

基于 Calphad 方法计算钛合金 β 相转变温度

王树森¹, 林崇茂¹, 胡仁民³, 吴广新^{1,2}, Ali Wajid¹, 鲁雄刚^{1,2}, 李重河^{1,2}

(1. 省部共建高品质特殊钢冶金与制备国家重点实验室 上海市钢铁冶金新技术开发应用重点实验室

上海大学材料科学与工程学院, 上海 200072)

(2. 上海特种铸造工程技术研究中心, 上海 201605)

(3. 宝钢特钢有限公司, 上海 200940)

摘要: 通过 Calphad 方法优化了 Ti-Al-Fe-Mn 四元系数据库, 利用此数据库计算了 4 个子三系相关相变温度, 并与已有的实验数据进行了对比和讨论, 结果符合很好, 证明了由此四元数据库计算各相变温度的可靠性。再通过该数据库计算了 Ti-Al-Fe-Mn 四元系一系列合金的 $\alpha+\beta/\beta$ 相变温度, 并将计算结果与前人的经验公式计算结果进行了对比, 在此基础上建立了更准确的计算该体系相变温度的经验公式。上述结果可为钛合金相变温度的确定提供一种可行的方法。

关键词: Calphad; Ti-Al-Fe-Mn; 相变温度

中图法分类号: O414.13

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2018)01-0181-06

钛及钛合金的相变温度是指在热平衡状态下 α 相刚好全部转变为 β 相的温度^[1], 在钛合金研究中, 相变温度是制定合金热处理工艺(如锻造、轧制、退火等)参数的重要依据之一^[2]。目前测定相变温度点的方法主要有连续升温金相法、差热分析法、膨胀法、计算法等, 对于钛合金相变点的准确测定在国内外一直是个研究热点。田飞, 王腾飞等^[3,4]用连续升温金相法分别测定了 TC8 钛合金和 BT25 钛合金相变点, 连续升温金相法应用较为广泛, 然而实验周期长, 不确定因素较多, 效率较低; 王志辉等^[5]通过差热分析法测定了 Ti62421s 钛合金的相变温度, 何伟等^[6]分别用算法、差热分析法和连续升温金相法测定了 TC4 的相变温度, 热膨胀法和差热分析法虽然效率高周期短, 但需要复杂的实验设备和条件; 实验法简单易行, 但使用的公式是多元线性方程, 未考虑到相变点与化学元素之间的非线性关系以及交互作用。孙宇等^[7]应用人工神经网络预测了一系列钛合金相变点, 人工神经网络预测相变点虽然准确度较高, 但其依靠的是一个暗箱模型, 没有显性表达式, 且使用过程中需要输入大量数据, 计算方式严重非线性, 难以外推数据。

利用部分商业软件及其自带的数据库计算相变温度误差较大, 分析原因可能是部分数据库未得到优化直接外推造成的。本研究通过 Calphad 方法建立 Ti-Al-Fe-Mn 四元系数据库, 利用该数据库计算四元系中不同成分的相变温度, 同时与之前相关计算相变温度公式计算的数

值进行对比分析, 并通过拟合得到计算此体系的相变温度的表达式, 得到一种计算钛及钛合金的相变温度的方法。

1 四元数据库的合理性验证

1.1 Calphad 方法

Calphad 方法在相图的评估优化中已被广泛应用。其基本原理是根据所研究体系中各相的特点, 结合晶体结构类型和相平衡数据, 分别建立体系中各相的热力学模型和对应的吉布斯自由能表达式, 结合优选的热力学数据和实验数据, 利用相图软件评估优化表达式待定参数, 最终得到与研究体系具有热力学自洽性的相图和各热力学性质的优化参数。Calphad 方法最重要的优点是考虑了体系热力学性质和相平衡信息之间的内在联系, 从而确保了体系热力学数据之间的自洽性, 这也为通过低元系热力学性质优化参数和相图外推预测高组元系的热力学性质和相关相图奠定了基础。

1.2 热力学模型

Ti-Al-Fe-Mn 四元相图体系中使用的相热力学模型有 3 类: 单点阵缔合物模型适用于 Liquid、bcc_A2、hcp_A3 等无序溶液相; 双亚点阵模型适用于 TiMn₃、TiMn₄、 β TiMn 等化学计量比化合物相; 缔合物能量模型适用于 LavesC14、TiAl、TiAl₂、Al₃Fe₅ 和 Al₃Mn₅ 等金属间化合物相。任一相 m 的 Gibbs 自由能算法通式为:

$$G_m = G_m^{\text{ref}} + \Delta_{\text{mix}} G_m^{\text{id}} + {}^E G \quad (1)$$

收稿日期: 2017-01-10

基金项目: 国家自然科学基金 (51225401, 51374142); 上海市科委基金项目 (14JC1491400); 国家重点基础研究发展计划资助项目 (2014CB643403)

作者简介: 王树森, 男, 1990 年生, 硕士生, 上海大学材料科学与工程学院, 上海 200072, 电话: 021-56332934, E-mail: zmddahu@shu.edu.cn

$$G_m^{\text{ref}} = \sum_{i=\text{Ti,Al,Fe,Mn}} x_i G_{m,i}^0 \quad (2)$$

$$\Delta_{\text{mix}} G_m^{\text{id}} = RT \sum_{i=\text{Ti,Al,Fe,Mn}} x_i \ln x_i \quad (3)$$

G_m^{ref} 为 m 相中所有纯组元对 Gibbs 自由能的贡献, 展开式见式 (2)。 $\Delta_{\text{mix}} G_m^{\text{id}}$ 为理想混合熵对 m 相 Gibbs 自由能的贡献, 展开式见式 (3)。 $E G$ 为 m 相的超额 Gibbs 自由能, 表示的是溶液偏离理想溶液的程度。 $E G$ 是相图热力学计算和相图数据库优化的关键, 各模型对应的自由能计算过程及其表达式参见文献[8]介绍。

1.3 优化及外推方法

本次优化工作的重点是 4 个三元体系的优化, 其优化方法是, 在选择适当的热力学模型来描述各相 Gibbs 自由能后, 利用经过评估后的实验数据及热力学数据优化计算 Gibbs 自由能表达式中的可调参数(如各原子间的交互作用参数)。对于每一个实验数据都可以根据实验误差-数据可靠性和个人判断-数据合理性选择一定的权重, 用恰当的算法和程序按照相平衡的原理计算相图。将每次的计算结果与实验数据进行比较, 如吻合不好则调整参数或重新选择热力学模型, 再优化和计算, 直至

计算结果与大部分相图和热力学数据在实验误差内相吻合。因为该四元系没有四元新相存在, 所以由 4 个三元数据库可以直接外推得到四元数据库。

1.4 三元系相变点计算值与实验值对比

为确定 Ti-Al-Fe-Mn 四元系数据库的合理性, 可利用该体系的数据库计算相关的相变温度, 并与实验数据对比。然而并未发现有关于该四元系相变温度的实验数据, 只是子三元系中有相关的实验数据。但是, 该四元系数据库由 4 个子三元系的数据库直接外推得到, 如果 4 个子三元系中相关相变温度能与实验数据吻合, 那么可以认为该四元系数据库也是合理的。

使用相图计算软件分别计算 Ti-Al-Fe-Mn 系中 4 个子三元系(即 Ti-Al-Fe 系, Ti-Al-Mn 系, Ti-Fe-Mn 系和 Al-Fe-Mn 系)不同合金成分相变温度值, 并与前人报道的实验数据作对比, 结果如表 1 所示。在已有实验值的 51 组数据中, 除第 22, 44 组绝对误差达到 13 °C 外, 其余值均与实验值有较小的误差。计算表明采用 Caphad 方法预报数据的绝对误差平均值为 6.65 °C, 相对误差值为 0.669%, 说明计算值与实验值吻合很好。

表 1 4 个子三元系不同成分合金相变温度值与实验值对比

Table 1 Comparison of calculated values and experiment values for different alloys in four ternary systems

No.	Composition/at%				Phase transformation reaction	Calculated temperature/°C	Experiment temperature/°C	Error/±°C	Relative error/%	Ref.
	Ti	Al	Fe	Mn						
1	-	10.4	70.7	18.9		1095	1100	-5	0.45	[9]
2	-	10.7	67.4	21.9		1109	1100	-1	0.09	[9]
3	-	12.1	59.3	28.6		1104	1100	+6	0.55	[9]
4	-	13.4	49.6	37.0		1108	1100	+8	0.73	[9]
5	-	14.1	47.1	38.8		1095	1100	-5	0.45	[9]
6	-	11.1	73.5	15.4		1004	1000	+4	0.40	[9]
7	-	12.1	68.8	19.1		1006	1000	+6	0.60	[9]
8	-	13.1	63.5	23.4	bcc_A2→fcc_A1	1007	1000	+7	0.70	[9]
9	-	14.1	58.2	27.7		1004	1000	+4	0.40	[9]
10	-	14.4	56.3	29.3		1008	1000	+8	0.80	[9]
11	-	13.1	70.5	16.4		894	900	-6	0.67	[9]
12	-	14.1	66.0	19.9		899	900	-1	0.11	[9]
13	-	15.1	60.9	24.0		905	900	+5	0.56	[9]
14	-	16.1	56.5	27.4		898	900	-2	0.22	[9]
15	-	16.4	54.0	29.6		909	900	+9	1.00	[9]
16	34.0	2.9	63.1	-		1004	1000	+4	0.40	[10]
17	28.9	3.0	68.1	-		991	1000	-9	0.90	[10]
18	29.2	4.2	66.6	-		1004	1000	+4	0.40	[10]
19	29.5	6.2	64.3	-	bcc_A2→LavesC14	1011	1000	+11	1.10	[10]
20	34.1	7.9	58.0	-		1010	1000	+10	1.00	[10]
21	28.7	2.0	69.3	-		911	900	+11	1.22	[11]
22	28.9	2.6	68.5	-		913	900	+13	1.44	[11]

No.	Composition/at%				Phase transformation reaction	Calculated temperature/°C	Experiment temperature/°C	Error/ \pm °C	Relative error/%	Ref.
	Ti	Al	Fe	Mn						
23	29.3	3.8	66.9	-		902	900	+2	0.22	[11]
24	29.5	5.2	65.2	-		904	900	+4	0.44	[11]
25	29.7	6.7	63.6	-		902	900	+2	0.22	[11]
26	29.2	1.5	69.3	-	bcc_A2→LavesC14	789	800	-11	1.38	[10]
27	29.2	1.7	69.1	-		797	800	-3	0.38	[10]
28	29.5	2.6	67.8	-		788	800	-12	1.50	[10]
29	29.5	3.3	67.2	-		804	800	+4	0.50	[10]
30	29.7	3.8	66.5	-		805	800	+5	0.63	[10]
31	31.8	41.2	-	27.0		1158	1150	+8	0.70	[12]
32	32.3	37.9	-	29.8		1153	1150	+3	0.26	[12]
33	32.8	35.1	-	32.1		1148	1150	-2	0.17	[12]
34	33.1	32.8	-	34.1		1156	1150	+6	0.52	[12]
35	33.7	34.4	-	31.9	bcc_A2→LavesC14	1009	1000	+9	0.90	[12]
36	34.7	26.0	-	39.3		1008	1000	+8	0.80	[12]
37	35.7	18.7	-	45.6		1011	1000	+11	1.10	[12]
38	36.7	12.6	-	50.7		1005	1000	+5	0.50	[12]
39	38.0	6.2	-	55.8		1012	1000	+12	1.20	[12]
40	51.8	41.9	-	6.3	bcc_A2→hcp_A3	1311	1300	+11	0.84	[13]
41	53.1	44.8	-	2.1	hcp_A3→ γ TiAl	1303	1300	+3	0.23	[13]
42	51.1	0.45	-	3.9		1304	1300	+4	0.31	[13]
43	52.7	39.9	-	7.4	bcc_A2→ γ TiAl	1208	1200	+8	0.67	[13]
44	47.8	40.6	-	11.6		1187	1200	-13	1.08	[13]
45	55.9	41.8	-	2.3	hcp_A3→ γ TiAl	1199	1200	-1	0.08	[13]
46	62.2	36.9	-	0.9	Ti ₃ Al→ γ TiAl	994	1000	-6	0.60	[13]
47	78.2	-	19.1	2.7		1010	1000	+10	1.00	[14]
48	75.8	-	16.9	7.2		1011	1000	+11	1.10	[14]
49	73.8	-	15.9	10.3	bcc_A2→bcc_B2	1012	1000	+12	1.20	[14]
50	72.4	-	15.0	12.6		1005	1000	+5	0.50	[14]
51	70.6	-	14.6	14.8		1009	1000	+9	0.90	[14]

Mean absolute error: 6.65 °C

Average relative error: 0.669%

2 Calphad 方法计算及讨论

2.1 经验公式

钛合金的相变温度受到合金元素种类和含量的影响,同时微量的杂质元素也会影响相变温度。目前较为常用的钛合金相变温度经验公式是 Bania 推算出的^[15],推算出计算公式为:

$$T_{\alpha+\beta/\beta}=885\text{ }^{\circ}\text{C}+\sum(\text{各元素含量}\times\text{该元素对相变点的影响}) \quad (4)$$

各元素对相变点的影响值部分见表 2^[16]。由表 2 可以看出,该公式采用了多区间线性函数方式计算相变点,且对合金元素的成分进行了范围限定,合金元素收录较少。而后, C. F. Yolton 等人^[17]研究了 Mo、Al、Fe 等元素对钛合金 β 相变点的影响系数, P. J. Bania 等人^[16]研究了 V、W、Nb、Mn 等元素对钛合金相变点的影响系数。孙宇等人^[7]对两者的工作进行了对比和总结,以 Yolton 等人拟合的经验公式为基础,将其未包含的元素

用 P. J. Bania 等人的研究成果进行补充,总结出经验公式如下:

$$T_{\alpha+\beta/\beta}=872\text{ }^{\circ}\text{C}-7.7[\text{Mo}]-5.5[\text{V}]-13.8[\text{W}]-0.6[\text{Nb}]-15.6[\text{Ta}]-2.8[\text{Cr}]-5.6[\text{Cu}]+4.4[\text{Ni}]+3.3[\text{Co}]+4.4[\text{Mn}]+23.4[\text{Al}]-4.3[\text{Zr}]-8.4[\text{Fe}]+32.1[\text{Si}] \quad (5)$$

式中,运算符号[元素]是指以该元素质量分数的 100 倍代入计算。如某元素 A 的质量分数为 5% 则[A]=5。

公式(5)考虑了较为全面的化学元素,且考虑了杂质元素对 β 相变的影响。但是,其将钛合金杂质元素含量假设为一个定值: O: 1400 $\mu\text{g/g}$; N: 100 $\mu\text{g/g}$; H: 30 $\mu\text{g/g}$ 。文献[16]指出,O 对合金 β 相变点的贡献为+3.3/100 $\mu\text{g/g}$,说明公式(5)考虑了+46.2 °C 的 O 对 β 相变点的影响。

孙书英等人^[18]根据 Ti-X 二元相图,获取了 β 相变点转变曲线的数据,并对曲线进行回归分析,得出了可以精确计算一定成分范围内钛合金 $\alpha+\beta/\beta$ 相变点的计算公式:

$$T_{\alpha+\beta/\beta}=882\text{ }^{\circ}\text{C}+\sum F_i(X_i) \quad (6)$$

表 2 元素含量对钛合金相变点的影响

Table 2 Effect of element content on phase transformation of titanium alloys^[15]

Element type	Element	Element content, ω/%	Effect to transus temperature
α stabilizer	Al	0~2.0	+14.5°C/1.0%
		2.0~7.0	+23.0°C/1.0%
	N	0~0.5	+5.5°C/0.01%
	O	0~1.0	+2.0°C/0.01%
	C	0~0.15	+2.0°C/0.01%
β stabilizer	H	0~5.0	-5.5°C/0.01%
	Mo	0~5.0	-5.5°C/1.0%
	Fe	0~15.0	-16.5°C/1.0%
	Nb	0~10.0	-8.5°C/1.0%
	Cr	0~7.0	-15.5°C/1.0%
Neutral element	Zr	0~10.0	-2.0°C/1.0%
	Sn	0~18.0	-1.0°C/1.0%

表 3 $T_{\beta\gamma}=F_i(X_i)$ 表达式及适用浓度范围

Table 3 Formula of $T_{\beta\gamma}=F_i(X_i)$ ^[18]

Element	$T_{\beta\gamma}/^{\circ}\text{C}$	Applicable concentration range, ω/%
Al	$27.48609 \times [\text{Al}] - 0.79419 \times [\text{Al}]^2 + 0.01277 \times [\text{Al}]^3$	0~20
Zr	$-3.53793 \times [\text{Zr}] - 0.04004 \times [\text{Zr}]^2 - 0.00037309 \times [\text{Zr}]^3$	0~40
Sn	$-0.19057 \times [\text{Sn}] + 0.11067 \times [\text{Sn}]^2 - 0.1343 \times [\text{Sn}]^3 + 0.01559 \times [\text{Sn}]^4 - 0.000571637 \times [\text{Sn}]^5$	0~10
Mo	$-12.2307 \times [\text{Mo}] + 0.29652 \times [\text{Mo}]^2 - 0.00633 \times [\text{Mo}]^3$	0~20
Nb	$-12.1312 \times [\text{Nb}] + 0.08178 \times [\text{Nb}]^2 - 0.000334771 \times [\text{Nb}]^3$	0~40
Ta	$-7.4877 \times [\text{Ta}] + 0.13494 \times [\text{Ta}]^2 - 0.00175 \times [\text{Ta}]^3$	0~30
V	$-13.53979 \times [\text{V}] + 0.08516 \times [\text{V}]^2 + 0.00126 \times [\text{V}]^3$	0~30
Cr	$-21.48489 \times [\text{Cr}] + 0.36581 \times [\text{Cr}]^2 - 0.00103 \times [\text{Cr}]^3$	0~13
Mn	$-21.97489 \times [\text{Mn}] + 0.1711 \times [\text{Mn}]^2$	0~15
W	$-6.68016 \times [\text{W}] + 0.05419 \times [\text{W}]^2 + 0.000207331 \times [\text{W}]^3$	0~25
Cu	$-3.84825 \times [\text{Cu}] - 0.08633 \times [\text{Cu}]^2 - 0.07605 \times [\text{Cu}]^3$	0~6
Nd	$14.39801 \times [\text{Nd}]$	0~1.2
Fe	$-17.01977 \times [\text{Fe}] + 0.00975 \times [\text{Fe}]^2$	0~16
Si	$-15.78794 \times [\text{Si}] - 19.2475 \times [\text{Si}]^2 + 9.52107 \times [\text{Si}]^3$	0~0.6
O	$134.88076 \times [\text{O}] + 21.00293 \times [\text{O}]^2 + 8.39629 \times [\text{O}]^3$	0~1
N	$374.18356 \times [\text{N}] + 32.57964 \times [\text{N}]^2$	0~1
H	$-348.02535 \times [\text{H}] - 114.61708 \times [\text{H}]^2$	0~0.25
C	$232.86868 \times [\text{C}] + 37.23438 \times [\text{C}]^2$	0~0.2

式中, X_i 是指元素 i 质量分数的 100 倍, 即 $[i]$; $F_i(X_i)$ 是指元素 i 对应的计算公式, 公式见表 3。

该公式经过了 40 组不同类型钛合金相变点的计算验证。除少数计算值与实验值相差较大之外, 大多数与实验值符合地很好, 一般差值不超过 5 °C, 且计算公式为非线性的, 具有较强的说服力。可以说是一种较为精准的钛合金相变温度的计算方法。

2.2 Calphad 方法计算结果

在经验公式(4)、(5)和(6)中各元素浓度适用范围(即: Al 的适用浓度范围为: 1.0%~6.0%; Fe 的适用浓度范围为: 1.0%~2.0%; Mn 的适用浓度范围为: 1.0%~2.0%)的交集内, 本次计算将 Al 的浓度分别定为 1.5%、2.25%、3.0%、3.75%、4.5%、5.25%和 6.0%, 将 Fe 的浓度定为 1.0%, Mn 的浓度定为 1.5%, 然后做实例计算, 计算结

果如图 1 和表 4 所示。需要强调的是, 计算仅考虑 Ti、Al、Fe 和 Mn 4 种合金元素对相变点的影响, 而公式(5)

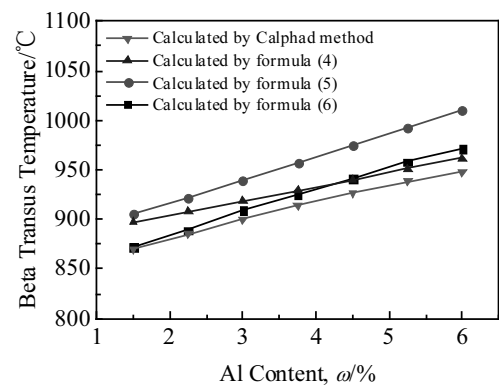


图 1 经验公式和 Calphad 方法计算的相变温度值

Fig.1 Calculated values by empirical formulas and Calphad method

表4 不同 Al 含量的合金 $\alpha+\beta/\beta$ 相转变温度
Table 4 $\alpha+\beta/\beta$ phase transformation temperature of alloys with different Al content (°C)

Al Content, $\omega/\%$	1.5	2.25	3.0	3.75	4.5	5.25	6.0
Calculated by Calphad method	870	885	900	914	926	938	948
Calculated by formula (4)	897	908	918	929	940	951	962
Calculated by formula (5)	905	922	940	957	975	993	1010
Calculated by formula (6)	872	889	909	925	941	958	971

在计算过程中考虑了 1400 $\mu\text{g/g}$ 的 O 含量对相变温度点的影响, 因此, 有必要对公式(5)的计算结果进行修正, 即在原数值基础上除去 46.2 °C 的 O 含量对相变温度点的贡献值。

根据图 1, 对比公式(4)、(5)、Calphad 和公式(6)计算出的合金相变温度, 发现 4 种计算方法计算出的 $\alpha+\beta/\beta$ 相转变温度均随着 Al 含量的增加而增加, 4 种计算方法虽然有一定的差别, 但是在该浓度范围内互相交叉, 计算值差别很小, 这说明 Calphad 方法计算出的数值具有很大可信度。此外, 在此成分区间内根据 Calphad 计算方法计算出的数值拟合得到了计算 Ti-Al-Fe-Mn 系 $\alpha+\beta/\beta$ 相变温度的公式:

$$T_{\alpha+\beta/\beta}=885\text{ }^{\circ}\text{C}+17.0[\text{Al}]-18.0[\text{Fe}]-13.0[\text{Mn}] \quad (7)$$

不同于经验公式只针对较小合金浓度范围内的计算, Calphad 方法计算钛合金的相变温度几乎没有浓度限制, 只需要该合金体系的数据库, 通过软件可计算出任意成分合金的 β 相转变温度和其它的相转变温度。另外, Calphad 方法还可以在一定浓度范围内拟合出较为准确的经验公式, 如公式(7), 通过拟合出的经验公式可以准确地计算出对应成分的相变温度。

3 结论

1) 通过 Calphad 方法优化了 Ti-Al-Fe-Mn 体系并建立了四元数据库, 利用该数据库计算了 4 个子三元系(即 Ti-Al-Fe 系, Ti-Al-Mn 系, Ti-Al-Mn 系和 Al-Fe-Mn 系)不同合金成分相变温度值。预报数据的平均相对误差值为 0.669%, 证明了外推出的 Ti-Al-Fe-Mn 系数据库的可靠性。

2) 利用 Ti-Al-Fe-Mn 系数据库计算得到了一系列成分合金的相变温度, 并与前人文献报道的 3 组相变温度计算公式计算出的数值进行了对比和讨论, 计算结果符合很好, 具有很大的可信度。并在此计算基础上外推出了一个更为准确的经验公式。

3) 得到了一种可行的计算钛及钛合金相变温度的方法, 即通过合金相图数据库, 采用 Calphad 方法计算合金的相变温度点, 这种方法能够为相关的热处理工艺提供理论上的指导。

参考文献 References

- [1] Tang Pufang (唐普放). *Titanium Industry Progress*(钛工业进展)[J], 1999(3): 34
- [2] Wang Qunjiao(王群骄). *Nonferrous Metal Heat Treatment Technology*(有色金属热处理技术)[M]. Beijing: Chemical Industry Press, 2008: 300
- [3] Tian Fei(田飞), Zeng Weidong(曾卫东), Ma Xiong(马雄) et al. *Transactions of Metal Heat Treatment*(材料热处理学报)[J], 2011, 32(5): 1
- [4] Wang Tengfei(王腾飞), Zeng Weidong(曾卫东), Peng Wenwen(彭雯雯) et al. *Material & Heat Treatment*(材料热处理技术)[J], 2011, 40(12): 57
- [5] Wang Zhihui(王志辉), Xia Changqing(夏长清), Li Xuexiong(李学雄) et al. *Rare Metals*(稀有金属)[J], 2010, 34(5): 663
- [6] He Wei(何伟), Du Xiaoping(杜小平), Ma Hongzheng(马红征) et al. *Physical Testing and Chemical Analysis (Part A: Physical Testing)* (理化检验-物理分册)[J], 2014, 50(7): 461
- [7] Sun Yu(孙宇), Zeng Weidong(曾卫东), Zhao Yongqing(赵永庆) et al. *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2010, 39(6): 1031
- [8] Xu Zhuyao(徐祖耀), Li Lin(李麟). *Thermodynamics of Materials, 3th Edition*(材料热力学 第3版)[M]. Beijing: Science Press, 2005: 106
- [9] Umino R, Liu X J, Sutou Y et al. *Journal of Phase Equilibria and Diffusion*[J], 2006, 27(1): 54
- [10] Palm M, Inden G, Thomas N. *Journal of Phase Equilibria and Diffusion*[J], 1995, 16(3): 209
- [11] Gorzel A, Palm M, Sauthoff G. *Zeitschrift fur Metallkunde*[J], 1999, 90(1): 64
- [12] Domagala R F, Rostoker W. *Transaction: American Society for Metals*[J], 1955, 47: 565
- [13] Kainuma R, Fujita Y, Mitsui H et al. *Intermetallics*[J], 2008, 8: 855
- [14] Dew H D, Kaufman L. *CALPHAD*[J], 1979, 3(3): 175
- [15] Bania P J. *Journal of the Minerals, Metals & Materials Society*, [J], 1994, 46(3): 16
- [16] 《Rare Metal Material Processing Manual》Drafting Group(《稀

- 有金属材料加工手册》编写组). *Rare Metal Materials Processing Manual*(稀有金属材料加工手册)[M]. Beijing: Metallurgical Industry Press, 1984: 48
- [17] Yolton C F, Froes F H, Malone R F. *Metallurgical Transactions A*[J], 1979, 10A: 132
- [18] Sun Shuying(孙书英), Deng Chao(邓超). *Titanium Industry Progress*(钛工业进展)[J], 2011, 28(3): 21

Calculation of Beta Transus Temperature of Titanium Alloys by Calphad Method

Wang Shusen¹, Lin Chongmao¹, Hu Renmin³, Wu Guangxin^{1,2}, Ali Wajid¹, Lu Xionggang^{1,2}, Li Chonghe^{1,2}

(1. State Key Laboratory of Advanced Special Steel, Shanghai Key Laboratory of Advanced Ferrometallurgy, School of Material Science and Engineering, Shanghai University, Shanghai 200072, China)

(2. Shanghai Special Casting Engineering Technology Research Center, Shanghai 201605, China)

(3. Baosteel Special Steel Co. Ltd, Shanghai 200940, China)

Abstract: The Ti-Al-Fe-Mn thermodynamic database was optimized by Calphad method. Based on this database the beta transus temperatures of four ternary systems in Ti-Al-Fe-Mn system were calculated and they were in good agreement with experimental values. In this way the reliability of Ti-Al-Fe-Mn quaternary systems was verified. Then $\alpha+\beta/\beta$ phase transformation temperatures of a series of titanium alloys were calculated by Calphad method and compared with values calculated by previous formulas. In addition, a more accurate formula was established based on the values calculated. The results may provide a feasible way for the determination of titanium beta transus temperature.

Key words: Calphad; Ti-Al-Fe-Mn; beta transus temperature

Corresponding author: Li Chonghe, Ph. D., Professor, School of Material Science and Engineering, Shanghai University, Shanghai 200072, P. R. China, Tel: 0086-21-56332934, E-mail: chli@staff.shu.edu.cn