

特约专栏

集成计算材料工程在钛合金微观结构设计中的应用的进展

王 栋¹, 王云志^{1,2}

(1. 西安交通大学前沿科学技术研究院, 金属材料强度国家重点实验室, 陕西 西安 710049)

(2. 俄亥俄州立大学材料科学与工程系, 美国, 俄亥俄州 43210)

摘 要: 基于集成计算材料工程的思想, 结合 CALPHAD、相场动力学模拟与关键的实验测量手段、以及钛合金中最新发现的非传统的固-固相变机制, 和近来提出的伪调幅分解相变机制为钛合金微观结构设计提出了新的方向。这一机制首先被 Ni 和 Khachaturyan 提出并用来解释斜纹组织的形成, 并被 Fraser 等人引入到钛合金体系, Banerjee 和 Wang 等人通过实验和模拟证明了其正确性, 这种新的转变路径为设计具有超细、超均匀 $\alpha + \beta$ 相微观结构新型钛合金提出了新的设计思路, 并且有可能产生新的机械性能。另外, 为了扩展制备超细、超均匀钛合金微观结构所需的温度及成分范围, 基于存在的热力学数据库, Fraser 等人提出了一种通过预先预相分离来产生成分和结构不均匀, 进而改进钛合金微观结构的新方法, 作者团队基于热力学数据库和相场动力学的计算机模拟证明了其存在。对集成计算材料工程方法在提高设计与选择具有超细、超均匀微观结构的钛合金的效率方面进行了评论总结, 集成计算材料工程为钛合金的开发设计提供了新的思路。

关键词: 钛合金; 相变; 伪调幅分解机理; 计算机模拟; 相场动力学

中图分类号: TG111 **文献标识码:** **文章编号:** 1674-3962(2015)04-0282-07

Progress in ICME Approach to Design of Novel Microstructures for Ti-Alloys

WANG Dong¹, WANG Yunzhi^{1,2}

(1. Frontier Institute of Science and Technology, State Key Laboratory for

Mechanical Behavior of Materials, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

(2. Department of Materials Science and Engineering, The Ohio University at Columbus, Ohio 43210)

Abstract: In this paper we review ICME approach integrated CALPHAD and phase field modeling with critical experiments exploring a newly discovered, non-conventional, solid-solid phase transformation pathway based on the so-called pseudo-spinodal mechanism. This mechanism was first proposed by Ni and Khachaturyan to explain the chessboard structure and then was used by Fraser et al. to explain the formation of refined alpha microstructure in Ti-alloys. We show that this new transformation pathway offers a new design strategy for Ti alloys to obtain extremely fine and uniform $\alpha + \beta$ microstructures that could potentially have highly attractive balances of mechanical properties. To broaden the processing window for such a mechanism to operate, a different non-conventional transformation pathway that involves precursory phase separation is reviewed as well.

Key words: Ti-alloys; phase transformation; pseudo-spinodal decomposition; computer simulation; phase field

1 前 言

集成计算材料工程 (ICME) 是材料基因组计划 (The Materials Genome Initiative-MGI) 的重要部分, 它旨在把计

算材料科学的工具集成成一个整体系统以加速材料的开发, 改造工程设计的优化过程, 并把设计和制造统一起来, 从而在实际制备之前就实现材料、制造过程和构件的计算机优化, 其最终目标是提高先进材料的发现、开发、制造和使用的速度。

大部分合金结构材料都由多相组成, 并且可以通过第二相析出物的形成来进行强化。第二相析出物颗粒的体积分数、尺寸、形状、取向、共格性以及第二相颗粒的空间分布特性决定了合金的微观结构, 并将

收稿日期: 2014-05-22

基金项目: 科技部 973 计划项目 (2014CB644003)

第一作者及通讯作者: 王 栋, 男, 1983 年生, 副教授, 博士生导师, Email: wang_dong_1223@mail.xjtu.edu.cn

DOI: 10.7502/j.issn.1674-3962.2015.04.04

进一步影响结构材料的变形机制和力学性能。其中的各向异性界面的密度和特征以及它们的空间均匀性起着非常重要的作用。例如, 铝合金结构材料是在一个极小的原子尺度内, 通过形成亚稳的 GP 区来获得极高的强度^[1-3]; 形成超细层状铁素体 + 渗碳体^[4-5]或铁素体 + 奥氏体的^[6]的超高强度和超高韧性钢; 镍基高温合金高温强度的提高在很大程度上是通过细化沉淀相(Ni_3Al 结构)的尺寸(纳米尺度)来实现的^[7-8]。对于钛合金来说, 其随成分及处理工艺的不同, 将产生多种的相变并最终导致出现多种非平衡相。这一方面为通过相设计调节钛合金的性能提供了极大空间, 另一方面增加了相设计的复杂性和难度。以钛合金中的 α 相形成为例, 低温 α 相通常通过两种方式形成, 一种是沿 β 晶粒的晶界形核长大^[9-10]; 另一种是魏氏组织, 它既可以沿 α 相晶界形核, 也可以从已有的魏氏组织片形核^[10-12], 形成相对较粗的集群状层片组织。绝大部分形核是以非均匀形核的方式进行, 只有极少甚至几乎没有均匀晶内析出相存在。然而, 最近一些激动人心的新理论^[13-14]和实验发现^[15]为我们利用新的、非传统的晶内转变的方法来开发和设计超细、超均匀的两相组织($\alpha + \beta$)提供了机遇和可能。基于 Ni 和 Khachaturyan 为解释斜纹组织的形成所提出的伪调幅分解机制这一概念^[14], Fraser 等人提出了设计超细钛合金两种新机理。

伪调幅分解机理: 成分起伏导致在 α 相稳定化元素富集区(或 β 稳定化元素贫化区)的 β 相发生 $\beta \rightarrow \alpha$ 等成分转变。然后, 在等温回火过程中, 母相 β 和产物相 α 的长程扩散分离导致各相成分向平衡成分靠近。

预相分离机理: 母相 β 预先分离成在空间均匀分布的纳米尺度的 β 相稳定元素富集区和 β 相稳定元素贫化的区域(α 相稳定元素富集区), 在后续相变中 β 相稳定元素贫化的区域转变成 α 相。

伪调幅分解的机理包括成分(c)位于母相与生成相自由能成分曲线交点($c_0(T)$ 成分)附近的母相分解(如图 1a 所示)。即很小的成分起伏驱动母相沿着 $c_0(T)$ 的反方向移动分解成细小均匀分布的 β 相稳定元素贫化和富集区(类似调幅分解的成分起伏涨落)。其中 β 相稳定元素贫化的区域(c_{lean})等成分转变为成分远离平衡的具有 HCP 结构的 α 相。最后恒温回火过程中, 通过连续的长程扩散驱动母相 α 和生成相 β 的成分向平衡成分转变。除此以外, β 相中存在真正的调幅分解区, 预示了可能出现的预相分离机理(图 1b 所示)。母相 β 预先分离成在空间均匀分布的纳米尺度的 β 相稳定化元素富集区域(c_{rich})和

β 相稳定化元素贫化(c_{lean})的区域, 在后续相变中 c_{lean} 区域由于成分相近而转变成 α 。由于两种 β 固溶体具有不同的点阵参数, 可以预计在它们之间会形成一个共格应力场, 这个应力场在 α 相的形核过程中产生影响。上面所描述的 $\beta \rightarrow \beta + \alpha$ 转变的复杂途径是由 β 相中两种不稳定性: 成分不稳定性和结构不稳定性相互竞争的结果。因此为了加强或抑制某种途径, 需要通过调整合金成分和热处理制度来调整两种不稳定性相对强度。

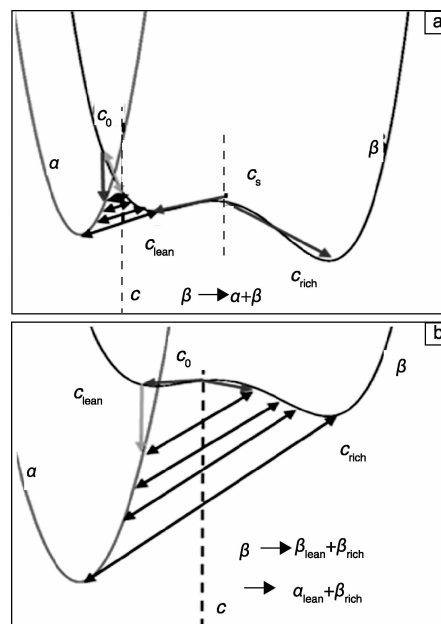


图1 钛合金中的两种非经典形核机理: (a) 伪调幅分解机理, (b) 预相分离机理

Fig. 1 (a) Pseudo-spinodal mechanism and (b) precursor spinodal mechanism

本文将对这两种非经典转变机制在钛合金中的应用进行总结, 通过相场动力学模拟的方法, 集成原子尺度模拟所获得的模量、热力学与动力学数据库以及实验预测, 发展一种集成计算材料科学与工程的方法加速实现材料独特的转变机制和材料设计理念, 来研制并开发组织均匀细小的, 性能更加优异的新一代钛合金。

2 模拟预测方法

为了描述这些晶间/晶内转变的多种路径, 材料组织计算模型必须能够同时处理均匀/连续的(如: 同成分有序化、调幅有序化和调幅分解)和非均匀的(传统形核与长大)转变。基于梯度热力学和微观弹性理论, 相场方法(又称为弥散界面方法)为严格有效地处理这些极具挑战性的复杂问题提供了一个理想的理论框架。在相场方法中, 任何一个多相体系的总体自由能

(包括: 化学、弹性和界面能)都是由一个包含了局部化学、结构以及他们的空间变化(梯度)的泛函来描述。不论是调幅有序化/分解或者通过形核长大的相分离, 在多维自由能成分曲面(势能面)上的最小能量路径自动决定了转变路径和沿着该路径的母相和生成相之间微观结构状态。

图 2 描述了基于相场动力学的钛合金中相关机理对

应的微观结构模拟及相对应的实验观察^[16], 图 3 描述了残余应力影响下多晶 β 相中 α 相析出过程中的晶向选择的相场模拟^[12, 17]。相场动力学模拟可以完美地描述钛合金不同状态下的微观结构, 是设计先进钛合金的重要工具。然而, 相场动力学方法所预测的相变路径与相对应的微观组织结构的准确性和定量化程度取决于所使用的自由能曲面(考虑界面共格应变和界面缺陷对自由能曲

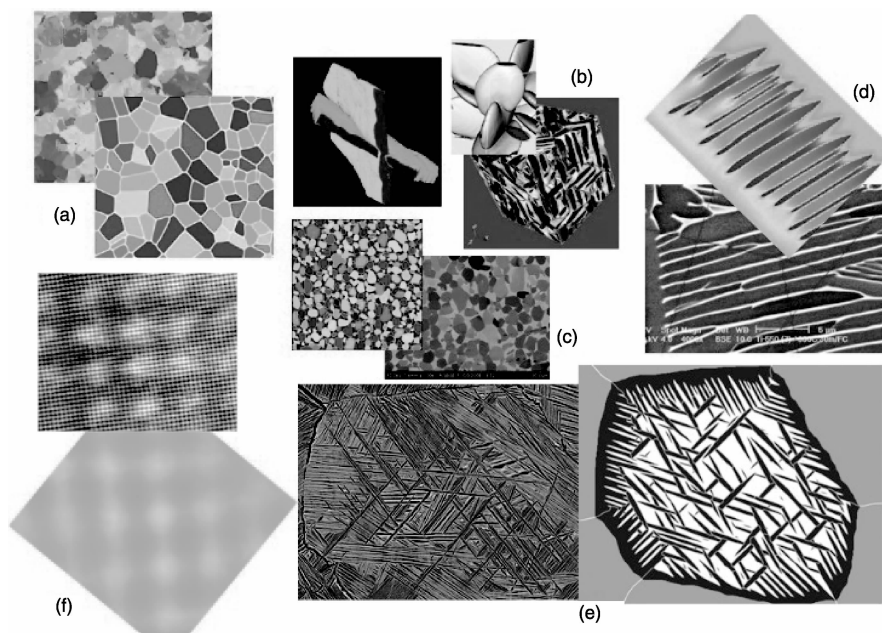


图 2 相场模拟预测的显微组织与实验结果的对比(实验结果来自 Fraser 小组研究工作): (a) 结构控制的晶粒生长, (b) 交叉板和包状显微结构, (c) 球形 α , (d) 边片 α , (e) 网篮状结构, (f) 调幅分解产生的成分分布^[16]

Fig. 2 Microstructure comparisons between phase field simulations and experiments of Ti alloys^[16]

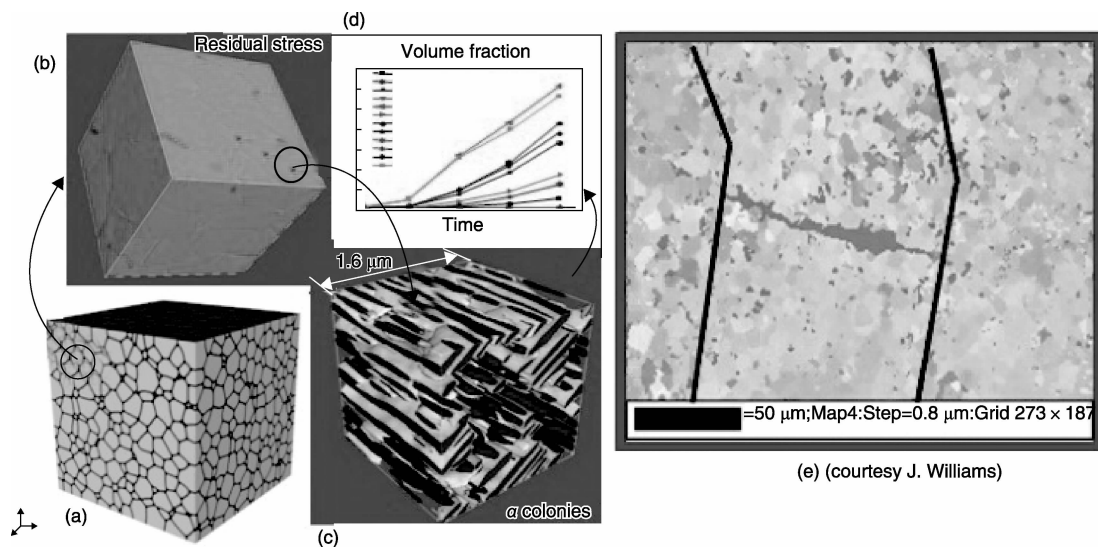


图 3 残余应力影响下多晶 β 相中 α 相析出过程中的晶向选择的相场模拟: (a) 起始单相 β 的多晶显微组织, (b) 多晶样品在一个体积元中的应力场(σ_{11}), (c) 在(b)的局部应力状态影响下一个晶粒中形成的 α 相团, (d) 在沉淀过程中不同晶向的体积分数随时间的变化, (e) 实验观察到的微米组织和裂纹萌生之间的相关性^[12, 17]

Fig. 3 Phase field simulations of variant selection of α phase in Ti alloys^[12, 17]

面的影响)在成分与结构空间上的精确性。特别要注意的是,在建立包含化学自由能、弹性应变能和界面能的总体自由能表达式时,必须考虑以下因素:①体化学自由能的热力学描述的准确性;② $\beta \rightarrow \alpha$ 、 $\beta \rightarrow \omega$ 转变的相变晶体学:母相与析出相的点阵对应关系,晶体学位向关系随晶格常数对合金成分的函数变化的对应关系;③结构转变所产生的相变应变的自协调性;④析出相长大过程中异质相界面缺陷结构的发展;⑤在形核的析出物颗粒与已经存在的析出相及位错等其它缺陷的弹性相互作用。精确自由能表达式的建立可通过集成的高通量的实验测量、CALPHAD 相图热力学计算和第一原理计算等方法来实现。

利用第一原理计算结果、相图热力学计算和扩散动力学数据库以及高通量的实验结果获得相场模拟所需要的定量输入参数,通过微观相场模型模拟 α 相晶内转变路径的早期微观组织的演变过程。在模拟预测中,定量相场模型的关键因素取决于输入参数的准确性。如前所述,作者研究团队主要通过结合关键的实验数据、原子尺度的模拟以及相图热力学数据库来获得模型所需要的关键输入参数。对于微观相场中的梯度能量系数的确定,作者将通过拟合实验表征和原子模拟手段所获得的成分与结构序参量沿着界面的变化曲线来确定。最初的拟合过程可以通过试错法来实现,然后通过更加复杂的最小二乘法迭代的数值计算方法实现。析出相/基体界面的缺陷将影响界面能、共格弹性应变能和界面原子动力学特性。作者将利用晶体学理论(包括边边匹配、O点阵和拓扑学理论)和实验表征手段来确定半共格界面缺陷的结构(包括界面位错的伯格斯矢量、位错间距、结构台阶的高度及间距等)。基于这种方法,近来的模拟确定了Ti-6Al-4V合金 β 基体中半共格界面缺陷结构对 α 析出相的相变应变、界面能各向异性、惯习面取向以及 α 析出相平衡形状的影响,所获得的模拟结果与实验结果定量相符^[18]。根据界面移动的迁移率和扩散原子的相对大小,第二相的生长可以分为扩散控制型、界面控制型和两种混合控制型。由于固态相界的移动性很难仅仅通过实验测量获得,作者将采用实验与模拟相结合的方法:首先原子探针测量沿非平衡界面的成分梯度,然后与不同界面移动性参数下微观相场模拟结果相比对,最后选取模拟所得界面浓度梯度与试验测量符合得最好的那一个来确定界面移动性参数。

模拟尺度增加所导致的另一个复杂性是粗晶相场模拟中界面宽度。为避免界面能和模拟系统尺寸的限制,可采用KKS模型^[19](这个模型是Steinbach等提出的模型

的进一步延伸^[20-21])。这个模型使我们能在保留传统的CALPHAD自由能表达式的同时,通过将界面处理成沿共轭线的具有相同扩散势垒的两相混合物从而可以独立调节界面能与梯度能量系数。

利用上面所描述的最基本的方法所获得的相场模型输入参数以及上述大尺度模拟的多相界的KKS处理方法,作者确信能够通过计算机模拟获得定量结果并预测实验。但是,在集成不同的模拟技术与实验表征手段时,一个非常重要的限制因素是缺乏定量比较模拟组织和实验观察的微观组织的客观方法。但是,即使采用精确的、定量的输入参数,通常仍然很难确定相场预测结果的准确性,这主要是因为以往比较模拟结果与实验微观组织结构主要是为了被动地解释实验现象。然而,最近一系列主动地、定量地比较模拟与实验结果的方法出现了。这些方法是通过利用n-点的相关函数和随机过程,对数字化图像进行统计分析。这一类似的统计方法已经被用来评估天体物理中的理论模型预测结果的准确性,而现在被广泛地引入材料研究领域。这种方法将架起微观组织相场模型预测与实验观察之间的桥梁。这种相场模拟预测与实验观察的精确的定量比较将对进一步区分不同合金在不同热处理制度下不同相变机理起到重要作用。

为了指导前面所提到的几种非常规的相变路径,定量的计算模拟是不可或缺的。这一方法在作者用三元模型体系来模拟预测更复杂的多组元商用合金时更是如此。对于开发的定量模拟工具,其中一些基础知识是至关重要的,如: c_0 和 T_0 对合金成分的敏感程度;当合金成分或时效温度接近 c_0 或 T_0 到什么程度时,传统的形核与长大过程被抑制而出现伪调幅分解的现象。这些理论知识将为开发和设计先进的商用合金提供有益的指导。

3 钛合金超细微观结构设计举例

3.1 伪调幅分解机理

为了研究伪调幅分解机理在钛合金超细超均匀 $\alpha + \beta$ 微观结构设计中的作用,首先需要确定伪调幅分解存在的温度或者成分范围。基于存在的热力学数据库,作者选择一个简单的二元合金系统,Ti-Mo合金作为研究的模型材料。相比于商业钛合金,如Ti-5553(Ti-5Al-5V-5Mo-3Cr-0.5Fe,质量分数)和 β -21s(Ti-15Mo-3Al-2.7Nb-0.3Si,质量分数),Ti-Mo合金是一个相对简单的体系,但是这个体系包含了研究伪调幅分解所需要的所有关键基础知识,例如:如何通过成分和温度调节来控制伪调幅分解机理的发生,具体包

括临界成分 c_0 的敏感度以及初始成分和温度如何影响钛合金的相变路径(如何诱发伪调幅分解这一非经典形核机理),对于简单模型合金的研究,将为我们找到影响钛合金形核机制的关键因素,进而引导我们对商业合金的开发设计。

基于最新的 PANDAT 自由能模型及热力学数据库^[22-24],作者得到了 Ti-Mo 合金不同温度的临界成分 $c_0(T)$,在 700 °C 和 600 °C 时期临界成分分别是 3.0 和 4.35% Mo(质量分数,下同)。在 600 °C 的原子迁移率或 Ti-Mo 系统互扩散系数,例如 $D = 10^{-18} \text{ m}^2/\text{s}$ 时,也可以从相图计算方法 CALPHAD^[25] 获得。对于相场的动力学系数(与时间相关的金斯伯格-朗道方程的动力学系数),使用 $M = 6.0 \times 10^{-8} \text{ J/m}^3 \cdot \text{s}$,以保证其是扩散控制的动力学过程^[26]。在相场模拟中,计算的尺度由界面能的大小决定,在模拟中,我们假设 α 和 β 相在时效温度时的界面能是 100 mJ/m^2 ,从而产生一个亚微米尺度。

使用 PANDAT 热力学数据库以及上述的动力学参数等,作者模拟了 Ti-Mo 合金在靠近临界成分时 α 沉淀相的微观结构演化过程(图 4 所示)^[27],模拟表明微观结构演化遵从非经典的伪调幅分解机理。Ti-Mo 合金初始成分含有 5% Mo,大于体系 700 °C 时的临界成分 c_0 (3.0% Mo)。图 4a 和 a' 描述了体系由于热振

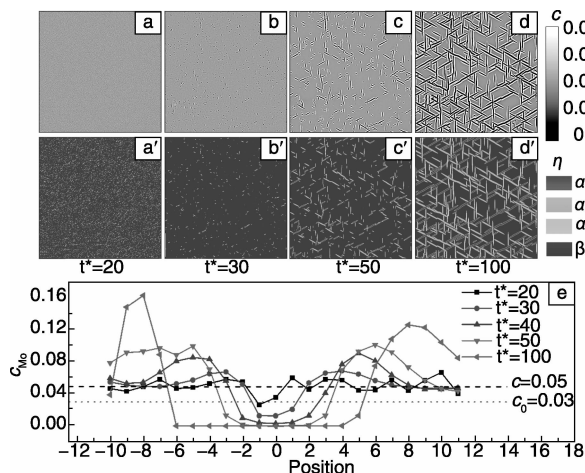


图 4 Ti-5Mo(wt%)合金 700 °C 时微观结构演化的相场动力学模拟:(a~d)浓度场随时间的演化的灰度图,白色描述 Mo 高浓度,黑色描述 Mo 低浓度;(a'~d')结构场随时间的演化, α_1 、 α_2 和 α_3 描述 α 相 3 种变体;(e)浓度曲线

Fig. 4 Phase field simulations (in 2D) of microstructural evolution during α precipitation via the pseudo-spinodal mechanism in Ti-5Mo (in wt %) at 700 °C: (a~d) concentration field, (a'~d') structural fields, and (e) concentration curves

动造成成分及结构不均匀(模拟中由朗之万噪声实现^[28]),成分不均匀将会导致一定量的 Mo 元素贫化区,这些贫化区的 Mo 含量低于体系的临界成分 $c_0(T)$,将有利于析出相的形核。因此这些贫化区将首先发生成分不变的结构相变,转变成 α 析出相(如图 4b 和 b'所示),但其 Mo 成分仍远离 α 平衡浓度(如图 4e 中的浓度曲线所示)。随后, β 和 α 相之间将不断扩散并以调幅分解的方式驱动体系成分不断趋于平衡。图 4 所示的浓度变化与实验测量(利用原子探针断层扫描 Ti-5553^[15])一致。

另外,作者研究团队前期的模拟结果表明^[13],伪调幅分解机理这一非经典形核机理产生的形核率是传统经典形核理论^[13, 29]所预测的形核率的 100 倍,这一机理为设计高形核率、超细 α 析出相先进钛合金提出了新的可能。但是伪调幅分解机理要求初始成分必须非常接近体系的临界成分 $c_0(T)$,当合金成分远离 $c_0(T)$ 约 2% 时,相场模拟得到的形核率与经典形核理论所预测的相当,暗示了伪调幅分解机理的消失。因此通过控制临界成分和初始成分,使得两者差值小于 2% 将有利于超细超均匀钛合金的设计。

3.2 预相分离机理

上节模拟预测表明伪调幅分解机理提供了一种开发设计具有超细、超均匀 $\alpha + \beta$ 微观结构的钛合金的有效方法,但是其非常窄的操作范围(成分与临界成分之差小于 2%)限制了其使用。但是其通过成分不均匀性影响形核的本质为我们提供了新的思路,是否可以利用 Ti-Mo 合金中存在的真正的调幅分解区来设计成分不均匀区并进一步影响钛合金形核。基于 β 钛合金中存在的调幅分解区^[30],作者提出了预相分离机理,其将指导在更宽成分范围内开发设计新的超细、超均匀钛合金。

Ti-Mo 合金在 600 °C 时的临界成分为 4.35% Mo,作者选择 Ti-10% Mo,由于其 Mo 含量远离临界成分大于 2% ($c - c_0 = 5.65\%$),其不符合伪调幅分解发生的成分范围,而其处于调幅分解区,也不符合经典形核理论。图 5 描述了其相对应的浓度及结构参量随时间演化,图 5a-b 和 5a'-b'描述了体系前期调幅分解过程, β 相浓度发生变化并产生 Mo 贫化区和富集区,由于体系成分仍远离临界成分 c_0 ,因此未能发生结构转变。随着调幅分解的进行,体系 Mo 贫化区接近临界成分 c_0 ,体系 α 相形核开始(如图 5d 和 d'所示)。由于 Mo 贫化区周围 Mo 富集区的限制,形成的 α 相将难以长大,并产生超细的 $\alpha + \beta$ 微观结构。

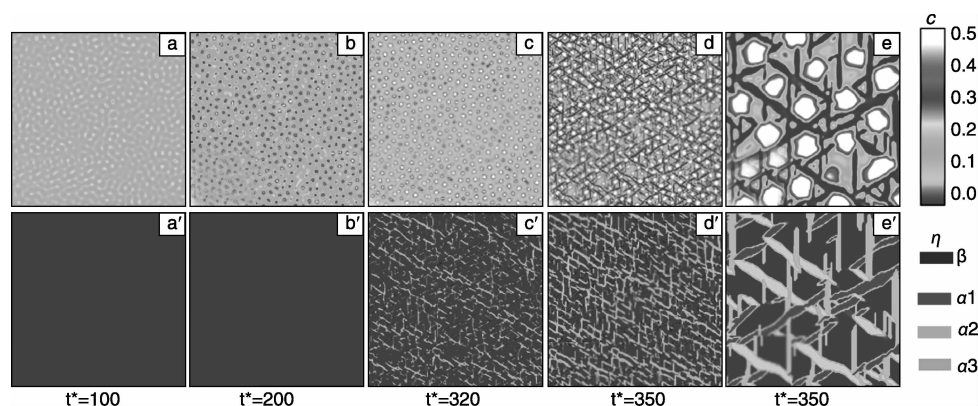


图5 Ti-10Mo (wt%) 合金微观结构演化的相场动力学模拟：(a~d) 浓度场随时间的演化，(a'~d') 结构场随时间的演化

Fig. 5 Phase field simulations (in 2D) of microstructural evolution during α precipitation via the precursory spinodal mechanism in Ti-10Mo (in wt %): (a~d) concentration field and (a'~d') structural fields

4 结 语

本文对近期基于两种非传统相变路径通过集成计算工程来设计超细、超均匀钛合金微观组织的研究工作进行了评论总结，揭示了热力学数据库与相场动力学模拟相结合的重要性以及其对指导实验设计的作用，确认了集成 CAPHAD 相图计算和相场模拟以及实验测量的集成计算材料工程方法是先进钛合金设计与开发的有效途径和思路。集成计算材料工程在先进钛合金开发中的应用将为功能材料、生物材料等其它材料开发设计提供新的可能。

参考文献 References

- [1] Clark J B, Mcevely A J. Interaction of Dislocations + Structures in Cyclically Strained Aluminum Alloys [J]. *Acta Metall Mater*, 1964, 12: 1 359.
- [2] Fine M E. Precipitation Hardening of Aluminum-Alloys [J]. *Metall Trans A*, 1975, 6: 625.
- [3] Miao W F, Laughlin D E. Precipitation Hardening in Aluminum Alloy 6022 [J]. *Scripta Mater*, 1999, 40: 873.
- [4] Li Y J, Choi P, Borchers C, et al. Atomic-Scale Mechanisms of Deformation-Induced Cementite Decomposition in Pearlite [J]. *Acta Mater*, 2011, 59: 3 965.
- [5] Li Y J, Choi P, Goto S, et al. Evolution of Strength and Microstructure during Annealing of Heavily Cold-Drawn 6.3 GPa Hyper-eutectoid Pearlitic Steel Wire [J]. *Acta Mater*, 2012, 60: 4 005.
- [6] Bhadeshia H K D H. Nanostructured Bainite [J]. *P Roy Soc A-Math Phy*, 2010, 466: 3.
- [7] Lasalmonie A, Strudel J L. Interfacial Dislocation Networks around Gamma' Precipitates in Nickel-Base Alloys [J]. *Philos Mag*, 1975, 32: 937.
- [8] Leverant G, Kear B. The Mechanism of Creep in Gamma Prime Precipitation-Hardened Nickel-Base Alloys at Intermediate Temperatures [J]. *Metall Mater Trans B*, 1970, 1: 491.
- [9] Ahmed T, Rack H J. Phase Transformations during Cooling in Alpha + Beta Titanium Alloys [J]. *Mat Sci Eng A - Struct*, 1998, 243: 206.
- [10] Duerij T, Williams J C. In Beta Titanium Alloys in the 80's[C]// *Proceedings of A Symposium of Metallurgical Society of AIME*. Atlanta: 1984: 19.
- [11] James M Howe, David E Laughlin, Jong K Lee, et al. *Solid-Solid Phase Transformation in Inorganic Materials* 2005[M]. Minerals, Metals, & Materials Society, 2005.
- [12] Shi R, Dixit V, Fraser H L, et al. Variant Selection of Grain Boundary Alpha by Special Prior Beta Grain Boundaries in Titanium Alloys [J]. *Acta Mater*, 2014, 75: 156.
- [13] Boyne A, Wang D, Shi R P, et al. Pseudospinodal Mechanism for Fine α/β Microstructures in β -Ti alloys [J]. *Acta Mater*, 2014, 64: 188.
- [14] Ni Y, Khachaturyan A G. From Chessboard Tweed to Chessboard Nanowire Structure during Pseudospinodal Decomposition [J]. *Nat Mater*, 2009, 8: 410.
- [15] Nag S, Zheng Y, R E A Williams, et al. Non-Classical Homogeneous Precipitation Mediated by Compositional Fluctuations in Titanium Alloys [J]. *Acta Mater*, 2012, 60: 6 247.
- [16] Wang Y Z, Li J. Phase Field Modeling of Defects and Deformation [J]. *Acta Mater*, 2010, 58: 1 212.
- [17] Shi R, Wang Y. Variant Selection during α Precipitation in Ti-6Al-4V under the Influence of Local Stress-A Simulation Study [J]. *Acta Mater*, 2013, 61: 6 006.
- [18] Shi R, Ma N, Wang Y. Predicting Equilibrium Shape of Precipitates as Function of Coherency State [J]. *Acta Mater*, 2012, 60: 4 172.
- [19] Kim S G, Kim W T, Suzuki T. Phase-Field Model for Binary Alloys [J]. *Physical Review E*, 1999, 60: 7 186.
- [20] Eiken J, Bottger B, Steinbach I. Multiphase-Field Approach for Multicomponent Alloys with Extrapolation Scheme for Numerical

- Application [J]. *Physical Review E*, 2006, 73: 066 122.
- [21] Tiaden J, Nestler B, Diepers H J, *et al.* The Multiphase – Field Model with an Integrated Concept for Modelling Solute Diffusion [J]. *Physica D*, 1998, 115: 73.
- [22] Chen S L, Zhang F, Xie F Y, *et al.* Calculating Phase Diagrams Using PANDAT and PanEngine [J]. *JOM*, 2003, 55: 48.
- [23] PanTitanium. [http://www.computherm.com/index.php? route = product/product&path = 59_ 83&product_ id = 28](http://www.computherm.com/index.php?route=product/product&path=59_83&product_id=28).
- [24] Shim J, Oh C, Lee D. A Thermodynamic Evaluation of the Ti-Mo-C System [J]. *Metall Mater Trans B*, 1996, 27: 955
- [25] Liu Y J, Zhang L J, Yu D. Computational Study of Mobilities and Diffusivities in bcc Ti-Zr and bcc Ti-Mo Alloys [J]. *J Phase Equilib Diff*, 2009, 30: 334.
- [26] Chen Q, Ma N, Wu K S, *et al.* Quantitative Phase Field Modeling of Diffusion-Controlled Precipitate Growth and Dissolution in Ti-Al-V [J]. *Scripta Mater*, 2004, 50: 471.
- [27] Wang D, Shi R, Zheng Y, *et al.* ICME Approach to Design of Novel Microstructures for Ti-Alloys [J]. *JOM*, 2014, 66 (7): 1 287 – 1 298.
- [28] Shen C, Simmons J P, Wang Y. Effect of Elastic Interaction on Nucleation: II. Implementation of Strain Energy of Nucleus Formation in the Phase Field Method [J]. *Acta Mater*, 2007, 55: 1 457.
- [29] Balluffi R W, Allen S A, Carter W C. *Kinetics of Materials* [M]. New Jersey: Wiley, 2005.
- [30] Menon E S K, Aaronson H I. “Black Plate” Formation in Ti-x Alloys [J]. *Acta Metall Mater*, 1986, 34: 1 963.

(编辑 惠 琼)