarity between materials and human

## 2 合金研发从传统的试错法到高通量设计的思路与案例

近年来国内外专家和学者普遍意识到“一代材料、一代装备”(也有说“一代材料、一代飞机”),这些都凸显材料成为高端装备的关键因素。回顾整个工业技术及材料的发展和应用历程,新一代材料的研发确实需要较长周期,这个周期一般需要 10 年左右的时间。为什么需要这么长的周期呢?因为传统研发新材料的方法是试错法,也就是常说的“炒菜法”。科研人员基于自己的知识和相关经验积累,配制不同成分的材料(合金),合金元素的选择和添加就如同厨师炒菜添加调味料,很大程度上依赖于经验。冶炼合金本身就需要长时间,合金炼好以后,还要经过后续的锻造、冷加工、热处理等工艺,最后才能测试合金的各种性能。如果这块合金性能没有达到预期目标,那就要调整合金元素含量和配比,重复以上过程了。即便材料的性能达到要求,还要向用户(设计人员)推广和介绍新材料,让用户了解新材料;同时还要试车,用新材料代替原材料制造零件,模拟设备运行,检测新材料是否安全可靠。新材料经过这些环节考验合格后,才有可能被设计人员认可和使用。比如,球墨铸铁,从发现到开始应用,经历了 10 年的时间;其他合金研发周期一般都在 10 ~ 20 年的时间。

高端装备制造对高性能材料的需求迫切,尤其是对

缩短研发时间与降低成本的需求,但是新材料研发有其固有的规律和时间要求。有什么办法加快新材料的研发速度,降低合金的研发成本呢?答案是肯定的。美国国家研究理事会(NRC)最近发表的报告《轻质化技术在军用飞机、舰船和车辆中的应用》中引用了两个成功的合金设计实例。一个是由 Olson 领导设计、由 QuesTek 创新公司开发的 Ferrium S53 飞机起落架用钢<sup>[5-6]</sup>;另一个是 GE 开发的燃气涡轮机用 GTD262 高温合金<sup>[7]</sup>。它的设计和开发从概念到生产只用了 4 年时间,研发所用经费是以前同类合金的开发成本的五分之一左右。为什么呢?因为他们在新合金成分设计时,先通过热力学计算搞清楚了合金中的相结构,另外,还结合已有的材料性能模型和数据库,对材料的性能进行了预测。此外,设计时考虑了合金的可铸性、可焊性和抗氧化等因素,他们设计 GTD262(一种镍基高温合金)的成分一次到位,中试和生产过程中也没有出现任何问题。这样避免了以前开发合金那样要经过几次来来回回的重复实验,因此节省了近一半的时间,也大大降低了研发成本。目前, GTD262 高温合金已成功用于航空发动机。

以上两个新材料设计和应用的成功案例给我们很好的启发,也就是借助于热力学计算和现有的材料性能数据的积累与模型,帮助人们加快材料研发的速度,降低研发成本。

### 3 高性能合金的力学性能及其关键“基因”

航空航天工业的发展离不开高性能合金,这些合金包括铝合金、钛合金和高温合金(镍基合金)。铝合金主要用于飞机蒙皮、结构件等,主要是室温和较低温度下的受力零件;钛合金主要用于 550 °C 及以下温度、承受较高载荷的零件,高温合金主要用于航空发动机高温部分零件,比如发动机叶片等。这些合金通常称为结构材料,即用于制造承受力的零件和构件的材料。对于结构材料,如果从使用性能方面来讲,主要考察其强度、塑性和韧性,高温合金还要考察高温下的持久强度、塑性和韧性。强度是结构材料最重要的性能指标,它衡量材料抵抗变形和破坏的能力。塑性是材料断裂前发生不可恢复变形的能力,韧性是材料在变形和破坏中吸收外力做功的能力。合金强度高,则意味着在相同尺寸下零件能承受更高的载荷,如果载荷相同,选择强度高的合金,零件尺寸可以减小,零件自重小;合金韧性好,则意味着材料抵抗损伤能力强,即零件中即使有微小裂纹,这个微小裂纹扩展很困难,或者这个微小裂纹需要扩展较长距离才能引起零件断裂。韧性好的材料,微小裂纹在构件中缓慢扩展中就会被检测到,使人们能够及时更换零件,保证设备安全运行。因此,产

品设计人员为重要零件选择材料时,强度和韧性是必须考虑的力学性能指标。

强化就是提高合金的强度的手段和措施,比如固溶强化、形变强化、细晶强化、第二相强化;韧化就是提高材料的韧性的手段和措施,韧化主要通过合金的微观组织形貌设计实现、也可以添加对韧性有益的部分合金元素。合金的塑性与韧性通常呈现相同的变化规律,但是,强度与韧性往往是相反的变化规律,强度和韧性是一对此消彼长的变量。对于同一个合金,提高强度并不困难,提高韧性也不困难,难的是让强度和韧性同时提高。这是目前合金强化韧化面临的基础科学问题,国际上还没有很好的办法解决这个矛盾问题。近几年,经过科研人员的努力,已在某些合金和金属中取得了一些进展和突破,实现了合金的强度和塑性的同时提高。这些方法和措施比较适合具体成分和组织或者工艺,还难以推广到其他合金。

如何理解高性能合金的强度与韧性的基因呢?合金不存在人类的双螺旋结构的基因,但是合金的性能与原子结构、成分等关系类似于人的特性与基因的关系。比如固溶原子、合金的晶体结构及晶体缺陷、合金中的相结构、合金的微观组织结构,这些因素最后确定了合金的性能(强度与韧性等)。以上每一个因素都是影响合金性能的基因,另外这些因素之间存在特定的关联,我们认为这些因素有机地构成了合金的基因组。到目前为止,从固溶原子-晶体结构-相结构-微观组织-力学性能这条路还未打通,尤其是相结构到力学性能这一段,还需要大量的工作和数据补充。如图 2 所示,我们需要每一阶段都可以定量、准确地表达。科研工作主要从左到右,建立成分、相与组织结构、力学性能的定量表征关系;工程应用,则是从右向左,根据合金的力学性能要求反推出微观组织结构,进而反推出合金的成分。

合金的性能从源头来讲取决于合金的成分,但是与性能有直接关系的是相和微观组织,微观组织由一种相或者多个相构成,相与微观组织取决于合金成分。什么是合金的相呢?相是物质存在的物理状态。比如水,有固相、液相和气相,在一个大气压下,零度以下水就是固相(冰),零度 ~ 100 °C 之间为液相(水),高于 100 °C,水就变成气相。我们目前使用的工程合金都是固态物质,因此合金中的相都是固相。对于合金中的固相一般是固溶体和化合物。固溶体就是固体溶液,一种原子固溶于另一种原子晶体结构中形成的成分均匀的固相;化合物是两种或者两种以上元素形成的具有一定原子比的物质,比如  $\text{Fe}_3\text{C}$ 、 $\text{Ni}_3\text{Al}$  等。对于钛合金来讲,室温下的固相是  $\alpha$ 、 $\beta$  相,  $\alpha$  是密排六方晶体结构,  $\beta$  是



**Dream: From property requirement of an alloy, microstructure can be determined, and chemical compositions can also be figured out.**

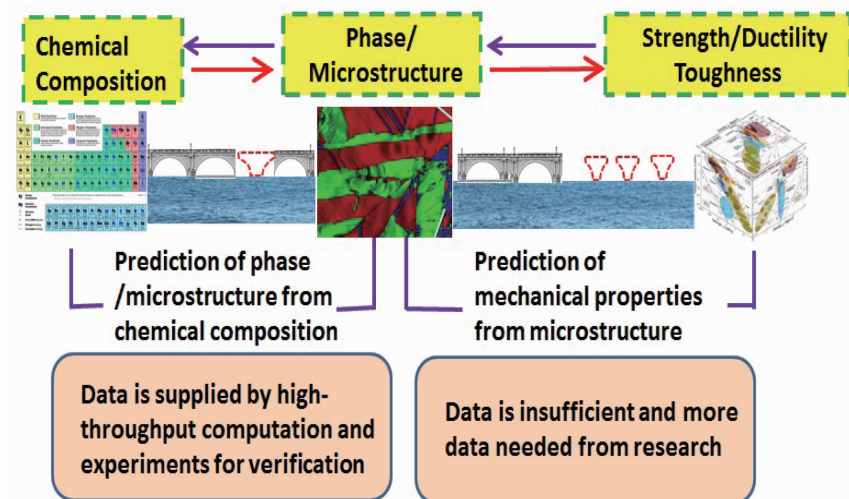


图 2 材料成分-相/微观组织-性能的关系<sup>[1]</sup>

Fig. 2 Relationship among composition-phase/microstructure-property of materials<sup>[1]</sup>

体心立方晶体结构，我们在熔炼钛合金中加入合金元素，比如 Al, V, Mo, Fe, Zr, Nb 等，绝大多数固溶在  $\alpha$  和  $\beta$  相中，还有少量形成化合物，比如  $\text{Ti}_3\text{Al}$ 、 $\text{Ti}_5\text{Si}_3$  等。室温下的各种相在热加工、热处理过程中通过扩散、形核与长大，或单独存在，或者与其他相组合形成合金的最基本的构成单元，即微观组织的组成物。相与微观组织是直接影响合金性能的关键因素。

常用的金属材料都是晶体，我们使用的金属材料都是多晶体，一块金属由成千上万个晶粒组成。研究发现金属晶体中存在缺陷，也就是金属晶体中局部原子排列混乱的区域，即晶体缺陷。按照空间尺寸大小，晶体缺陷分为点缺陷、线缺陷和面缺陷。点缺陷是晶体中的空位和固溶原子，线缺陷是位错，面缺陷是晶界、亚晶界和相界面。这 3 种缺陷都可以提高合金的强度，比如固溶强化（由固溶原子引起）、加工硬化（位错数量增加）和细晶强化（增加界面数量）。

强化的本质是什么呢？对于金属材料来讲，强化的本质是增加位错运动的阻力。位错是线缺陷，这是所有金属材料中最普遍存在的晶体缺陷，对合金的强度和塑性都有重要的影响。位错在金属晶体中可以运动，位错的运动导致金属屈服而发生塑性变形。基于位错理论，增加位错运动的阻力的因素可以强化金属，减低位错运动阻力的因素使金属的塑性变形更为容易。晶体中缺陷都会增加位错运动的阻力，使位错运动困难，强化效果依据对位错阻力大小而定。但是对于金属来讲，位错运动很困难，强度很高，这样带来的另一个结果就是金属很难发生塑性变形，无法消耗外力做功。如果我们持续

增加外力，金属很容易突然断裂，这对零件安全工作非常有害。对于高性能合金来讲，我们需要位错运动有阻力（高强度），必须可以运动，适当高应力作用下运动，发生塑性变形，消耗外力做功，这样合金才会表现出强度、塑性与韧性的匹配，才是性能优良的工程合金。可见，晶体缺陷也是决定高性能合金的关键基因。

#### 4 确定合金“基因”的技术手段

人类基因组计划的实施为材料基因组计划提供了非常有益的借鉴，即高通量的试验测试技术与工具以及高通量的计算方法。材料的微观组织与相的尺寸在微米到纳米尺度，需要高精度的表征设备。近年来各种先进的材料表征、分析技术，尤其是高精度微米和微区表征设备的开发和应用（比如高分辨场发射扫描电镜、聚焦离子束技术和飞秒激光技术等），为快速获得材料的性能数据提供了保证。基于此，科研人员相继开发了高通量测试材料相与组织结构的测试表征技术<sup>[8]</sup>。另一方面，计算材料学近 10 年有了长足发展。现在，科研人员能够通过高性能计算和计算机群的并行计算，获得从材料成分到晶体结构、相以及物质的弹性热容等参数，也能对合金的强化作用给出定性的解释<sup>[9-10]</sup>。但是，到目前强度、韧性、塑性都不能直接从合金成分计算出。因此，合金力学性能数据必须依靠试验测试获得。

这里主要介绍几种用于高性能合金研发的高通量实验技术和计算方法。

##### 4.1 测试多元合金相图的扩散多元节方法

相是合金性能的关键基因之一，如何获知合金中的

相呢?对于具体的合金体系,相的种类和数量随着合金元素的改变发生变化,这就需要对合金中存在的相画一张地图,即相图。相图一般是二维平面图,横轴是成分,纵轴是温度,平面内就是合金体系在特定的温度、成分下存在的相。可见,相图是我们设计合金的重要工具。因此,要获得一种合金的相图,我们需要配制一系列成分的合金,然后通过加热和冷却测试给定成分合金中的相随着温度变化的变化,将一系列成分合金的相的数据汇总在一起,就可以绘制出相图。可见,这种绘制相图的方法非常耗时,对于任何给定体系合金,需要十几种

甚至上百种成分含量合金的配制和熔炼,然后再测试每一种成分合金的相,非常耗费时间。

合金相图的绘制有没有快捷又准确的方法呢?有!就是扩散多元节方法。扩散多元节法是在二元扩散偶的基础上发展而来。图3a的示意图给出了Ti-Cr-Ti<sub>3</sub>Al-Ti<sub>2</sub>Si扩散多元节,图3b是用扩散多元节中的三元结处得到的1000℃等温截面图,图3c是按照传统相图测试方法用100多个试样测试的1000℃的等温截面图。图3b和图3c给出的物相一致,由此证实了扩散多元节法在相图绘制方面的可靠性和高效率。

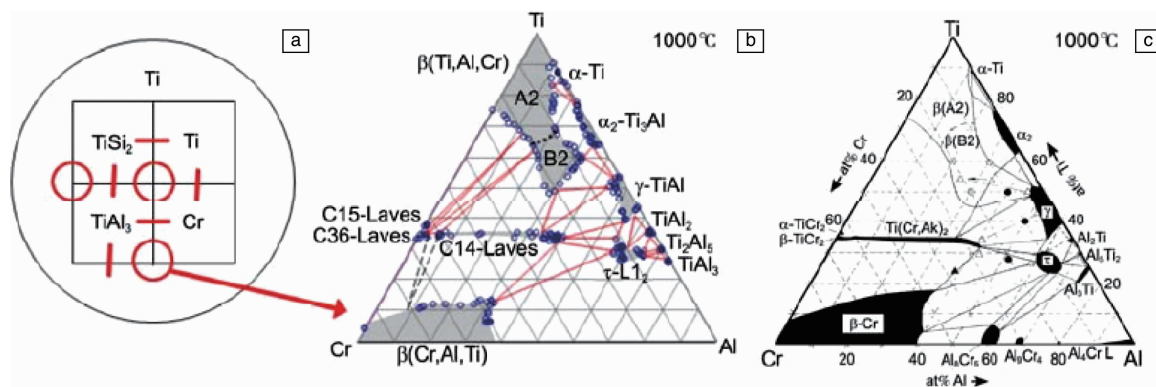


图3 扩散多元节法在钛合金相图中的应用<sup>[8]</sup>: (a)Ti-Cr-TiAl<sub>3</sub>-TiSi<sub>2</sub>扩散多元节示意图, (b)扩散多元节三元结处获得的Ti-Al-Cr体系1000℃等温截面, (c)从100多个平衡合金中获得的Ti-Al-Cr体系1000℃的等温截面

Fig. 3 Application of the diffusion multiples in titanium alloys<sup>[8]</sup>: (a) the Ti-Cr-TiAl<sub>3</sub>-TiSi<sub>2</sub> diffusion multiples, (b) isothermal section of 1000 °C from the diffusion multiples, (c) isothermal section of 1000 °C from measuring about 100 samples

## 4.2 用于合金组成相的性能测试的高通量技术

我们要设计、研发高性能合金,仅仅知道合金的组成相还是不够的,还要获得这些相的性能特点。在此基础上,我们才能优化合金成分,获得需要的优异性能。如果还是按照传统思维和方式去配制合金、获得所需要的相、再测试其性能的话,效率低,耗时长。为了加速高性能合金的研发速度,需要高通量测试技术高效获得合金组成相的性能数据库。什么是高通量测试技术呢?其含义是高效获得测试对象的性能数据。将上面提到的扩散多元节和高精度微米尺度的测试技术相结合,就可以实现合金组成相的性能的高通量测试。扩散多元节随着成分的变化有不同的相,尺寸在几十到几百微米范围。最近研究人员发展了飞秒激光测试材料的热导率、热膨胀系数,在一个扩散多元节上可以测出多个成分和相的性能,结果与大块材料的性能数据一致,效率提高几十倍<sup>[11-12]</sup>。其他性能,包括弹性常数、居里温度、比热容等物理性能都可以用飞秒激光技术高速确定;还可以测试微尺度相的光学性质、介电常数、电导率等。比较复杂的是材料的力学性能,因为力学性能测试需要特殊要求的试样,比如狗骨头状的拉伸试样、具有一定尺寸比

悬臂梁试样等等。现在已有微米纳米力学测试分析技术,可实现在扩散多元节上不同区域性能的测试,比如纳米压痕技术可以测试微米尺度的硬度和模量数据。强度的测试需要用聚焦离子束在微米区域加工柱状试样,进行压缩和拉伸或者弯曲,测试合金组成相的强度等数据<sup>[13-16]</sup>。目前韧性还无法通过微区测试技术获得,因为韧性对材料的尺寸要求严格,微米区域很难满足试样韧性测试的需求。

## 4.3 合金组成相与性能的高通量计算方法

计算材料学的快速发展为高通量计算提供了技术和方法的支持。在不同的时间及空间尺度上,有不同的计算方法,如图4所示。

第一性原理计算主要用于从成分到晶体结构的计算,还可以计算晶体的一些常数,如弹性常数、弹性模量、体模量等参数,并对合金的固溶强化效果给出定性的规律。还有研究人员将第一性原理用于晶体中扩散系数的计算,包括自扩散系数、互扩散系数等,因为扩散系数是研究合金相变(在合金中发生的一种相变成另一种相的转变)的重要参数<sup>[17-18]</sup>。分子动力学计算可以给出合金几个纳米到几十纳米尺度的力学性能、相变过程、晶体

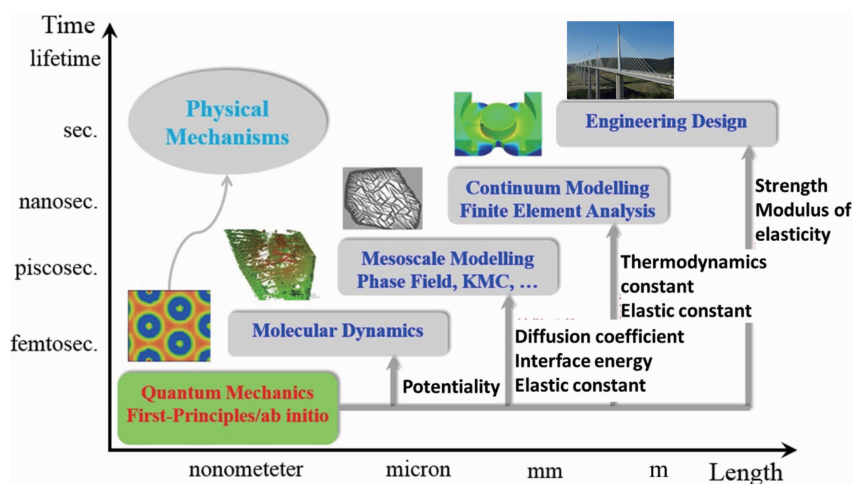


图 4 常用计算与模拟方法的空间/时间尺度

Fig. 4 Space/time scales of computation and simulation methods

缺陷及其运动规律,但是受到计算机性能的限制,其计算尺寸最大不超过几百纳米。

对于高性能合金,相变对其微观组织影响很大。如何用计算的方法研究相变呢?现在已经有了很成熟的方法,就是 CALPHAD 方法。这个方法主要用于计算多元合金在不同温度下各个相的成分、体积分数、稳定温度范围、相变温度等,还可以计算相场动力学模拟需要的相变驱动力、扩散过程的热力学参数,也用于计算凝固过程的潜热、比热、液相温度、固相温度等等。CALPHAD 方法经过长期发展和完善,已经成为国际著名航空发动机制造单位与材料研究机构的重要计算工具<sup>[8]</sup>。

前面讲到,与合金力学性能直接相关的是相和微观组织。那么微观组织怎么形成的?合金的微观组织由相构成的,合金在温度变化时发生相变,相变的结果就是形成了由生成的相组成特定的微观形貌的组织结构,称其为微观组织。微观组织可以由一个相构成,也可以由多个相构成,微观组织可以在显微镜下直接观察到,并呈现一定的形貌,或球形、或者块状、或者片状交替等等。这些微观组织越细小,合金的强度与塑性越好,即细晶强化效果。能不能用计算机模拟相变和微观组织呢?答案是肯定的,采用的方法是相场动力学模拟。相场动力学模拟基于相变路径沿最低能量路径,其优点是不需要对合金的初始组织进行假设,允许微观组织形貌变化,可以用于预测复杂的微观组织。最早相场动力学用来模拟晶粒长大,现在可以模拟复杂体系相变过程及其微观组织。有研究人员将晶体缺陷引入相场模拟中,使计算的结果与实际更为接近。由于相场计算需要大量的热力学参数,比如 Gibbs 自由能、晶格常数、界面能、各向异性的弹性常数以及这些性能随着成分与温度的变化。这些参数来源于 CALPHAD 计算结果、第一性原理计算

或者实验结果。实际工程使用的合金均是多元合金,具有复杂的相组成和微观组织结构,采用单一的计算或者实验技术很难准确描述合金的相变与组织演化,研究人员采用多种计算模拟技术结合并与高通量实验技术耦合,构建了铝合金热力学数据库,预测了铝合金凝固组织的演化规律;采用相场模拟计算对镍基高温合金的加工工艺进行优化设计,取得了理想的结果<sup>[19-20]</sup>。这些可喜的研究进展对于高性能钛合金的研发具有重要的借鉴作用。

有限元是工程上应用最为广泛的一种数值分析方法。随着计算机技术的迅速发展,在工程领域中,有限元分析(FEA)越来越多地用于仿真模拟,求解真实的工程问题。作为一种求解偏微分方程边值问题的近似数值技术,研究者发现这些偏微分方程可以用来描述流动、电磁场以及结构力学等。目前有限元在材料加工方面已经得到实际应用,其中 DEFORM 是一套基于有限元的工艺仿真系统,用于分析金属成形及其相关工业的各种成形工艺和热处理工艺。研究人员在计算机上可以模拟金属、合金的整个加工过程,显示金属在加工中的应力应变分布,帮助工程师和设计人员选择合适的加工参数和模具,显著提高工模具设计效率,降低生产和材料成本,并缩短新产品的研究开发周期。最近有研究者利用有限元方法依靠微观组织结构来模拟合金性能,以达到材料微观组织结构的性能导向型设计与预测的目的<sup>[21]</sup>。这些研究进展为高性能钛合金的快速设计与加工提供了重要的借鉴作用。

## 5 结 语

“一代材料、一代装备”,高性能钛合金是我国航空航天等领域的重要结构材料,其力学性能(强度、塑性与韧性)是保障构件安全可靠性的关键。目前,围绕“成分—组织—性能”主线,在材料基因组计划的推动下,研



究人员正在采用高通量计算和实验技术突破高性能钛合金研发的瓶颈,加速新型钛合金研发进度。尽管目前科技人员还无法准确计算多相组成合金的强度、塑性和韧性等力学性能指标,但是研究工作已经取得了一些积极的结果。通过第一性原理计算可以构建从成分到相的预测,扩散多元系的高通量实验方法确定相与成分的关系,相场动力学计算可以预测微观组织结构,将成分与微观组织结构关联起来,再结合微区精确性能测试表征技术可以获得合金微观组织的性能数据。对以上各环节研究数据进行有机结合和统一,并基于钛合金大数据技术的发展成果,有助于实现提升高性能钛合金的研发速度、降低研发成本。

## 参考文献 References

- [1] Zhao Jicheng(赵继成). *Chinese Journal of Nature*(自然杂志), 2014, 36(2): 89–103.
- [2] Wang Hong(汪洪), Xiang Yong(向勇), Xiang Xiaodong(项晓东), et al. *Science & Technology Review*(科技导报). 2015, 33(10): 13–19.
- [3] Li Nannan(李楠楠), Shen Yisun(沈一笋), Zang Liang(臧亮), et al. *Materials China*(中国材料进展). 2016, 35(2): 156.
- [4] Fan Xiaoli(范晓丽). *Materials China*(中国材料进展), 2015, 34(9): 689–697.
- [5] Kuehmann C J, Olson G B. *Mater Sci Technol* [J], 2009, 25: 472–478.
- [6] Olson G B. *Science* [J], 1997, 277: 1237–1242.
- [7] Jiang L, Zhao J C, Feng G. U. S., 20100135847 [P]. 2010–06–03.
- [8] Zhao Jicheng(赵继成). *Chinese Science Bulletin* (科学通报) [J], 2013, 58(12): 3647–3655.
- [9] Wang Shaoqing(王绍青), Ye Hengqiang(叶恒强). *Chinese Science Bulletin* (科学通报) [J], 2013, 58(6): 3623–3632.
- [10] Chen Longqing(陈龙庆). *Chinese Science Bulletin* (科学通报) [J], 2013, 58(6): 3638–3641.
- [11] Zheng X, Cahill D G, Weaver R, et al. *J Appl Phys* [J], 2008, 104: 073509.
- [12] Zhao J C. *Prog Mater Sci* [J], 2006, 51: 557–631.
- [13] Uchic M D, Dimiduk D M, Florando J N, et al. *Science* [J], 2004, 305: 986–989.
- [14] Uchic M D, Dimiduk D M. *Mater Sci Eng A* [J], 2005, 400–401: 268–278.
- [15] Kim J Y, Jang D C, Greer R J. *Acta Mater* [J], 2010, 58: 2355–2363.
- [16] Zhang Xingdong(张兴东), Liu Libin(刘立斌), Wang Jianli(王建丽), et al. *The Chinese Journal of Nonferrous Metals*(中国有色金属学报) [J], 2014, 24: 2836–2843.
- [17] Luo Hubin(罗湖斌), Hu Qingmiao(胡青苗), Yang Rui(杨锐). *The Chinese Journal of Nonferrous Metals*(中国有色金属学报) [J], 2010, 20(s1): 399–343.
- [18] Zhu Linggang(祝令刚), Hu Qingmiao(胡青苗), Yang Rui(杨锐). *The Chinese Journal of Nonferrous Metals*(中国有色金属学报) [J], 2010, 20(s1): 544–549.
- [19] Du Yong(杜勇), Xu Honghui(徐洪辉), Kong Yi(孔毅), et al. *China Materials*(中国材料进展) [J], 2010, 29(6): 28–40.
- [20] Cao Dongjia(曹东甲), Ta Na(塔娜), Du Yong(杜勇), et al. *China Materials*(中国材料进展) [J], 2015, 34(1): 50–63.
- [21] Zhang Weibin(张伟彬), Dong Yu(杜勇), Peng Yingbiao(彭英彪), et al. *Material Science & Technology*(材料科学与工艺) [J], 2016, 24(2): 1–28.

(编辑 惠琼)