



钛及钛合金在超低温下弹性常数与各向异性第一性原理分析

何东, 李佳怡, 姚心海, 刘澎, 司丽娜
(北方工业大学机械与材料工程学院, 北京 100144)

摘要: 钛合金具有高比强度、良好的耐腐蚀性及优异的高低温性能。尤其在超低温环境下, 钛合金展现出的优秀力学性能, 使其成为深空探测、液氢燃料容器等极端工况下的关键材料。一般情况下, 钛及其合金的强度随使用温度的降低逐渐提高, 同时保持良好的塑性。然而, 某些钛合金(如 Ti-6Al-4V 合金)在变形温度低于 70 K 时塑性显著降低。针对这一问题, 基于第一性原理计算, 构建了 $2 \times 2 \times 2$ 的 Ti 超晶胞(16 个 Ti 原子)和 Ti15-Al 体系(15 个 Ti 原子、1 个 Al 原子)模型, 结合声子谱计算, 研究了基态及有限温度下纯钛和 Ti15-Al 体系的弹性常数。通过对比分析, 量化了 Al 元素对密排六方晶体结构钛的弹性常数及弹性各向异性的影响, 揭示了超低温环境对 Ti 及 Ti15-Al 合金弹性各向异性与弹性常数的影响规律。结果表明, HCP 钛晶体在弹性性能上具有显著的各向异性, Al 元素的添加可有效降低其弹性各向异性。在 2—300 K 温度范围内, 纯钛的弹性各向异性基本不受温度变化影响, 而 Ti15-Al 体系的弹性各向异性随温度降低发生显著变化: 参数 Δs_1 逐渐降低, Δs_2 逐渐升高, 并与 Ti 的对应变化曲线相交, 交点对应的温度为分别为 72 和 77 K。此外, 随着温度降低, 纯钛的弹性模量数值随温度降低逐渐增加, 变化率基本保持不变, 而 Ti15-Al 合金的弹性模量却表现出先增加后降低的趋势, 在约 70 K 处出现转折, 与 Ti15-Al 合金韧-脆转变温度相吻合。(专精特新·特殊环境材料服役行为专辑十五之九)

关键词: 超低温; 钛合金; 弹性常数; 各向异性; 第一性原理; 声子谱; 弹性模量; 韧-脆转变

中图分类号: TG146.4

文献标志码: A

文章编号: 1673-9981(2025)03-0481-09

引文格式: 何东, 李佳怡, 姚心海, 等. 钛及钛合金在超低温下弹性常数与各向异性第一性原理分析[J]. 材料研究与应用, 2025, 19(3): 481-489.

HE Dong, LI Jiayi, YAO Xinhai, et al. The Study of Ultra-Low Temperature Influence on the Elastic Constants and Anisotropy for Titanium and Titanium Alloys[J]. Materials Research and Application, 2025, 19(3): 481-489.

0 引言

钛合金因其高强度、强耐蚀性及优异的高低温性能, 在航空航天领域得到广泛应用。纯钛的室温稳定相为 α 相, 具有密排六方(Hexagonal close packed, HCP)的晶体结构。随着温度的降低, 其变形机制逐渐由位错滑移转变为以位错滑移与机械孪生共同作用的塑性变形机制^[1], 这使得钛合金表现出优异的低温力学性能。为进一步提高钛合金强度, 通常需要添加 Al、V 等合金元素, 例如广泛应用的 Ti-6Al-4V 合金。随着合金元素的加入, 钛合金强度提高, 但同时会导致其韧性(塑性)显著降低^[1-5], 尤其是在极低温(< 20 K)下, 甚至会发生塑性流变的宏观失稳现象^[6-8]。

材料的塑性变形行为与其微观塑性变形机理密切相关。位错滑移机制是金属晶体材料的主要变形机制, 而位错的运动主要受弹性应力场与位错核心结构特征控制^[9-10]。值得注意的是, 由于 HCP 晶体结构的低对称性, 钛在变形过程中表现出突出的弹

性^[11]和塑性各向异性^[12]。另外, 合金元素^[13-14]、外加的应力场^[15]、环境温度^[16-17]等因素均对金属晶体弹性常数、弹性各向异性有着显著影响。然而, 针对 HCP 结构的 Ti 及 Ti-Al 合金, 超低温对其弹性常数、弹性各向异性的特征还未被清晰揭示和定量表征。

针对上述问题, 本文采用第一性原理计算方法, 结合声子谱计算, 研究了超低温下钛合金的弹性常数, 定量表征了温度对钛合金的弹性各向异性特征的影响, 对比分析了温度对 Ti 及 Ti15-Al 合金弹性各向异性的影响。

1 模型构建与计算方法

Ti 空间群为 P63/mmc (No. 194), 为 HCP 结构, 晶格常数 $a=b=2.950$, $c=4.686$, $\alpha=\beta=90^\circ$, $\gamma=120^\circ$ ^[18]。首先构建 Ti 的原胞, 几何优化后构建 $2 \times 2 \times 2$ 的 Ti 超晶胞, 超晶胞中共有 16 个 Ti 原子, Al 替换其中的一个 Ti 原子, 形成 Ti15-Al 体系, 其结构模型如图 1 所示。

收稿日期: 2024-07-05

作者简介: 何东, 博士, 副教授, 研究方向为先进金属塑性变形行为与微观机理。E-mail: hedong@ncut.edu.cn。

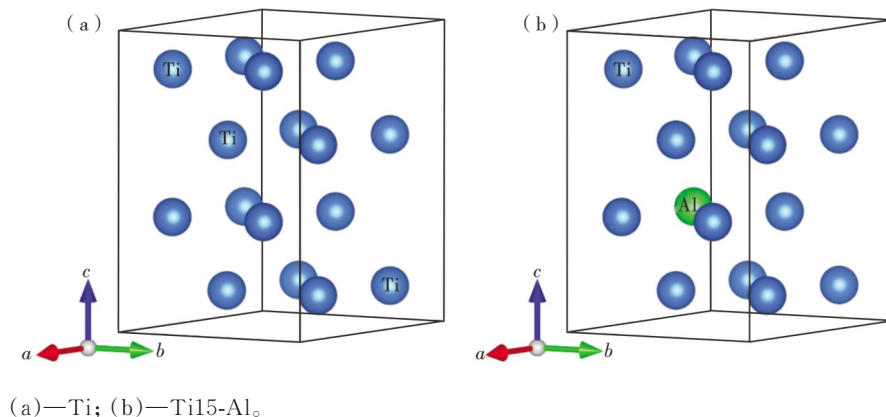


图1 Ti与Ti15-Al合金体系超晶胞结构模型

Figure 1 Supercell structure models of Ti and Ti15-Al alloy systems

不同温度下的弹性常数基于密度泛函理论 (Density functional theory, DFT) 的 VASP (Vienna ab-initio simulation package, VASP) 和 Elastemp^[19] 软件包进行计算。基于密度泛函理论计算过程中, 离子和电子之间的相互作用采用基于平面波基组展开的投影缀加平面波 (Projected augmented waves, PAW) 方法表示, 电子之间相互交换关联作用采用广义梯度近似 (Generalized gradient approximation, GGA) 的 Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) 泛函描述。平面波截断能为 400 eV, 能量收敛标准为 1×10^{-6} eV·atom⁻¹, 第一布里渊区 k -point 矢量取 $9 \times 9 \times 4$ 。

Elastamp 软件在计算有限温度下的弹性常数时, 首先计算 0 K 下的弹性常数 (见式 1)。

$$C_{ijkl} = \frac{1}{\Omega} \left(\frac{\partial^2 U}{\partial \epsilon_{ij} \partial \epsilon_{kl}} \right)_{\epsilon=0} \quad (1)$$

式中, Ω 为体系结构的体积, ϵ_{ij} 为应变张量, U 为 DFT 计算得出的参考体系在 0 K 时的能量。

在此基础上, 有限温度下的弹性常数按式 (2) 的方法计算获得。

$$C_{ijkl}^T = \frac{1}{\Omega^T} \left(\frac{\partial^2 F}{\partial \epsilon_{ij} \partial \epsilon_{kl}} \right)_{\epsilon=0} \quad (2)$$

式中, Ω^T 是温度为 T 时体系结构的体积, F 是温度为 T 时的准简谐近似 (Quasi-harmonic approximated, QHA) 亥姆霍兹自由能 (式 3)。

$$F(V, T) = U(V, 0) + F_{\text{harmonic}} + F_{\text{anharmonic}} \quad (3)$$

式中, $U(V, 0)$ 是 0 K 下的焓, F_{harmonic} 和 $F_{\text{anharmonic}}$ 分别为简谐和非简谐声子振动对自由能的贡献。

在准简谐近似计算中, 忽略非简谐声子振动部分 ($F_{\text{anharmonic}}$), 简谐声子振动对亥姆霍兹自由能的贡献 ($F_{\text{anharmonic}}$) 通过使用 PHONOPY^[20] 软件包计算获得。将不同应变下的亥姆霍兹能量拟合为多项式, 以获得不同温度下的弹性常数。基于 Elastamp 软件包计算有限温度下的弹性常数的详细步骤及具体过程见文献^[19]。

2 结果与分析

2.1 0 K 下的弹性常数

Ti 和 Ti15-Al 合金在 0 K 下的晶体弹性常数 C_{11} 、 C_{12} 、 C_{13} 、 C_{33} 和 C_{44} 结果如表 1 所示。基于第一性原理, 本研究计算的 Ti 的弹性常数 C_{11} 、 C_{12} 、 C_{13} 、 C_{33} 和 C_{44} 分别为 178.9、95.5、84.1、193.7 和 38.7 GPa, 与其他学者的计算 (第一性原理^[21] 或 MEAM^[15]) 和实验测试结果^[22] 较为吻合。

表1 Ti和Ti15-Al合金0 K下的晶体弹性常数

Table 1 Elastic constants of Ti and Ti15-Al alloys at 0 K

Compound	Elastic constants /GPa					Source/ Method
	C_{11}	C_{12}	C_{13}	C_{33}	C_{44}	
Ti	178.9	95.5	84.1	193.7	38.7	Present calculation
	174.0	95.0	72.0	188.0	58.0	MEAM ^[21]
	194.3	65.6	69.9	198.9	46.3	First-principles calculation ^[15]
	176.1	86.9	68.3	190.5	50.8	Experimental(4 K) ^[22]
Ti15-Al	188.5	80.7	76.5	209.4	51.3	Present calculation

图2为Ti和Ti15-Al合金0 K下杨氏模量的三维空间分布图。从图2可见, Ti和Ti15-Al合金弹

性模量在空间分布为椭球型, 反映出Ti和Ti15-Al合金晶体弹性的各向异性特征。

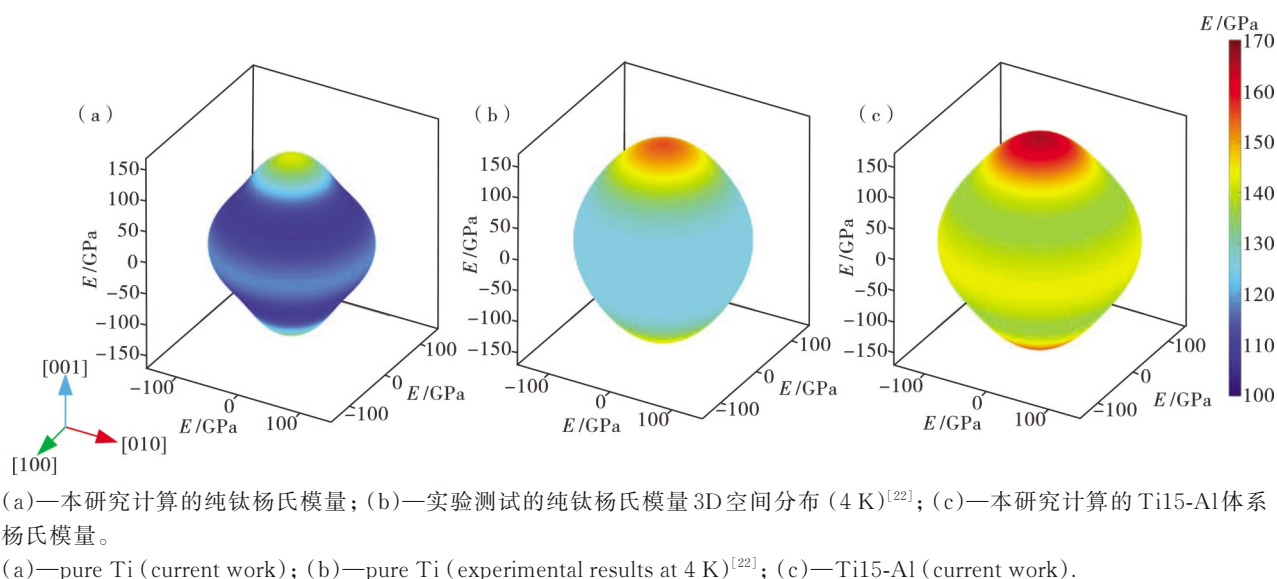


图2 Ti和Ti15-Al晶体弹性(杨氏模量)模量三维空间分布图

Figure 2 3D surface plots of the elastic modulus (Young's modulus E) for Ti and Ti-15Al alloys

为了进一步对比分析弹性各向异性特征,图3给出了Ti和Ti15-Al晶体杨氏模量的三维空间分布在 $[001]$ 、 $[010]$ 和 $[100]$ 三个方向的投影分布。从图

3可见,对于Ti晶体,弹性模量的三维空间分布在 $\{001\}$ 方向投影为圆形,数值为117.9 GPa,接近实验测得测试结果的125.9 GPa^[22]。随着Al的加入,

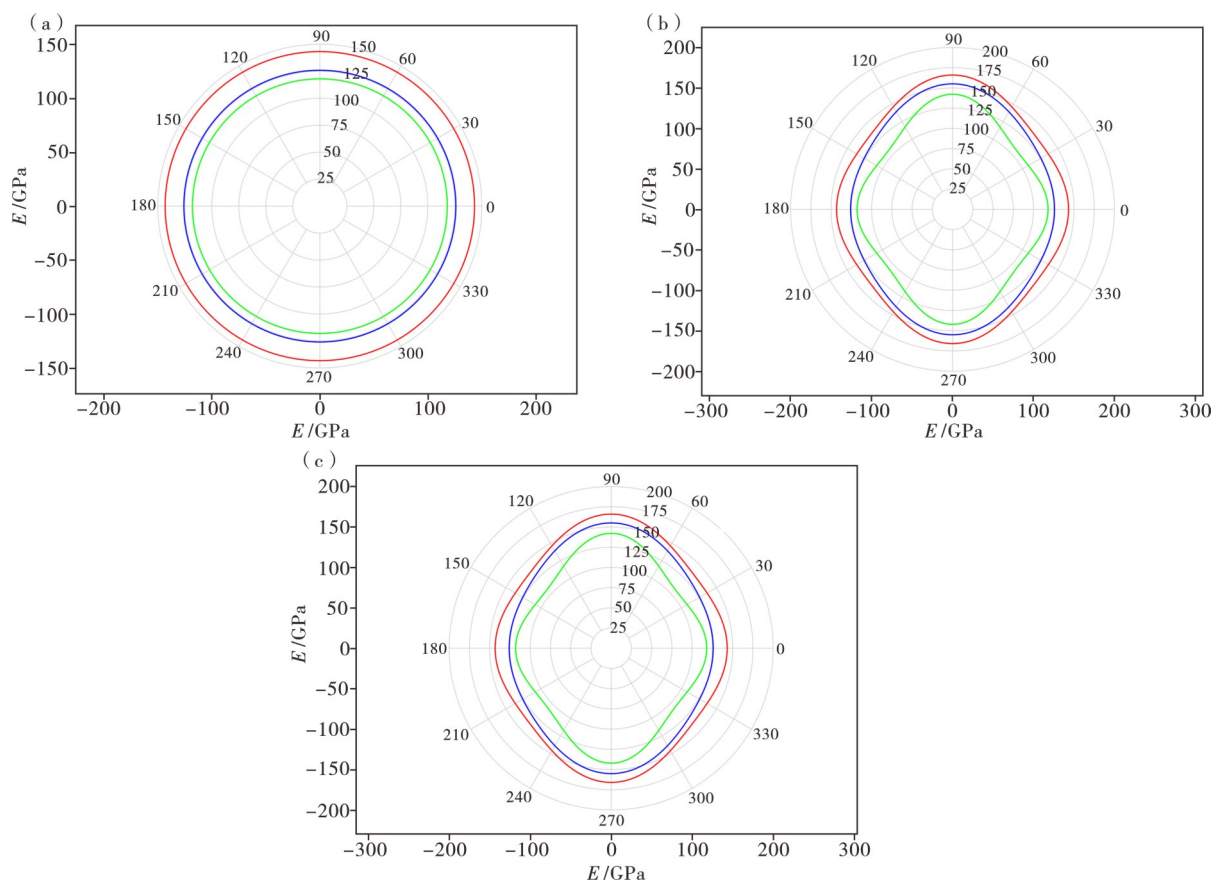


图3 Ti和Ti15-Al晶体弹性(杨氏模量)模量2D投影分布

Figure 3 Planar projections of the elastic modulus (Young's modulus E) for Ti and Ti-15Al alloys

弹性模量增大到143.2 GPa,提高了21.46%。

从[010]和[100]方向的投影为分布图中可以看到,Ti和Ti15-Al的弹性模量分布呈椭圆型,反应出沿晶体不同方向的弹性各向异性。对于Ti,[010]和[100]方向投影的弹性模量最大值($E_{\max}$),最小值($E_{\min}$)分别为142.1和107.0 GPa,最大最小值之比($E_{\max}/E_{\min}$)为1.33,与在4 K下的实验值较吻合^[22]。随着Al原子的加入,[010]和[100]方向投影的弹性常数最大、最小值分别增大到165.9和136.2 GPa,最大最小值之比降低至1.22。

上述结果表明,HCP钛晶体弹性性能具有明显

的各向异性,Al元素的添加,有利于弹性各向异性的降低。

2.2 超低温下的弹性常数

图4为Ti和Ti15-Al合金在2—300 K下的弹性模量三维空间分布。从图4(a)可见,Ti的弹性模量在不同温度下都为椭球型,且[100]、[010]、[001]三个方向的最大值相当。在300 K下,三个方向的最大值均为128.1 GPa,随着温度的逐渐降低,弹性模量数值逐渐增大,当温度降低到4 K时,三个方向的最大值均增大到150.0 GPa。

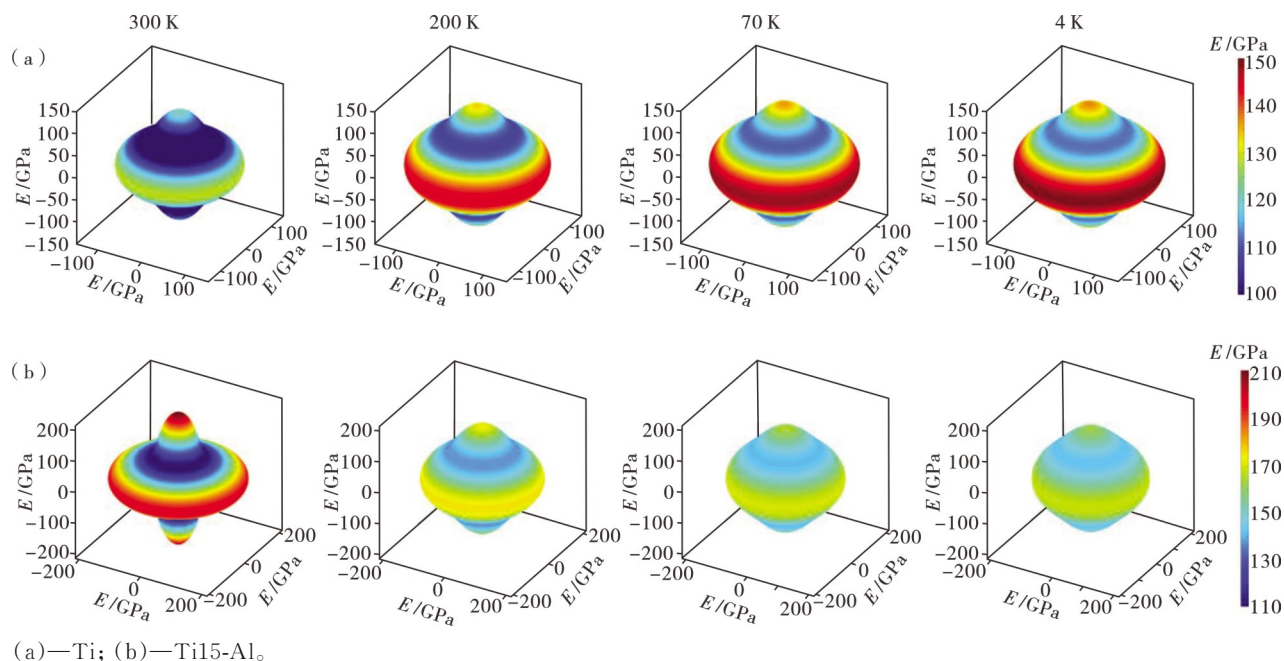


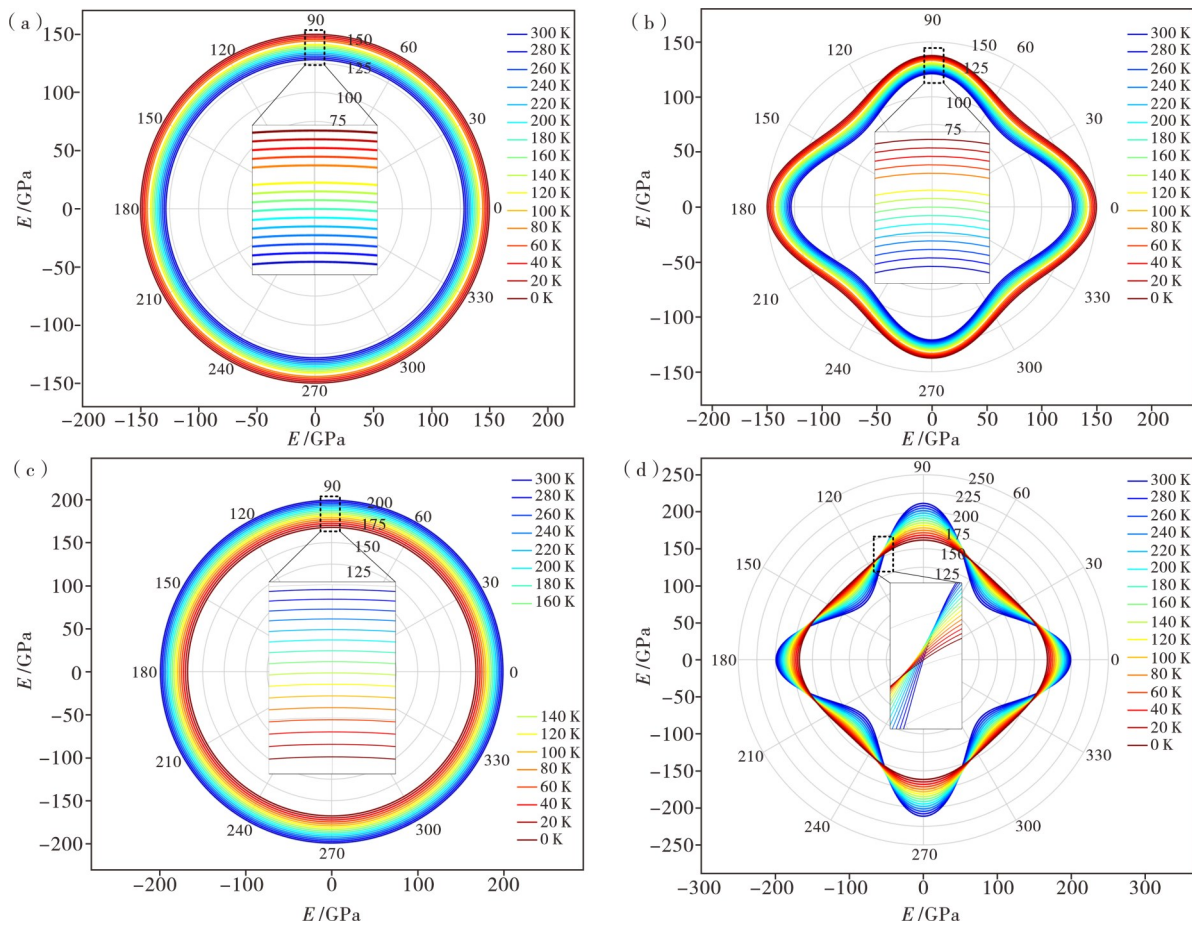
图4 Ti及Ti15-Al不同温度下的弹性常数分布

Figure 4 The 3D surface plots of the elastic modulus for Ti and Ti15-Al alloys at different temperatures

从图4(b)可见,Ti15-Al晶体弹性模量的空间分布与Ti有着较大的区别。在300 K时,Ti15-Al晶体弹性模量的三维空间分布呈“陀螺”型。[100]、[010]、[001]三个方向的最大值均为199.1 GPa。随着温度逐渐降低,晶体弹性常数的空间分布逐渐演化为“椭球型”。随着温度的降低,晶体弹性模量的数值逐渐减小,当温度降低到4 K时,三个方向的最大值均降低到168.1 GPa。

Ti及Ti15-Al不同温度下的弹性模量沿不同方

向的2D投影分布如图5所示。从图5(a—b)可见,对于纯钛,随着温度的降低,晶体各个方向的弹性模量都呈均匀增加趋势。然而,随着Al元素的加入,Ti15-Al晶体各方向的弹性模量却表现出不同的变化趋势。在[001]投影方向上,Ti15-Al晶体弹性性能随温度降低而逐渐降低(见图5(c))。在[010]投影方向上,Ti15-Al晶体弹性性能却表现出最大值逐步降低,最小值的值逐步升高,最终导致各向异性逐渐降低的变化趋势(见图5(d))。



(a)—Ti, [001]方向投影; (b)—Ti, [010]方向投影; (c)—Ti15-Al, [001]方向投影; (d)—Ti15-Al, [010]方向投影。
(a)—pure Ti, [001] direction projection; (b)—pure Ti, [010] direction projection; (c)—Ti15-Al, [001] direction projection; (d)—Ti15-Al, [010] direction projection.

图5 Ti及Ti15-Al不同温度下的弹性模量二维投影分布

Figure 5 Planar projections of the elastic modulus for Ti and Ti15-Al at different temperatures

2.3 温度对弹性各向异性的影响

对于HCP晶体结构,弹性的各向异性通常用 Δp ($\Delta p = C_{33}/C_{11}$), Δs_1 ($\Delta s_1 = (C_{11} + C_{33} - 2C_{13})/$

$(4C_{44})$)和 Δs_2 ($\Delta s_2 = 2C_{44}/(C_{11} - C_{12})$)来分析^[23]。图6为在0—300 K温度范围内, Ti及Ti15-Al的 Δp 、 Δs_1 和 Δs_2 随温度变化的情况。

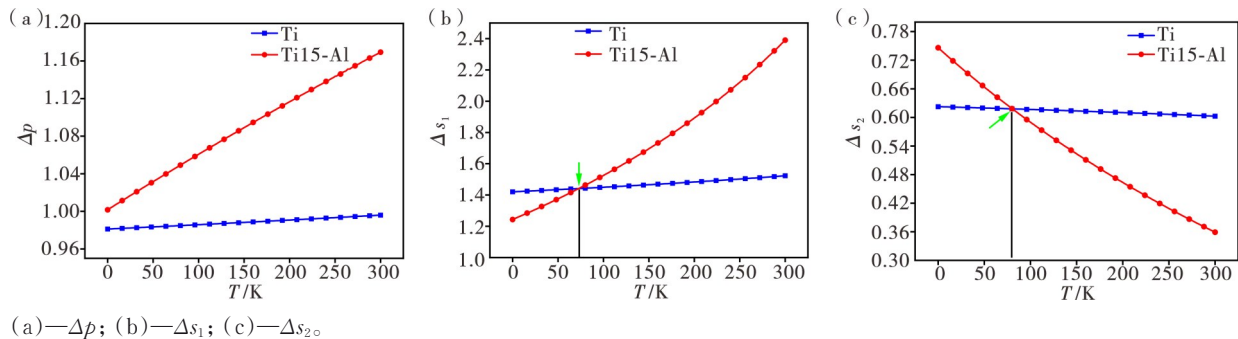


图6 Ti及Ti15-Al的 Δp 、 Δs_1 和 Δs_2 随温度变化

Figure 6 The Δp , Δs_1 and Δs_2 values of Ti and Ti15-Al alloy varied with temperature

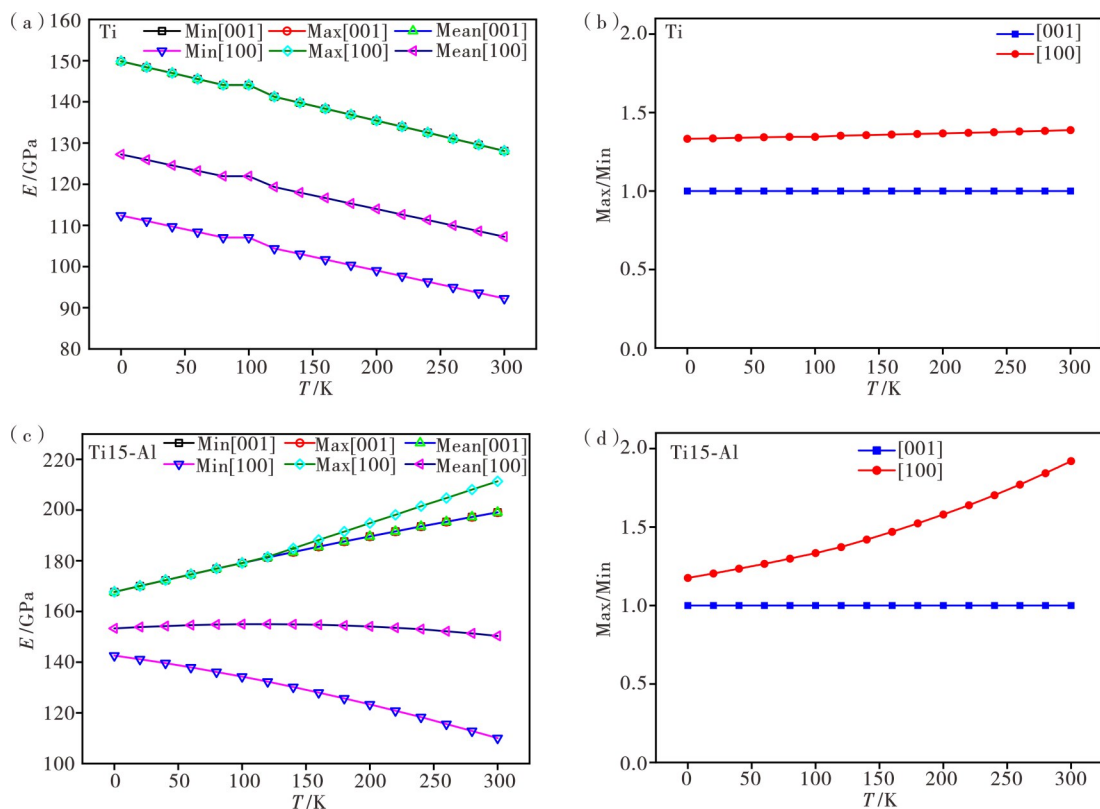
从图6可见,与前面分析的弹性模量随温度变化的规律类似:随着温度的降低, Ti的 Δp 、 Δs_1 和 Δs_2

均不随温度的变化而明显变化;而 Ti15-Al的 Δp 、 Δs_1 和 Δs_2 均表现出随着温度降低发生显著变化的趋

势。值得注意的是,随着温度的逐渐减低,Ti15-Al的 Δs_1 逐渐降低而 Δs_2 却逐渐升高,并与Ti的对应变化曲线相交,交点对应的温度为分别为72和77 K。

为了进一步分析温度对弹性各向异性的影响,图7给出了弹性模量随温度变化的变化规律。从图7(a—b)可见,对于纯钛,随着温度的降低,弹性模量在[100]和[001]方向的最大值,最小化以及平均值均逐渐增大。值得注意的是,在[001]方向上,随着

温度的降低,最大值、最小值、平均值均随温度增加的幅度相当($\Delta E_{\max-\text{mean}}$: 22.62—20.83 GPa, $\Delta E_{\text{mean}-\text{min}}$: 14.83—15.01 GPa),三条曲线保持近似平行关系。随着温度的降低,不论在[100]还是[001]方向,弹性模量最大值与最小值的比值基本保持不变,上述结果进一步表明,Ti的弹性各向异性性能在0—300 K的温度范围内不随温度的降低而发生显著改变。



(a,c)—Ti及Ti15-Al的弹性模量最大、最小、平均值随温度变化曲线; (b,d)—Ti及Ti15-Al的弹性模量最大、最小值之比平均值随温度变化曲线。

(a,c)—the max, min, and mean values of the elastic modulus of Ti and Ti15-Al at different temperatures; (b, d)—the max/min values of the elastic modulus of Ti and Ti15-Al at different temperatures.

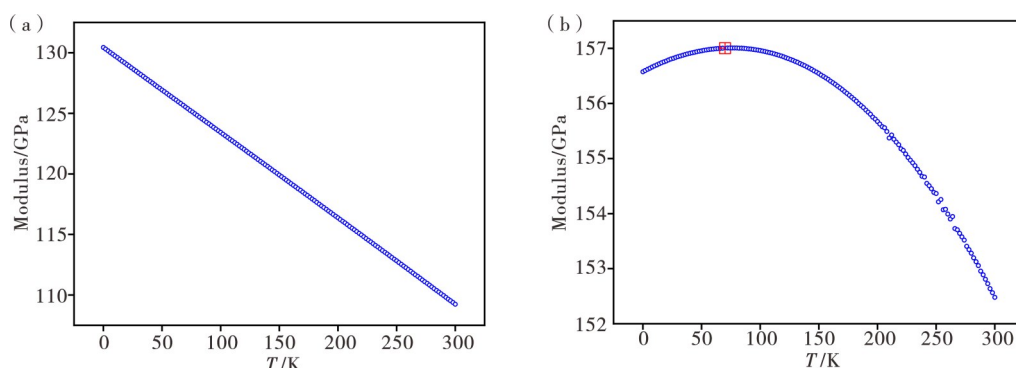
图7 Ti及Ti15-Al弹性性能随温度的变化规律

Figure 7 Variation of elastic properties of Ti and Ti15-Al with temperature

然而,随着Al元素的加入,Ti15-Al晶体的弹性性能随温度的变化表现出与Ti显著不同的规律。从图7(c—d)可见,随着温度的降低,Ti15-Al晶体弹性模量在[001]方向的最大值,最小化以及平均值均逐渐降低。在[100]投影方向,弹性模量的最大值随温度降低而逐渐降低,而最小值却随温度的降低逐步升高,进而导致其平均值基本不随温度变化而变化。而Ti15-Al晶体弹性模量在[100]方向 $E_{\max}/E_{\min}$ 值随着温度降低也逐渐从300 K时的1.92降低

到0 K下的1.18,各向异性性能逐渐降低。

图8为Ti及Ti15-Al合金体弹性模量随温度的变化曲线。从图8可见,随着变形温度的降低,Ti的体弹性模量从300 K下的109.24 GPa逐渐增加至0 K下的130.44 GPa。而Ti15-Al合金的体模量随着温度的降低,却表现出先增加后降低的趋势。当温度从300 K降低至76 K过程中,体模量从152.48 GP增加到157.01 GPa,随着温度的进一步降低,体模量逐步降低至0 K下的156.58 GPa。



(a)—Ti; (b)—Ti15-Al。

图8 Ti及Ti15-Al体弹性模量随温度的变化曲线

Figure 8 Temperature dependence of the bulk elastic modulus for Ti and Ti15-Al

图9为Ti及Ti15-Al合金体模量随温度降低的变化率($\theta = \frac{\partial B}{\partial T}$)曲线。从图9可见,随着温度的降低,Ti的体弹性模量的变化率在0.070 1—0.071 7之间,变化率基本不随温度发生变化。然而,Ti15-Al晶体的体弹性模量随温度的变化率随从288 K时的0.04逐渐减低到0 K时的-0.01;在70 K左右,Ti15-Al晶体的体弹性模量随温度的变化率为0,对应在该温度下,Ti15-Al晶体的体弹性模量的最大值。

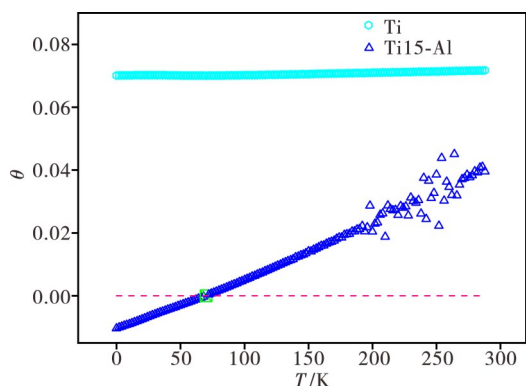


图9 Ti及Ti15-Al合金体弹性模量随温度的变化率曲线

Figure 9 Curves of the rate of change of bulk elastic modulus with temperature for Ti and Ti15-Al

3 总结

本文基于第一性原理计算方法,结合声子谱计算,开展了钛及钛合金超低温下弹性常数的计算研究,对比分析了Ti及Ti15-Al合金超低温下弹性常数变化特征,揭示了超低温对钛及钛合金弹性各项异性的影响规律。结合计算结果与对比分析,主要结论如下。

(1) 基态(0 K)下Ti的弹性常数 C_{11} 、 C_{12} 、 C_{13} 、 C_{33} 和 C_{44} 值分别为178.9、95.5、84.1、193.7和38.7 GPa。HCP钛晶体弹性性能具有明显的各向异性,随着Al元素的添加,弹性各向异性逐渐降低。

(2) 在2—300 K的温度范围内,Ti的弹性各向异性不随温度的变化而显著变化,而Ti15-Al弹性各向异性随温度降低变化显著: Δs_1 逐渐降低, Δs_2 逐渐升高,并与Ti的对应变化曲线相交,其交点对应的温度为分别为72和77 K。

(3) 在2—300 K的温度范围内,Ti的体弹性模量随温度降低逐渐增大,Ti15-Al晶体的体弹性模量随温度的降低先增大后降低,并在70 K左右达到最大值。

(4) Ti与Ti15-Al合金体系的体弹性模量变化率(θ)随温度变化的规律表现出显著差异。Ti的体弹性模量变化率(θ)随温度降低基本保持不变,而Ti15-Al晶体的体弹性模量变化率(θ)随温度降低而降低,在70 K左右, θ 值降为0,该温度对应Ti15-Al晶体的体弹性模量的最大值。

参考文献:

- [1] 黄朝文,葛鹏,赵永庆,等.低温钛合金的研究进展[J].稀有金属材料与工程,2016,45(1):254-260.
- [2] 郑桂钧,千东范,赵祖德,等.TA7-d钛合金显微组织与超低温性能之间的关系[J].稀有金属,1984,03:50-53.
- [3] 郭金鑫,于大千,阚文斌,等.控温策略优化对电子束选区熔化成形TC4钛合金力学性能的影响[J].材料研究与应用,2023,17(6):1015-1022.
- [4] 刘伟,杜宇.低温钛合金的研究现状[J].稀有金属快报,2007,26(9):6-10.
- [5] 赵兴科,徐明亮,徐帅.钛合金激光表面加工研究进展[J].材料研究与应用,2023,17(4):643-657.
- [6] MOSKALENKO V A, STARTSEV V I, KOVALEVA V N. Low temperature peculiarities of

- plastic deformation in titanium and its alloys [J]. *Cryogenics*, 1980, 20(9): 503-508.
- [7] CONRAD H. Plastic flow and fracture of titanium at low temperatures [J]. *Cryogenics*, 1984, 24 (6) : 293-304.
- [8] NAYAN N, SINGH G, PRABHU T A, et al. Cryogenic mechanical properties of warm multi-pass caliber-rolled fine-grained titanium alloys: Ti-6Al-4V (normal and ELI grades) and VT14 [J]. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 2017, 49(1): 128-146.
- [9] LIU A, WEN T, HAN J, et al. Finite-temperature screw dislocation core structures and dynamics in α -titanium [J]. *npj Computational Materials*, 2023, 9 (1): 1-13.
- [10] GHAZISAEIDI M, TRINKLE D R. Core structure of a screw dislocation in Ti from density functional theory and classical potentials [J]. *Acta Materialia*, 2012, 60 (3): 1287-1292.
- [11] TESAŘ K, KOLLER M, VOKOUN D, et al. Texture, elastic anisotropy and thermal stability of commercially pure titanium prepared by room temperature ECAP [J]. *Materials & Design*, 2023, 226: 111678.
- [12] GONG J, WILKINSON A J. Anisotropy in the plastic flow properties of single-crystal α titanium determined from micro-cantilever beams [J]. *Acta Materialia*, 2009, 57(19): 5693-5705.
- [13] KWASNIAK P, DELANNOY S, PRIMA F, et al. Competition between prismatic and basal slip in hexagonal titanium-aluminum alloys with short-range order [J]. *Materials Research Letters*, 2023, 11 (6) : 407-413.
- [14] TANAKA K, OKAMOTO K, INUI H, et al. Elastic constants and their temperature dependence for the intermetallic compound Ti3Al [J]. *Philosophical Magazine A*, 1996, 73(5): 1475-1488.
- [15] HAO P D, CHEN P, DENG L, et al. Anisotropic elastic and thermodynamic properties of the HCP-titanium and the FCC-titanium structure under different pressures [J]. *Journal of Materials Research and Technology*, 2020, 9(3): 3488-3501.
- [16] OGI H, KAI S, LEDBETTER H, et al. Titanium's high-temperature elastic constants through the hcp-bcc phase transformation [J]. *Acta Materialia*, 2004, 52 (7): 2075-2080.
- [17] GÜLER E, UĞUR Ş, GÜLER M, et al. Molecular dynamics exploration of the temperature-dependent elastic, mechanical, and anisotropic properties of hcp ruthenium [J]. *The European Physical Journal Plus*, 2024, 139(5): 372-379.
- [18] KWASNIAK P, CLOUET E. Basal slip of a screw dislocations in hexagonal titanium [J]. *Scripta Materialia*, 2019, 162: 296-299.
- [19] BALASUBRAMANIAN K, MANNA S, SANKARANARAYANAN S K R S. Elastemp-A workflow to compute the quasi-harmonic temperature dependent elastic constants of materials [J]. *Computational Materials Science*, 2023, 226: 112223.
- [20] TOGO A, TANAKA I. First principles phonon calculations in materials science [J]. *Scripta Materialia*, 2015, 108: 1-5.
- [21] HENNIG R G, LENOSKY T J, TRINKLE D R, et al. Classical potential describes martensitic phase transformations between the α , β , and ω titanium phases [J]. *Physical Review B*, 2008, 78(5): 054121.
- [22] FISHER E S, RENKEN C J. Single-crystal elastic moduli and the hcp $\rightarrow$ bcc transformation in Ti, Zr, and Hf [J]. *Physical Review*, 1964, 135(2A): 482-494.
- [23] STEINLE-NEUMANN G, STIXRUDE L, COHEN R E. First-principles elastic constants for the hcp transition metals Fe, Co, and Re at high pressure [J]. *Physical Review B*, 1999, 60(2): 791-799.

The Study of Ultra-Low Temperature Influence on the Elastic Constants and Anisotropy for Titanium and Titanium Alloys

HE Dong, LI Jiayi, YAO Xinhai, LIU Peng, SI Lina

(School of Mechanical and Materials Engineering, North China University of Technology, Beijing 100144, China)

Abstract: Titanium alloys are widely used in the aerospace industry due to their high specific strength and excellent mechanical properties at both high and low temperatures. As the deformation temperature decreases, the strength of pure titanium increases, and it maintains excellent plasticity. However, titanium alloys, such as Ti-6Al-4V, exhibit a significant reduction in plasticity when the deformation temperature drops below 70 K. To address this issue, the present study constructs computational models of a $2 \times 2 \times 2$ Ti supercell (16 Ti atoms) and a Ti15-Al system (15 Ti atoms and 1 Al atom). First-principles calculations combined with phonon analysis are employed to study the elastic constants of titanium alloys at ultra-low

temperatures. The elastic constants of both pure titanium and Ti15-Al systems at the ground state and at finite temperatures are calculated separately. The impact of the addition of Al element on the elastic constants and elastic anisotropy of the hexagonal close-packed titanium structure is analyzed and compared. The elastic anisotropy of titanium alloys at various ultra-low temperatures is quantitatively characterized, and the influence of temperature on the elastic anisotropy and constants of both Ti and Ti15-Al alloys is thoroughly discussed. The results show that HCP titanium exhibits significant elastic anisotropy, and the addition of Al reduces the elastic anisotropy of the Ti15-Al alloy compared to pure titanium. In the temperature range of 2 K to 300 K, the elastic anisotropy of pure Ti remains relatively constant, while that of Ti15-Al undergoes significant changes with decreasing temperature: the Δs_1 parameter gradually decreases, while Δs_2 increases. These two curves eventually intersect at temperatures of 72 K and 77 K, respectively. As the temperature decreases, the elastic modulus of pure titanium remains nearly constant, while the elastic modulus of Ti15-Al alloy shows a continuous increasing trend, with a notable turning point around 70 K, which closely coincides with the ductile-to-brittle transition temperature of the Ti15-Al alloy.

Keywords: ultra-low temperature; titanium alloy; elastic constant; elastic anisotropy; first principles; phonon calculation; elastic modulus; ductile-brittle transition

(学术编辑:孙文)