引用格式：吕明远，闵小华，弭光宝. 基于特定取向模量的Ti-Mo基多组元TWIP钛合金成分设计[J]. 材料工程，2026，54(4)：55-63.
LYU Mingyuan，MIN Xiaohua，MI Guangbao. Composition design of Ti-Mo-based multi-component TWIP titanium alloys based on specific orientation moduli[J]. Journal of Materials Engineering，2026，54(4)：55-63.

基于特定取向模量的Ti-Mo基多组元TWIP钛合金成分设计

吕明远[1]，闵小华[1*]，弭光宝[2*]

（1 大连理工大学 材料科学与工程学院，辽宁 大连 116024；
2 中国航发北京航空材料研究院 先进钛合金航空科技重点实验室，北京 100095）

摘要：为精准调控β型钛合金的热/应力诱发产物，突破传统设计中依赖d-电子合金理论、钼当量等参数的局限，提出一种基于特定取向模量（杨氏模量 E_{100}、四方剪切模量 C'、剪切模量 G_{111}）的设计方法，成功设计出具有显著孪生诱发塑性（twinning-induced plasticity，TWIP）效应的Ti-13.5Mo-3.6Nb（质量分数/%，下同）、Ti-13Mo-4.5Nb-1.6Zr及Ti-12.5Mo-6.5Nb-1.5Zr-0.9Al三种Ti-Mo基多组元合金。采用光学显微镜（OM）、透射电子显微镜（TEM）、背散射电子衍射（EBSD）及拉伸测试等手段，系统分析设计合金的冷加工成形性能、热诱发亚稳相及应力诱发变形方式，探究特定取向模量对热/应力诱发产物的调控。结果表明：三种设计合金均表现出90%以上的优异冷加工成形能力，且固溶组织由β相基体和三方热诱发ω相构成；其屈服强度为370～428 MPa，总伸长率为46%～50%，变形方式均以$\{332\}_\beta\langle 113\rangle_\beta$孪生为主导。三种合金的杨氏模量 E_{100}（22.9 GPa）较高，完全抑制热/应力诱发α″马氏体相变；而较低的四方剪切模量 C'（7.8 GPa）有利于$\{332\}_\beta\langle 113\rangle_\beta$孪生，使合金在5%变形量下的孪晶面积分数达到28.8%～30.1%；较高的剪切模量 G_{111}（10.6～10.7 GPa）抑制热诱发ω相的塌陷过程，使得热诱发ω相呈三方结构。本研究建立的基于特定取向模量设计方法，实现了Ti-Mo基多组元TWIP型钛合金的高效设计，兼具创新性与实用性，为高性能钛合金的研发提供了新途径，具有广阔的工程应用前景。

关键词：Ti-Mo基合金；特定取向模量；孪生诱发塑性效应；合金设计
doi：10.11868/j.issn.1001-4381.2025.000664 **CSTR**：32421.14.j.issn.1001-4381.2025.000664
中图分类号：TB31 **文献标识码**：A **文章编号**：1001-4381(2026)04-0055-09

Composition design of Ti-Mo-based multi-component TWIP titanium alloys based on specific orientation moduli

LYU Mingyuan[1]，MIN Xiaohua[1*]，MI Guangbao[2*]

（1 School of Materials Science and Engineering，Dalian University of Technology，Dalian 116024，Liaoning，China；
2 Aviation Key Laboratory of Science and Technology on Advanced Titanium Alloys，
AECC Beijing Institute of Aeronautical Materials，Beijing 100095，China）

Abstract：To precisely control the thermally/stress-induced products in β-type titanium alloys and overcome the limitations of traditional design methods relying on parameters such as d-electron alloy theory and molybdenum equivalent，a design approach based on specific orientation moduli（Young's modulus E_{100}，tetragonal shear modulus C'，and shear modulus G_{111}）is proposed. Three Ti-Mo-based multi-component alloys with significant twinning-induced plasticity（TWIP）effect，namely Ti-13.5Mo-3.6Nb（mass fraction/%，the same below），Ti-13Mo-4.5Nb-1.6Zr，and Ti-12.5Mo-6.5Nb-1.5Zr-0.9Al，are successfully designed. By means of optical microscopy（OM），transmission electron microscopy（TEM），electron backscatter diffraction（EBSD），and tensile testing，the cold workability，thermally-induced metastable phases，and stress-induced deformation modes of the designed alloys are systematically analyzed，and the regulation of specific orientation moduli on thermally/stress-induced products is

investigated. The results show that all three designed alloys exhibit excellent cold workability with a cold working rate of over 90%, and the solution-treated microstructure consists of a β-phase matrix and trigonal thermally-induced ω-phase. Their yield strength ranges from 370 to 428 MPa, total elongation from 46% to 50%, and the deformation mode is dominated by $\{332\}_\beta\langle113\rangle_\beta$ twinning. The high Young's modulus E_{100} (22.9 GPa) of the three alloys completely suppresses the thermally/stress-induced α″-martensitic transformation; the low tetragonal shear modulus C' (7.8 GPa) facilitates $\{332\}_\beta\langle113\rangle_\beta$ twinning, resulting in a twin area fraction of 28.8%-30.1% at 5% deformation; the high shear modulus G_{111} (10.6-10.7 GPa) inhibits the collapse process of the thermally-induced ω-phase, thereby maintaining the trigonal structure of the thermally-induced ω-phase. The design approach based on specific orientation moduli proposed in this study enables the efficient design of Ti-Mo-based multi-component TWIP titanium alloys, combining innovation and practicality. It provides a new pathway for the research and development of high-performance titanium alloys, and possesses broad engineering application prospects.

Key words: Ti-Mo-based alloy; specific orientation modulus; twinning-induced plasticity effect; alloy design

热诱发亚稳相与应力诱发变形方式的多样性，赋予β型（体心立方结构）钛合金优异的力学性能，使其受到广泛关注[1-7]。随着β相稳定性的提升，热诱发亚稳相的形成会依次从α′/α″马氏体转变为ω相、O′相[1,8-12]；对应的变形方式也会从应力诱发α″马氏体相变，逐步过渡为$\{332\}_\beta\langle113\rangle_\beta$孪生、$\{112\}_\beta\langle111\rangle_\beta$孪生，最终以位错滑移为主[1,5,9,13-14]。其中，$\{332\}_\beta\langle113\rangle_\beta$孪生在拉伸变形中能通过显著的应变硬化效应实现较大的均匀延伸，该现象被称为孪生诱发塑性（twinning-induced plasticity，TWIP）效应[15-16]。此类孪晶在Ti-Mo基和Ti-V基亚稳β型钛合金中尤为常见。典型如Ti-15Mo合金，其热诱发产物为三方结构ω相，应力诱发产物为$\{332\}_\beta\langle113\rangle_\beta$孪晶，不仅表现出显著的TWIP效应，还在室温下展现出约260 J/cm^{2}的优异冲击韧性（为普通钛合金的4～5倍），低温（20 K）下其屈服强度高达1400 MPa、抗拉强度达到1700 MPa[17-18]；Ti-3.9V-4.2Mo-2.3Fe合金的应力诱发产物同样为$\{332\}_\beta\langle113\rangle_\beta$孪晶，其均匀伸长率为31%、屈服强度高达736 MPa，呈现出良好的强塑性[19]。因此，精准调控热诱发亚稳相与应力诱发变形方式，是TWIP型钛合金设计的核心关键。目前，国内外主要采用d-电子合金设计理论（B_o和M_d）、钼当量、电子浓度及原子半径差等参数对热诱发亚稳相和应力诱发变形方式进行评估[20-23]，但这些方法尚未考虑热/应力诱发切变机制。由此可见，建立合金元素与切变机制之间的内在关联，仍是β型钛合金设计领域需要突破的基础性课题。

针对β型钛合金热诱发亚稳相变与应力诱发变形机制，国内外已开展大量研究[24-29]。在热诱发相变机制方面，α′/α″马氏体相变依赖于$\{112\}_\beta$面上原子沿$\langle111\rangle_\beta$方向的剪切机制和$\{110\}_\beta$面上原子沿$\langle110\rangle_\beta$方向的重组机制；O′相变只与$\{110\}_\beta$面上原子沿$\langle110\rangle_\beta$方向的重组机制相关；而ω相变取决于$\{112\}_\beta$面上原子沿$\langle111\rangle_\beta$方向的塌陷机制。在应力诱发变形机制方面，α″马氏体和ω相的形成机制与上述热诱发机制类似，分别遵循剪切加重组机制和塌陷机制。$\{112\}_\beta\langle111\rangle_\beta$孪生机制被普遍认为与常规体心立方晶体结构中的机制相同，但也有研究者提出ω相辅助孪生机制[30]。作为β型钛合金特有的变形方式，$\{332\}_\beta\langle113\rangle_\beta$孪生机制仍存在争议。国内外研究者相继提出了多种理论模型，如剪切加重组机制、β相晶格调制机制和α″马氏体辅助机制等[31-35]。但在Ti-Mo合金中，该孪生模式被认为是$\{110\}_\beta$面沿$\langle110\rangle_\beta$方向重组和$\{332\}_\beta$面沿$\langle113\rangle_\beta$方向剪切耦合作用的结果。尽管热诱发和应力诱发的剪切、重组和塌陷机制均归结为特定面上原子沿特定方向的切变机制，但由于各机制间存在复杂的交互作用，其精准调控的实现仍面临挑战。

β型钛合金热诱发和应力诱发切变机制的共性，主要体现在剪切、重组和塌陷过程单独作用或耦合作用的难易程度。而这种特定方向上的难易程度主要取决于原子间的结合强度，可以通过特定取向模量来进行评价[34,36]。在热诱发相变方面，α"马氏体相变的剪切和重组过程分别与$\langle100\rangle_\beta$方向的杨氏模量（E_{100}）和$\langle110\rangle_\beta$方向的四方剪切模量（C'）相关[34]，而O′相变的重组过程仅与四方剪切模量相关；ω相变的塌陷过程与$\langle111\rangle_\beta$方向的剪切模量（G_{111}）相关。在应力诱发孪生方面，$\{112\}_\beta\langle111\rangle_\beta$孪生的剪切过程与$\langle111\rangle_\beta$方向剪切模量相关，而$\{332\}_\beta\langle113\rangle_\beta$孪生的剪切和重组过程分别与$\langle113\rangle_\beta$方向的剪切模量（$G_{113}$）和四方剪切模量相关。前期工作中，本课题组通过构建Ti-Mo二元合金团簇结构超胞并计算其特定取向模量，提出了基于模量软化效应的热诱发亚稳相变竞争机制[37]。进

一步将研究范围扩展至其他 Ti-M 二元合金，明确了特定取向模量的合金成分依赖性，并阐明了不同热诱发和应力诱发产物对应的特定取向模量范围[38]。然而，能否基于特定取向模量精准有效地调控合金热诱发和应力诱发产物，并据此实现具有 TWIP 效应多组元合金的成分设计仍有待进一步研究。

因此，本研究以具有显著 TWIP 效应的 Ti-15Mo（质量分数/%，下同）合金的特定取向模量为参考，设计与该合金模量特征一致的三元、四元和五元合金，以验证基于特定取向模量设计 TWIP 型钛合金的可行性。通过观察室温轧制样品的宏观形貌，探究设计合金的冷加工成形性能；借助显微组织表征和力学性能测试，分析不同合金的热诱发与应力诱发产物，并讨论其对力学性能的影响；通过统计孪晶面积分数评估各合金的 TWIP 效应，进而探究该设计方法的精准与高效性。

1　实验材料与方法

1.1　基于特定取向模量的合金设计

根据前期钛基二元合金弹性常数的第一性原理计算结果[38]，通过线性拟合获取不同合金元素对弹性常数的贡献值（即斜率 k_{11M}、k_{12M}、k_{44M}）；将该贡献值乘以设计合金中各元素的含量 x_M，再叠加体心立方结构纯钛的弹性常数 $C_{11\mathrm{Ti}}$、$C_{12\mathrm{Ti}}$ 和 $C_{44\mathrm{Ti}}$，即可得到设计合金的弹性常数，如式(1)～(3)所示。

$$C_{11}=\sum k_{11M}x_M+C_{11\mathrm{Ti}} \tag{1}$$

$$C_{12}=\sum k_{12M}x_M+C_{12\mathrm{Ti}} \tag{2}$$

$$C_{44}=\sum k_{44M}x_M+C_{44\mathrm{Ti}} \tag{3}$$

设计合金的特定取向模量（E_{100}、C' 和 G_{111}）由弹性常数进一步计算获得[37-38]，如式(4)～(6)所示。

$$E_{100}=\frac{(C_{11}-C_{12})(C_{11}+2C_{12})}{C_{11}+C_{12}} \tag{4}$$

$$C'=\frac{C_{11}-C_{12}}{2} \tag{5}$$

$$G_{111}=\frac{3C_{44}(C_{11}-C_{12})}{4C_{44}+(C_{11}-C_{12})} \tag{6}$$

合金设计以具有典型 TWIP 效应的 Ti-15Mo 合金的特定取向模量为参考，依次添加 Nb、Zr 和 Al 元素，设计出三元、四元、五元合金，其名义成分、弹性常数及特定取向模量如表 1 所示。

1.2　材料制备

采用真空非自耗电弧熔炼法，在高纯氩气保护下制备了 Ti-13.5Mo-3.6Nb（TMN）、Ti-13Mo-4.5Nb-1.6Zr（TMNZ）和 Ti-12.5Mo-6.5Nb-1.5Zr-0.9Al（TMNZA）合金铸锭，每锭质量为 60 g。铸锭在 1173 K 下进行均匀化处理，保温 1 h 后水冷。通过电火花切割机将铸锭加工为长 35 mm、宽 12 mm、厚 12 mm 的块状试样，随后对块状试样进行室温冷轧，目标厚度为（1.1±0.05）mm，单道次下压量控制为 0.08 mm。冷轧完成后，沿板材的轧制方向（rolling direction，RD）从板材中切割出狗骨头状拉伸试样，其平行段尺寸为长 30 mm、宽 4 mm、厚 1 mm，具体试样尺寸如图 1 所示。随后将拉伸试样真空封管，在 1173 K 下进行固溶处理（solution treatment，ST），保温 1 h 后水冷。

表 1　Ti-15Mo、Ti-13.5Mo-3.6Nb、Ti-13Mo-4.5Nb-1.6Zr 和 Ti-12.5Mo-6.5Nb-1.5Zr-0.9Al 合金的弹性常数与特定取向模量

Table 1　Elastic constants and specific orientation moduli of Ti-15Mo, Ti-13.5Mo-3.6Nb, Ti-13Mo-4.5Nb-1.6Zr, and Ti-12.5Mo-6.5Nb-1.5Zr-0.9Al alloys

Alloy	C_{11}/GPa	C_{12}/GPa	C_{44}/GPa	E_{100}/GPa	C'/GPa	G_{111}/GPa
Ti-15Mo	128.8	113.2	39.9	22.9	7.8	10.7
Ti-13.5Mo-3.6Nb	129.0	113.4	39.3	22.9	7.8	10.6
Ti-13Mo-4.5Nb-1.6Zr	128.7	113.1	38.9	22.9	7.8	10.6
Ti-12.5Mo-6.5Nb-1.5Zr-0.9Al	129.2	113.6	40.2	22.9	7.8	10.7

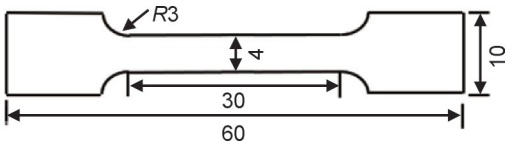


图 1　拉伸试样示意图

Fig.1　Schematic diagram of tensile specimen

1.3　力学性能测试与显微组织表征

室温拉伸实验在配备引伸计的 UTM4204X 万能试验机上进行，拉伸速率为 0.05 mm/min，对应的初始应变速率为 $2.78\times10^{-4}\ \mathrm{s^{-1}}$，拉伸方向平行于 RD。中断拉伸实验的应变量为 5%。对固溶组织和变形组织进行光学显微镜表征时，首先采用 320# 砂纸打磨去除试样表面氧化皮；然后依次使用 9 μm 和 3 μm 金刚石抛光液、二氧化硅与双氧水混合抛光液进行抛光；随后将试样置于去离子水、硝酸和氢氟酸混合而成的腐蚀液中腐蚀 60 s；最后采用 OLYMPUS BX51 型光学显微镜（OM）进行观察。利用 Image-J 图像分析软件对金相图片进行处理，每种合金基于 10 张 OM 图片计算孪晶面积分数。将试样打磨至厚度为 30 μm 后，利用冲压器制备直径为 3 mm 的圆片。随后在甲醇、正丁醇和高氯酸组成的混合溶液中进行电解双喷，制备透射电镜（TEM）试样。采用 JEM-2100F 型高分辨率透射电子显微镜（high-resolution transmission electron

microscopy，HRTEM）对合金中热诱发亚稳相及其结构进行表征，工作电压为200 kV。通过β相[110]$_\beta$轴选区电子衍射（selected area electron diffraction，SAED）斑点图中$d_{0002\omega}$与$d_{222\beta}$的比值评估ω相的塌陷程度[37]。利用配备Aztec HKL取向分析系统的JSM-IT800SHL型高分辨场发射扫描电子显微镜（field emission scanning electron microscopy，FESEM）进行电子背散射衍射（EBSD）分析，扫描步长为1 μm，扫描范围为600 μm×400 μm。

2 结果与分析

2.1 冷成形性能及热诱发亚稳相

三种设计合金冷轧后板材的宏观形貌如图2所示。其中，三元TMN合金与四元TMNZ合金板材长度均为19.2 cm，五元TMNZA合金板材长度为18.9 cm；厚度分别为（1.12±0.02）mm、（1.08±0.03）mm和（1.10±0.02）mm，总压下率对应为90.7%、91%和90.8%。三种板材的厚度沿全长方向均匀分布，说明冷轧过程中材料变形协调一致，未出现局部增厚或减薄的异常现象。所有样品表面均平整光滑，无明显轧制划痕或褶皱等缺陷；边缘部位保持平滑，未出现冷加工中常见的微裂纹、边缘劈裂或锯齿状断裂等问题。上述宏观特征表明，三种合金在冷轧过程中变形均匀性良好，且均具备90%以上的冷加工成形能力。



图2 三种设计合金冷轧后板材的宏观形貌

Fig.2 Macroscopic morphologies of cold-rolled sheets of three designed alloys

图3为三种设计合金经固溶处理后的原始显微组织。图3(a-1)，(b-1)，(c-1)分别为TMN、TMNZ和TMNZA合金的OM图，可见均呈现单一β相晶粒，其晶粒尺寸分别为（85±26）μm、（87±35）μm和（89±41）μm。为进一步探究合金的热诱发亚稳相及其结构，进行了TEM表征，结果如图3(a-2)，(b-2)，(c-2)所示。三种设计合金的SAED图中均显示出β相的衍射斑点（蓝色）及两种热诱发ω相变体的衍射斑点（红色和绿色）。为评估热诱发ω相的结构，绘制了图3中沿虚线的衍射斑强度分布，如图4(a)所示；进一步利用倒易空间中$d_{0002\omega}$与$d_{222\beta}$的比值评估两种ω相变体的塌陷程度（z）。其中TMN合金的z_{ω_1}=0.1650、z_{ω_2}=

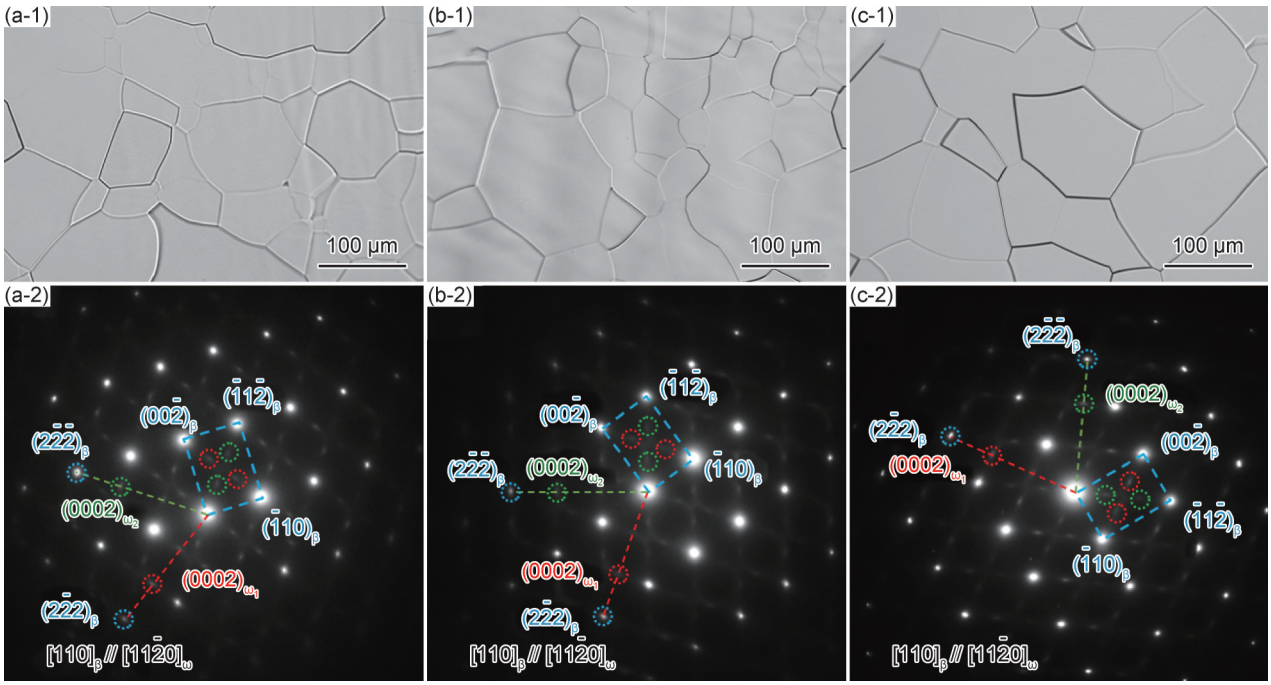


图3 三种设计合金固溶组织的OM图（1）和SAED图（2）

（a）TMN合金；（b）TMNZ合金；（c）TMNZA合金

Fig.3 OM images（1）and SAED patterns（2）of solution-treated microstructures in three designed alloys

（a）TMN alloy；（b）TMNZ alloy；（c）TMNZA alloy

0.1641，TMNZ 合金的 z_{ω_1}=0.1644、z_{ω_2}=0.1647，TMNZA 合金的 z_{ω_1}=0.1646、z_{ω_2}=0.1649。这三种合金的 z 值与 Ti-15Mo 合金（z_ω=0.165）较为接近[37]，且均低于 0.1667，如图 4(b)所示。此外，由于热诱发 ω 相的衍射斑点强度较弱，难以通过暗场像对 ω 相的分布进行分析。综上所述，三种设计合金的固溶组织均由 β 相和三方热诱发 ω 相组成，且热诱发 ω 相的塌陷程度与 Ti-15Mo 合金较为接近。

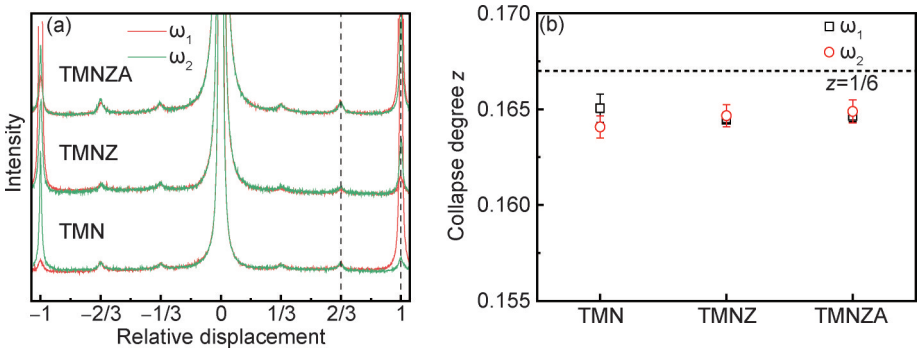


图 4　三种设计合金热诱发 ω 相的塌陷程度

(a) ω 相衍射斑点强度曲线；(b) ω_1 和 ω_2 变体的塌陷程度

Fig.4　Collapse degree of thermal-induced ω-phase in three designed alloys

(a) intensity profiles of ω-phase diffraction pattern; (b) collapse degree of ω_1 and ω_2 variants

2.2　力学性能及应力诱发变形方式

图 5 为 TMN、TMNZ、TMNZA 及 Ti-15Mo 合金的名义应力-应变曲线、对应的真应力-应变曲线及应变硬化率（strain hardening rate，SHR）曲线。TMN、TMNZ 和 TMNZA 合金的屈服强度分别为 370、422 MPa 和 428 MPa，相较于 Ti-15Mo 合金的屈服强度（350 MPa），依次略有提升。TMN、TMNZA 和 Ti-15Mo 合金的抗拉强度较为接近，分别为 705、707 MPa 和 700 MPa，但均低于 TMNZ 合金的 754 MPa。在塑性方面，TMN、TMNZ 和 TMNZA 合金的总伸长率分别为 47%、46% 和 50%，略小于 Ti-15Mo 合金的 55%；TMN 和 TMNZ 合金的均匀伸长率分别为 42% 和 40%，略小于 TMNZA 合金的 45% 和 Ti-15Mo 合金的 47%。四种合金均表现出显著的应变硬化行为，其应变硬化率曲线在塑性变形初期迅速下降，随后随应变量进一步增加，应变硬化率先缓慢上升至峰值，再缓慢下降。这是因为变形初期一次孪晶易形成，同时伴随位错平均自由程的快速下降，从而产生显著的应变硬化；然而，随着一次孪晶形成速率减缓，应变硬化率迅速下降；随后，一次孪生速率进一步减缓，同时二次孪生和孪晶交割的频率增加，位错平均自由程进一步降低，应变硬化率缓慢上升；直至孪生活动基本停止，应变硬化行为由位错密度增加主导，应变硬化率开始缓慢降低[39]。其中，TMN、TMNZ 与 Ti-15Mo 合金的应变硬化率较为接近，而 TMNZA 合金的应变硬化率略低。综上所述，所设计的 TMN、TMNZ 和 TMNZA 合金均呈现出低屈服强度、高伸长率及显著的应变硬化行为。

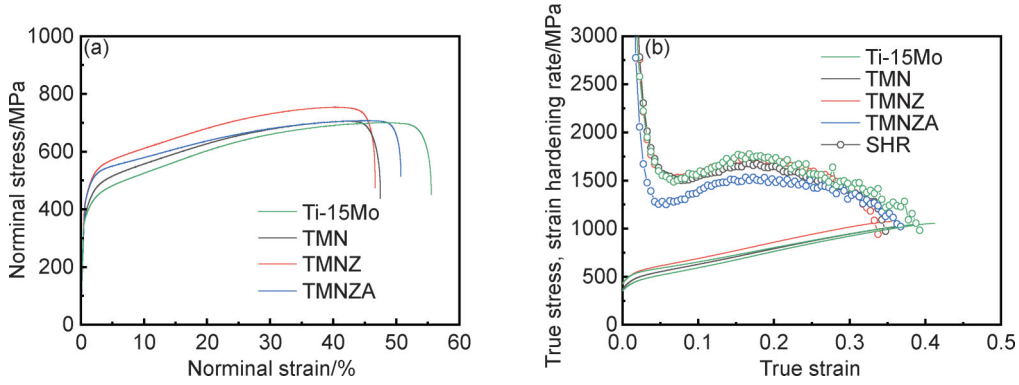


图 5　三种设计合金和 Ti-15Mo 合金的拉伸性能

(a) 名义应力-应变曲线；(b) 真实应力-应变以及应变硬化率曲线

Fig.5　Tensile properties of three designed alloys and Ti-15Mo alloy

(a) nominal stress-strain curves; (b) true stress-strain and corresponding SHR curves

为探究设计合金的变形方式及其对应变硬化行为的影响，通过EBSD表征了变形量为5%的中断拉伸试样平行段变形组织，结果如图6所示。图6(a-1)，(b-1)，(c-1)的IPF图显示，三种合金变形组织的晶粒内均存在大量与基体有取向差的板条结构。进一步分析表明，基体与板条以$\langle 110\rangle_\beta$为轴存在50.5°取向差，证实该板条为$\{332\}_\beta\langle 113\rangle_\beta$孪晶[40]。基于取向差标记法，在BC图中进一步将孪晶界标记为红色(如图6(a-2)，(b-2)，(c-2)所示)。三种合金变形组织内的板条几乎均被标记为红色，表明其变形方式均以$\{332\}_\beta\langle 113\rangle_\beta$孪生主导。统计晶内平均取向差(kernel average misorientation，KAM)的分布特征，可反映晶体内部的晶格畸变程度，还能在一定程度上反映该区域的几何必需位错密度。如图6(a-3)，(b-3)，(c-3)所示，三种合金变形组织的晶界和孪晶界均呈现较大的KAM值，说明存在更多的几何必需位错，这有利于提升合金的应变硬化能力。此外，基于OM金相图片统计了三种合金中断拉伸试样变形组织的孪晶面积分数，结果如图7所示。TMN、TMNZ和TMNZA合金的孪晶面积分数分别为29.4%、28.8%和30.1%，与Ti-15Mo合金的30%较为接近[40]，这表明它们具有相近的孪晶形成能力。因此，三种设计合金的变形方式均以$\{332\}_\beta\langle 113\rangle_\beta$孪生为主导，其均匀伸长率和5%变形量的孪晶面积分数均分别大于40%和28%，表现出显著的TWIP效应。

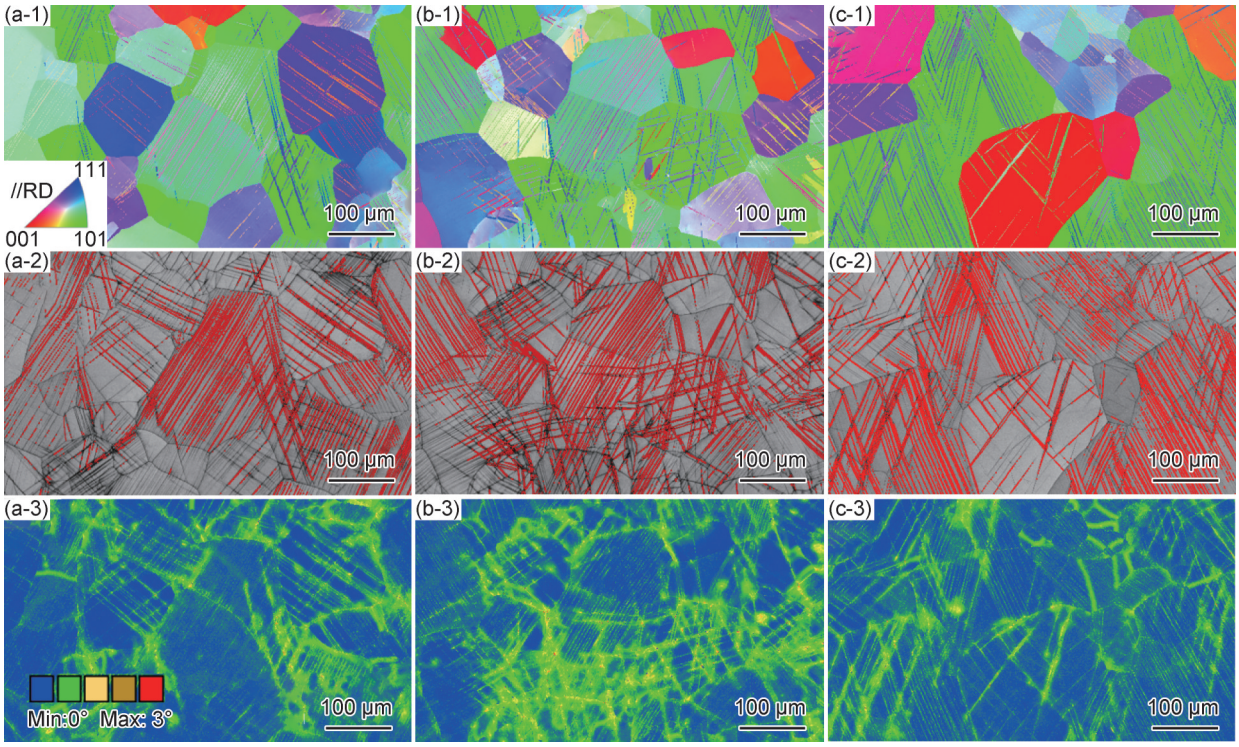


图6 三种设计合金变形组织IPF图(1)、BC+$\{332\}_\beta\langle 113\rangle_\beta$孪晶图(2)和KAM图(3)
(a)TMN合金；(b)TMNZ合金；(c)TMNZA合金

Fig.6 IPF maps(1), BC+$\{332\}_\beta\langle 113\rangle_\beta$ twin maps(2), and KAM maps(3) of deformed microstructures in three designed alloys
(a)TMN alloy; (b)TMNZ alloy; (c)TMNZA alloy

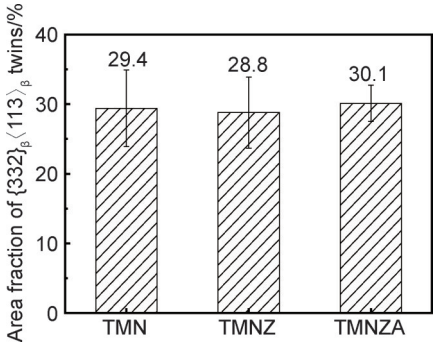


图7 三种设计合金的$\{332\}_\beta\langle 113\rangle_\beta$孪晶面积分数

Fig.7 Area fractions of $\{332\}_\beta\langle 113\rangle_\beta$ twins in three designed alloys

2.3 特定取向模量与热/应力诱发产物的关联

热/应力诱发切变机制包含剪切、重组及塌陷过程，其本质是特定原子沿特定方向的切变过程，该过程的难易程度可通过特定取向模量评估[34,37]。随着特定取向模量的增大，对应切变过程的难度逐渐增加，进而影响热/应力诱发产物的形成。基于相同特定取向模量设计的TMN、TMNZ和TMNZA合金均呈现出相似的热诱发亚稳相及应力诱发变形方式。一方面，对于热诱发亚稳相，由于设计合金的E_{100}较高(22.9 GPa)，热诱发α″马氏体相变过程被完全抑制。

此外，设计合金的 G_{111} 为 10.6 GPa 或 10.7 GPa，对热诱发 ω 相的塌陷过程起到一定抑制作用，导致热诱发 ω 相塌陷不完全，呈三方结构。另一方面，对于应力诱发变形产物，由于设计合金的 C' 为 7.8 GPa，显著低于 E_{100}，应力诱发 α″ 马氏体相变所需的剪切过程被完全抑制，但 $\{332\}_\beta\langle113\rangle_\beta$ 孪生所需的重组过程仍较易发生，因此合金变形方式均为 $\{332\}_\beta\langle113\rangle_\beta$ 孪生。三种设计合金的 C' 相同，表明其 $\{332\}_\beta\langle113\rangle_\beta$ 孪生的难易程度相近，从而在 5% 变形量下呈现近似的 $\{332\}_\beta\langle113\rangle_\beta$ 孪晶面积分数（图 7）。因此，特定取向模量能够精准调控合金的热/应力诱发产物，并实现对 TWIP 型钛合金的高效设计。

为进一步验证基于特定取向模量设计 β 型钛合金的普适性，针对大量文献已报道的 β 型钛合金，分别统计其应力诱发变形方式、计算其特定取向模量[38]，并将其绘制于图 8 中。不同变形方式对应的特定取向模量呈现出明确范围，仅存在少量重叠。当 E_{100} 和 C' 较低时，在应力的作用下 α″ 马氏体相变的剪切和重组过程较为容易，合金变形方式为应力诱发 α″ 马氏体相变；当 E_{100} 较高而 C' 仍较低时，应力诱发 α″ 马氏体相变的剪切过程被抑制，但 O′ 相变的重组过程仍易发生且降低了孪生所需的重组量，进而辅助 $\{332\}_\beta\langle113\rangle_\beta$ 孪生，合金变形方式由应力诱发 α″ 马氏体相变逐渐转变为 $\{332\}_\beta\langle113\rangle_\beta$ 孪生；当 E_{100} 和 C' 均较高时，O′ 相变的重组过程被抑制，$\{332\}_\beta\langle113\rangle_\beta$ 孪生随之也被抑制，合金变形方式转变为位错滑移。综上可得，相同特定取向模量可使合金获得相似的热/应力诱发产物，特定取向模量的变化则能调控产物类型，充分体现了该设计方法的精准与高效性。

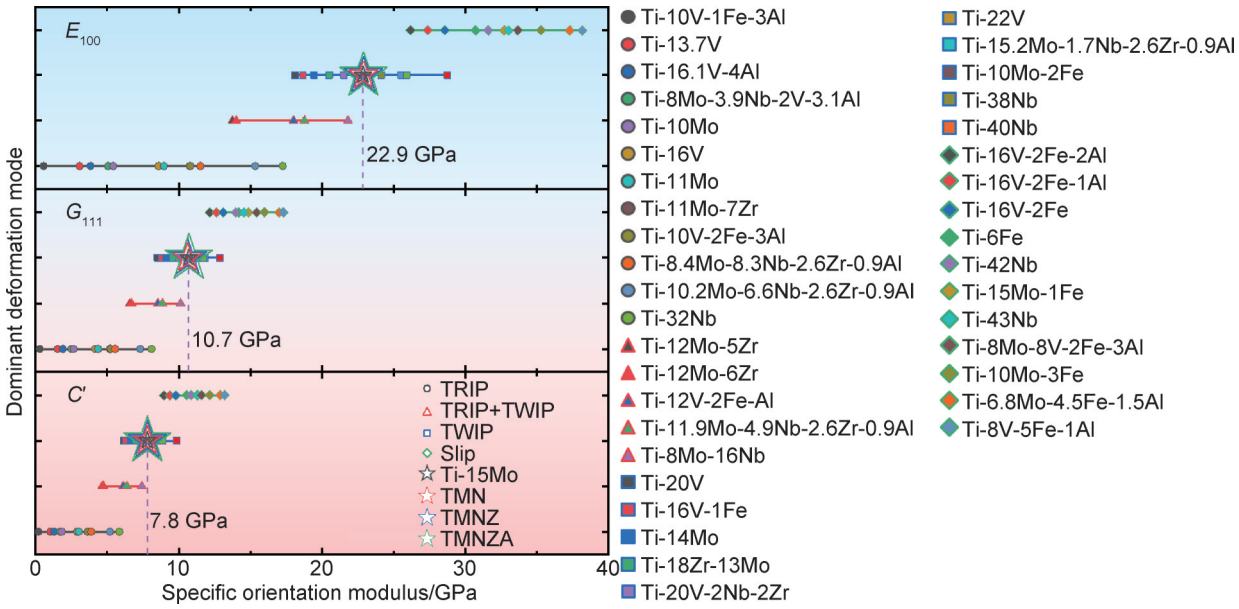


图 8　β 型钛合金中应力诱发变形方式与特定取向模量之间的关联

Fig.8　Correlation between stress-induced deformation modes and specific orientation moduli in β-type titanium alloys

3　结论

（1）基于特定取向模量的合金设计方法，结合第一性原理计算的弹性常数，依据杨氏模量 E_{100}=22.9 GPa、四方剪切模量 C' =7.8 GPa 及剪切模量 G_{111}=10.7 GPa，成功设计出具有显著 TWIP 效应的 Ti-Mo 基三元、四元、五元合金，展现了该设计方法在跨组元体系下的普适性。

（2）三种设计合金的热诱发三方 ω 相结构相近，且 5% 变形量下 $\{332\}_\beta\langle113\rangle_\beta$ 孪晶面积分数均大于 28%，同时表现出显著的应变硬化行为与超过 40% 的均匀伸长率。

（3）通过特定取向模量建立了合金元素与热/应力诱发切变机制的内在关联，实现了对 TWIP 型钛合金热/应力诱发产物的精准调控，进而实现了对合金力学性能的有效调控，为高性能 TWIP 型钛合金的研发提供了一种新途径。

参考文献

[1] KOLLI R P, JOOST W J, ANKEM S. Phase stability and stress-induced transformations in beta titanium alloys[J]. JOM, 2015, 67(6): 1273-1280.

[2] CHONG Y, GHOLIZADEH R, GUO B Q, et al. Oxygen interstitials make metastable β titanium alloys strong and ductile[J]. Acta Materialia, 2023, 257: 119165.

[3] LEE H J, KIM J H, PARK C H, et al. Twinning-induced plasticity mechanism of α″-martensitic titanium alloy [J]. Acta Materialia, 2023, 248: 118763.

[4] 向力, 闵小华, 弭光宝. 体心立方 Ti-Mo 基钛合金应用研究进展 [J]. 材料工程, 2017, 45(7): 128-136.
XIANG L, MIN X H, MI G B. Application and research progress of body-centered-cubic Ti-Mo base alloys [J]. Journal of Materials Engineering, 2017, 45(7): 128-136.

[5] LAI M J, LI T, RAABE D. ω phase acts as a switch between dislocation channeling and joint twinning- and transformation-induced plasticity in a metastable β titanium alloy [J]. Acta Materialia, 2018, 151: 67-77.

[6] LILENSTEN L, SUN F, HOCINI A, et al. {332}〈113〉 mechanical detwinning as a deformation mechanism in the β-metastable Ti-15Mo alloy during cyclic loading [J]. Scripta Materialia, 2023, 232: 115503.

[7] CHEN G L, LI D, ZHENG Y F, et al. Stability and growth kinetics of {112} twin embryos in β-Ti alloys [J]. Acta Materialia, 2024, 263: 119520.

[8] MIN X H, EMURA S, NISHIMURA T, et al. Microstructure, tensile deformation mode and crevice corrosion resistance in Ti-10Mo-*x*Fe alloys [J]. Materials Science and Engineering: A, 2010, 527 (21/22): 5499-5506.

[9] ZHAO X F, NIINOMI M, NAKAI M, et al. Beta type Ti-Mo alloys with changeable Young's modulus for spinal fixation applications [J]. Acta Biomaterialia, 2012, 8(5): 1990-1997.

[10] CHOUDHURI D, ZHENG Y, ALAM T, et al. Coupled experimental and computational investigation of omega phase evolution in a high misfit titanium-vanadium alloy [J]. Acta Materialia, 2017, 130: 215-228.

[11] DEVARAJ A, NAG S, SRINIVASAN R, et al. Experimental evidence of concurrent compositional and structural instabilities leading to ω precipitation in titanium-molybdenum alloys [J]. Acta Materialia, 2012, 60(2): 596-609.

[12] PANG E L, PICKERING E J, BAIK S I, et al. The effect of zirconium on the omega phase in Ti-24Nb-[0-8]Zr (at.%) alloys [J]. Acta Materialia, 2018, 153: 62-70.

[13] HANADA S, IZUMI O. Transmission electron microscopic observations of mechanical twinning in metastable beta titanium alloys [J]. Metallurgical Transactions A, 1986, 17(8): 1409-1420.

[14] MIN X H, EMURA S, SEKIDO N, et al. Effects of Fe addition on tensile deformation mode and crevice corrosion resistance in Ti-15Mo alloy [J]. Materials Science and Engineering: A, 2010, 527(10/11): 2693-2701.

[15] MIN X H, TSUZAKI K, EMURA S, et al. Heterogeneous twin formation and its effect on tensile properties in Ti-Mo based β titanium alloys [J]. Materials Science and Engineering: A, 2012, 554: 53-60.

[16] ZHANG J Y, LI J S, CHEN Z, et al. Microstructural evolution of a ductile metastable β titanium alloy with combined TRIP/TWIP effects [J]. Journal of Alloys and Compounds, 2017, 699: 775-782.

[17] YAO K, MIN X H, EMURA S, et al. Enhancement of impact toughness of β-type Ti-Mo alloy by {332}〈113〉 twinning [J]. Journal of Materials Science, 2019, 54(16): 11279-11291.

[18] YAO K, XIN S W, YANG Y, et al. Ultrahigh cryogenic strength and exceptional ductility at 20 K in a TWIP Ti-15Mo alloy [J]. Scripta Materialia, 2022, 213: 114595.

[19] LU H R, JI P F, LI B, et al. Mechanical properties and deformation mechanism of a novel metastable β-type Ti-4V-2Mo-2Fe alloy [J]. Materials Science and Engineering: A, 2022, 848: 143376.

[20] KOLLI R P, DEVARAJ A. A review of metastable beta titanium alloys [J]. Metals, 2018, 8(7): 506.

[21] KURODA D, NIINOMI M, MORINAGA M, et al. Design and mechanical properties of new β type titanium alloys for implant materials [J]. Materials Science and Engineering: A, 1998, 243 (1/2): 244-249.

[22] 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.

[23] WANG C H, RUSSELL A M, CAO G H. A semi-empirical approach to the prediction of deformation behaviors of β-Ti alloys [J]. Scripta Materialia, 2019, 158: 62-65.

[24] ZHENG Y F, WILLIAMS R E A, NAG S, et al. The effect of alloy composition on instabilities in the β phase of titanium alloys [J]. Scripta Materialia, 2016, 116: 49-52.

[25] LIANG Q L, WANG D, ZHENG Y F, et al. Shuffle-nanodomain regulated strain glass transition in Ti-24Nb-4Zr-8Sn alloy [J]. Acta Materialia, 2020, 186: 415-424.

[26] KIM H Y, IKEHARA Y, KIM J I, et al. Martensitic transformation, shape memory effect and superelasticity of Ti-Nb binary alloys [J]. Acta Materialia, 2006, 54(9): 2419-2429.

[27] ZHENG Y F, ANTONOV S, FENG Q, et al. Shuffle-induced modulated structure and heating-induced ordering in the metastable β-titanium alloy, Ti-5Al-5Mo-5V-3Cr [J]. Scripta Materialia, 2020, 176: 7-11.

[28] LIANG Q L, ZHENG Y F, WANG D, et al. Nano-scale structural non-uniformities in gum like Ti-24Nb-4Zr-8Sn metastable β-Ti alloy [J]. Scripta Materialia, 2019, 158: 95-99.

[29] BANERJEE S, MUKHOPADHYAY P. Phase transformations: examples from titanium and zirconium alloys [M]. Amsterdam: Elsevier, 2007.

[30] WU S Q, PING D H, YAMABE-MITARAI Y, et al. {112}〈111〉 twinning during ω to body-centered cubic transition [J]. Acta Materialia, 2014, 62: 122-128.

[31] QIAN B N, LILENSTEN L, ZHANG J Y, et al. On the transformation pathways in TRIP/TWIP Ti-12Mo alloy [J]. Materials Science and Engineering: A, 2021, 822: 141672.

[32] CHO K, MORIOKA R, HARJO S, et al. Study on formation mechanism of {332}〈113〉 deformation twinning in metastable β-type Ti alloy focusing on stress-induced α″ martensite phase [J]. Scripta Materialia, 2020, 177: 106-111.

[33] 赖敏杰, 李金山. 亚稳β钛合金的变形孪晶和应力诱发相变 [J]. 中国有色金属学报, 2019, 29(9): 2185-2191.
LAI M J, LI J S. Deformation twinning and stress-induced phase transformation in metastable β titanium alloys [J]. The Chinese

Journal of Nonferrous Metals,2019,29(9):2185-2191.

[34] TOBE H,KIM H Y,INAMURA T,et al.Origin of {332} twinning in metastable β-Ti alloys[J].Acta Materialia,2014,64:345-355.

[35] ZHENG Y F,BANERJEE R,WANG Y Z,et al.Pathways to titanium martensite[J].Transactions of the Indian Institute of Metals,2022,75(4):1051-1068.

[36] GAO M C,SUZUKI Y,SCHWEIGER H,et al.Phase stability and elastic properties of Cr-V alloys[J].Journal of Physics:Condensed Matter,2013,25(7):075402.

[37] LI M J,MIN X H,YAO K,et al.Novel insight into the formation of α″-martensite and ω-phase with cluster structure in metastable Ti-Mo alloys[J].Acta Materialia,2019,164:322-333.

[38] LV M Y,MIN X H,LIU F J.A novel approach to control the thermal/stress-induced products of body-centered cubic titanium alloys in terms of specific orientation moduli[J].Acta Materialia,2025,284:120594.

[39] MIN X H,CHEN X J,EMURA S,et al.Mechanism of twinning-induced plasticity in β-type Ti-15Mo alloy[J].Scripta Materialia,2013,69(5):393-396.

[40] YAO K,MIN X H.Static and dynamic Hall-Petch relations in {332}〈113〉TWIP Ti-15Mo alloy[J].Materials Science and Engineering:A,2021,827:142044.

基金项目:国家自然科学基金(52071051,U2141222)

收稿日期:2025-11-14;**录用日期**:2025-12-19

通讯作者:弭光宝(1981—),男,研究员,博士,研究方向为钛火防控、新型钛合金,联系地址:北京市81信箱15分箱(100095),E-mail:guangbao.mi@biam.ac.cn;闵小华(1974—),男,教授,博士,研究方向为高性能钛合金,联系地址:辽宁省大连市甘井子区凌工路2号大连理工大学材料科学与工程学院(116024),E-mail:minxiaohua@dlut.edu.cn

(本文责编:寇凤梅)