

V元素对 β 型钛合金力学性能与电子结构的影响

于俊博¹, 张永刚¹, 戴毅¹, 侯智敏¹, 闫丙尧², 江树勇³

(1. 西部钛业有限责任公司, 陕西 西安 710201)

(2. 太原理工大学 先进金属复合材料成形技术与装备教育部工程研究中心, 山西 太原 030024)

(3. 太原理工大学 材料科学与工程学院, 山西 太原 030024)

摘要: 以 β -Ti为研究对象, 采用基于密度泛函理论的第一性原理计算的方法, 用V原子取代Ti原子构建不同V含量的Ti-V系模型, 对其力学性能及电子结构进行计算。计算结果表明: V原子的添加会降低 β -Ti的弹性常数和弹性模量, 并提升体系的塑性, 这是由于在形成Ti-V体系时, 两种原子均失去电子, 体系的电子活跃程度增加, 类金属键的键性增强, 塑性得到提升。此外Ti和V原子的3d轨道主要参与成键, 这是导致塑性提升的关键原因。同时还有部分电子聚集在两种原子周围, 且具备一定的方向性, 说明体系内部也有共价键存在, 共价键的存在是提升体系机械稳定性的关键所在。

关键词: β 型钛合金; 第一性原理计算; 弹性常数; 电子结构

中图分类号: TG146.23

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2026)07-1709-07

1 引言

钛合金由于比强度高、密度低、耐腐蚀性好等特点已广泛应用于航空航天、舰船、兵器、医疗器械等领域^[1-3]。纯钛存在 α 相、 β 相两种同素异构转变体, 相变点约为882 °C。低温下为密排六方(hexagonal close-packed, hcp)结构的 α 相, 空间群为 $P63/mmc$; 相变点以上为体心立方(body-centered cubic, bcc)结构的 β 相, 空间群为 $Im\bar{3}m$ ^[4-5]。根据微观组织可将钛合金分为3类: α 型、 $\alpha+\beta$ 型、 β 型。其中, β 型钛合金是指在合金中加入 β 相稳定元素, 能够降低相变点, 将 β 相保留至室温的一类合金。常见的 β 相稳定元素有V、Nb、Mo、Fe、Cr、Ni、Mn、Cu、Ta、W等^[6-9]。 β 型钛合金具有强塑性好、耐腐蚀性高、抗高温氧化性能好等优点。目前已被广泛应用在航空航天、舰船、生物医疗等领域^[10-11]。随着 β 型钛合金在这些领域中的应用, 开发新型的 β 型钛合金已经成为目前较为热门的研究方向^[12-13]。

V元素是钛合金中最常见的一种合金化元素, 目前有关V元素对钛合金组织性能影响的研究多集中在实验阶段, 但有关更深层尺度的研究则相对较少。随着计算机计算能力的不断提升, 通过第一性原理计算可以从电子尺度来揭示合金元素添加对钛合金强韧性的具体影响。第一性原理计算可以通过建立理想状态下的相结构模型, 并根据原子种类对体系的弹性常数和电子结构进行定量计算, 可以从理论上解释合金元素的添加对钛合

金体系的影响的具体作用^[7,14-18]。

Ohno等人^[19]通过第一性原理计算了V原子掺杂对钛合金相变行为的影响, 通过计算发现V元素的添加会稳定 β 相, 但是在低温下仍会有 α 相出现, 并且V元素可能会导致亚稳相的出现。Mei等人^[20]计算了V原子掺杂对 β 相和 ω 相之间转化的影响, 并预测了 β 相向 ω 相转变在100~500 K温度范围内会存在能量势垒。Skripnyak等人^[21-22]基于EMTO-CPA法和从头计算分子动力学(ab initio molecular dynamics, AIMD)计算了V元素的添加对 β 相的影响, 计算结果表明V元素的添加会使 β 相的力学性能得到稳定。

上述研究大多是关于V原子对 β 相体系能量、相转变、相稳定性的影响, 而有关电子结构方面的计算则相对较少。因此本工作以 β 相为研究对象, 采用基于密度泛函理论(density functional theory, DFT)的第一性原理计算的方法直接计算不同V元素含量的 β 相的弹性常数和弹性模量, 并通过体系电子结构的计算从电子尺度来揭示V元素对 β 相力学性能的具体影响。

2 计算方法与计算模型

第一性原理计算采用基于DFT的平面波赝势方法的量子力学软件包(vienna ab-initio simulation package, VASP)进行计算^[23-26]。VASP是目前最常用的第一性原理计算软件包, 采用周期性边界条件和赝势平面波基组, 通过对Kohn-Sham方程进行求解来得到体系的基本物

收稿日期: 2025-07-14

基金项目: 秦创原引用高层次创新创业人才项目(2025RC-YJRC-021)

作者简介: 于俊博, 男, 1994年生, 博士, 工程师, 西部钛业有限责任公司, 陕西 西安 710201, E-mail: yujunbo_24@163.com

理性能^[23-26]。计算过程采用投影缀加平面波(projector-augmented wave, PAW)法产生的赝势来描述原子芯态与价态的相互作用关系^[27],采用广义梯度近似(generalized gradient approximation, GGA)中的 Perdew-Burke-Ernzerhof(PBE)泛函来处理电子间的交换关联作用^[28]。

本研究计算的模型以 β -Ti为基础, β -Ti的晶格参数为0.332 nm,构建了一个含有54个Ti原子的 $3\times 3\times 3$ 的超胞模型,分别使用1~10个V原子来取代Ti原子,构建不同V原子含量的Ti-V系模型。计算时,截断能设置为350 eV,第一布里渊区的K点采用Monkhorst-Pack方法按照 $3\times 3\times 3$ 的方式进行划分^[29],电子步迭代能量收敛判据为能量变化低于 10^{-5} eV/atom,原子间的作用力收敛判据为0.01 eV/atom,分别对不同V含量模型的弹性常数和电子结构进行计算。

3 计算结果

弹性常数 C_{ij} 为材料对外加应变的刚度响应,共含有36个分量,考虑晶体的对称性,会存在 $C_{ij}=C_{ji}$ 的情况,通常情况下相等的弹性常数只按1个来计算,体系的弹性常数共有21个^[30]。选用应力-应变法来计算Ti-V系的弹性矩阵,根据立方结构的对称性,立方晶系的弹性矩阵共有3个弹性常数,分别为 C_{11} 、 C_{12} 以及 C_{44} 。其中 C_{11} 表示材料的抗压变形能力, C_{44} 表示材料的抗剪切变形能力。Ti-V系弹性常数大小如表1所示。

通过弹性常数可以判断出体系的稳定性,根据Born准则^[6],立方晶系的稳定性可通过公式(1)来判断。可以发现 β 相的弹性常数不满足Born准则的机械稳定性判据,说明 β -Ti模型在0 K温度下是不稳定的,这主要是由于 β -Ti为高温相,在0 K温度下不能稳定存在,因此结构会失去机械稳定性。而对于添加了V原子的模型来说,仅添加1个V原子后,模型就满足机械稳定性判据,说明V原子的添加能够提升 β -Ti在低温下的稳定性,使其在

低温下可以稳定存在,并且随着V原子含量的增加, β -Ti在低温下的稳定性就越好。

$$C_{11} > 0; C_{44} > 0; C_{11} > |C_{12}|; C_{11} + 2C_{12} > 0 \quad (1)$$

同时从表1中还可以发现Ti-V系的各弹性常数会随着V原子数量的增加表现出逐渐下降的趋势,说明体系的抗压变形能力和抗剪切变形能力在逐渐降低,强度会有所下降,塑性会有所提升,并且所有Ti-V系的 C_{11} 均大于 C_{44} ,说明体系更容易发生剪切变形,较难发生压缩变形。

材料的体积模量 B 、剪切模量 G 、杨氏模量 E 、泊松比 ν 等力学参数可以解释材料的宏观力学性质,通过弹性常数可以近似地求得材料的以上这些参数。Voigt理论和Reuss理论均可通过弹性常数来求得弹性模量。Voigt理论假定材料中任意晶粒中的应变都等于宏观应变,通过Voigt理论可求得材料弹性模量的上限;Reuss理论假定材料中任意晶粒中的应力都等于宏观应力,通过Reuss理论可求得材料弹性模量的下限。而Hill则认为两者都有一定的局限性,取两者的平均值则更符合实际情况,即Voigt-Reuss-Hill近似法^[31]。Voigt理论与Reuss理论计算立方结构的体积模量与剪切模量分别为 B_V 、 G_V 、 B_R 和 G_R ,计算公式如下所示。

$$B_V = B_R = \frac{C_{11} + 2C_{12}}{3} \quad (2)$$

$$G_V = \frac{C_{11} - C_{12} + 3C_{44}}{5} \quad (3)$$

$$G_R = \frac{5(C_{11} - C_{12})}{4C_{44} + 3(C_{11} - C_{12})} \quad (4)$$

根据Voigt-Reuss-Hill近似法^[31],最终的体积模量 B 、剪切模量 G 、杨氏模量 E 和泊松比 ν 分别为:

$$B = \frac{B_V + B_R}{2} \quad (5)$$

$$G = \frac{G_V + G_R}{2} \quad (6)$$

$$E = \frac{9BG}{3B + G} \quad (7)$$

$$\nu = \frac{3B - 2G}{6B + 2G} \quad (8)$$

将表1中的弹性常数分别代入上述公式中,即可得到Ti-V系的各个弹性模量,计算结果在表2中列出。体积模量 B 表示材料在外界压力下的抗变形能力,同时也表示材料化学键强度的平均值, B 的值越大,说明材料内部化学键的强度就越强,材料的强度就越高,且越不容易被压缩^[32-33]。剪切模量 G 则表示在受剪切力时,材料抵抗剪切变形的能力,也表示材料受外力作用时抵抗化学键改变的能力, G 越大,就越难发生剪切变形^[32-33]。从表2中能够看出 B 、 G 和 E 的大小均随着V原子含量的增加而逐渐下降,表明体系更容易发生压缩变形和剪切变形,化学键的强度会有所降低,并且化学键的类型会发生一定程度的改变,这一结论与弹性常数结论相对应,而 E 大

表1 Ti-V系弹性常数

Table 1 Elastic constants of Ti-V system (MPa)

Alloy	C_{11}	C_{12}	C_{44}
β -Ti	96.858	120.013	36.161
Ti ₅₃ V ₁	123.651	109.070	48.224
Ti ₅₂ V ₂	114.274	96.442	46.903
Ti ₅₁ V ₃	117.230	104.115	45.933
Ti ₅₀ V ₄	119.576	104.756	43.096
Ti ₄₉ V ₅	115.945	103.036	40.668
Ti ₄₈ V ₆	107.957	95.611	40.206
Ti ₄₇ V ₇	102.472	97.764	36.795
Ti ₄₆ V ₈	88.962	74.124	33.922
Ti ₄₅ V ₉	103.020	94.840	31.487
Ti ₄₄ V ₁₀	91.550	79.232	32.090

表2 Ti-V系弹性模量

Table 2 Elastic moduli of Ti-V system

Alloy	B/GPa	G/GPa	E/GPa	B/G	ν
Ti ₅₃ V ₁	113.930	23.354	65.581	4.88	0.404
Ti ₅₂ V ₂	102.038	22.755	63.542	4.48	0.396
Ti ₅₁ V ₃	108.378	21.914	61.590	4.95	0.405
Ti ₅₀ V ₄	109.198	21.469	60.446	5.09	0.408
Ti ₄₉ V ₅	105.304	20.017	56.472	5.26	0.411
Ti ₄₈ V ₆	97.085	18.720	52.768	5.19	0.409
Ti ₄₇ V ₇	99.965	17.282	49.020	5.78	0.418
Ti ₄₆ V ₈	75.950	15.524	43.602	4.89	0.404
Ti ₄₅ V ₉	93.349	13.057	37.427	7.15	0.433
Ti ₄₄ V ₁₀	83.015	16.568	46.604	5.01	0.406

小的降低则表明体系的刚度会随着V含量的增加逐渐下降。

表2中右侧两列B/G和ν可以用来表示体系韧脆性的好坏^[34],其中当B/G>1.75时,材料表现为延展性,反之则表现出脆性,并且B/G的值越大,体系的延展性就越好;而ν也可以用来描述体系的延展性,当ν>0.26时,材料表现为韧性相,反之则表现为脆性相,ν越大体系塑性越好。从表2中能够发现Ti-V系的B/G和ν的大小均超过临界值,表明Ti-V系均为韧性相,并且B/G和ν的大小会随着V原子含量的增加小幅度提升,这就表明V原子的加入会提升β相的塑韧性,并且V原子数量越多,塑韧性提升的效果就越明显。

材料的力学性能也与材料的各向异性息息相关,由于各向异性的存在,可能会引起微裂纹的产生,会对可靠性产生重大影响,各向异性指数A^U可以通过公式(9)计算得到^[35]。

$$A^U = 5 \frac{G_V}{G_R} + \frac{B_V}{B_R} - 6 \quad (9)$$

若A^U为0,则表示材料为各向同性,不等于0则为各向异性,并且偏离0越多,各向异性程度就越大。Ti₅₃V₁、Ti₄₉V₅和Ti₄₄V₁₀各弹性模量的三维各向异性图如图1~图3所示,图中红色部分表示模量大,反之蓝色表示模量小。若体系的三维图呈球形,则说明为各向同性;若体系的三维图为非球形,则体系呈各向异性。从图中可以看出,Ti-V系体积模量B三维图呈球形,表明体积模量B具备各向同性,V原子数量的增加不会改变体积模量B的各向同性。而剪切模量G、杨氏模量E和泊松比ν的三维图均为非球形,表明为各向异性。剪切模量G在<100>方向(对角线方向)具备最大值,表明此方向最难发生剪切变形,杨氏模量E在<111>方向最大,表明此方向的刚度值最大,而对于泊松比ν来说,<111>方向具备最大值,表明沿着这几个方向的体系会更易发生变形。通过比较图1~图3可以发现,随着V

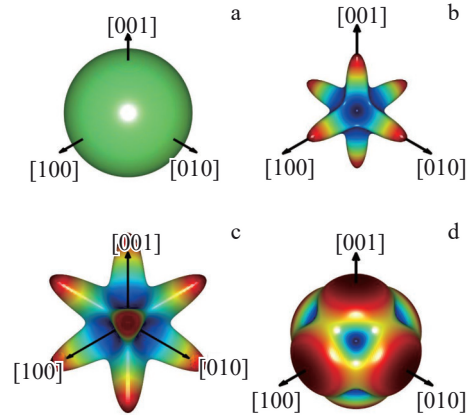


图1 Ti₅₃V₁三维弹性模量图

Fig.1 Three-dimensional elastic modulus diagrams of Ti₅₃V₁: (a) bulk modulus; (b) shear modulus; (c) Young's modulus; (d) Poisson's ratio

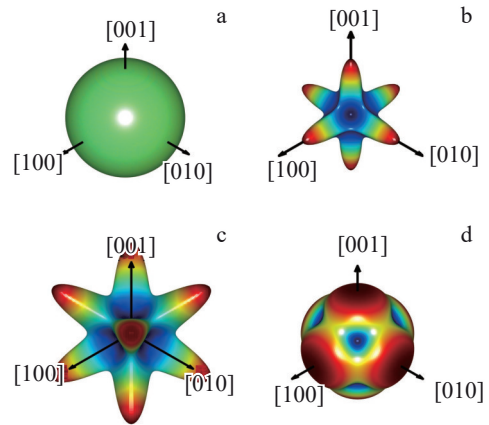


图2 Ti₄₉V₅三维弹性模量图

Fig.2 Three-dimensional elastic modulus diagrams of Ti₄₉V₅: (a) bulk modulus; (b) shear modulus; (c) Young's modulus; (d) Poisson's ratio

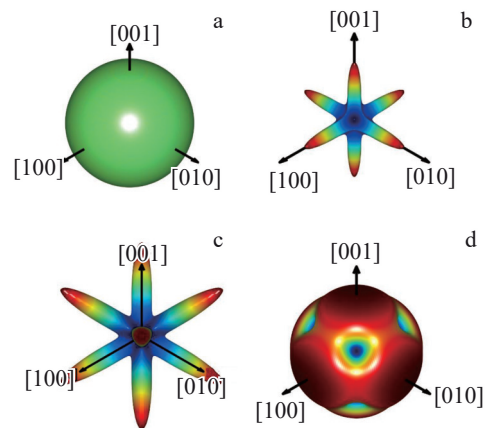


图3 Ti₄₄V₁₀三维弹性模量图

Fig.3 Three-dimensional elastic modulus diagrams of Ti₄₄V₁₀: (a) bulk modulus; (b) shear modulus; (c) Young's modulus; (d) Poisson's ratio

原子数量的增加,几种物理量偏离球形的程度更加明显,这就表明V原子的增加会提升几种模量的各向异性,但方向特性不会改变。

4 讨论

4.1 能带结构

体系的物理性能是由电子结构来决定的,通过研究电子之间的相互作用可以判断出成键情况,从而来解释体系所具备力学性能特点的原因。原子核外的不同能级的电子会具有不同的能量范围,具有分立的原子轨道。原子组成分子时,原子轨道构成了具有分立能级的分子轨道。而体系是由大量分子组成的,所以可以将分子轨道的能级看成是连续的,这就构成了能带^[32-33]。图4~图6为不同V原子含量的Ti-V系能带结构示意图。能带结构图中的零刻度线为费米能级,费米能级以上为导带部分,费米能级以下为价带部分。能够发现Ti-V系的导带与价带均有重叠的部分,当价带的电子受外界能量激发时,会跃迁到导带部分中,此时体系具有导体性质,这就说明Ti-V系均为良导体^[36]。通过比较发现V原子的加入会使能带结构更加混乱,并且会提升能带的宽度,能带的起伏程度增加,有效电子质量降低,电子局域程度下

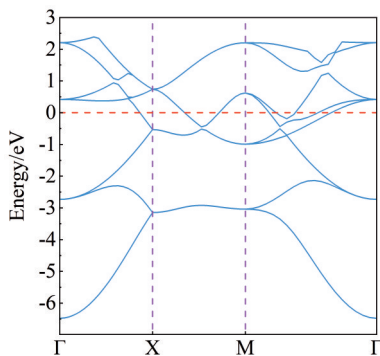


图4 β -Ti能带结构示意图

Fig.4 Structure schematic of β -Ti band

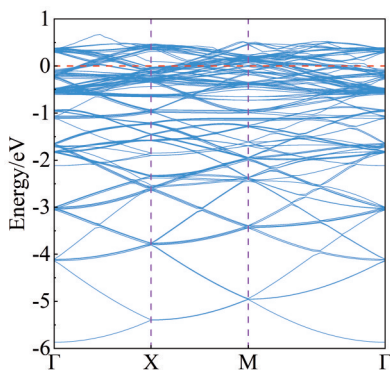


图5 $Ti_{49}V_5$ 系能带结构示意图

Fig.5 Structure schematic of $Ti_{49}V_5$ band

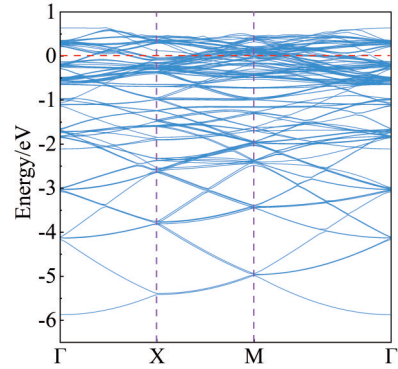


图6 $Ti_{44}V_{10}$ 系能带结构示意图

Fig.6 Structure schematic of $Ti_{44}V_{10}$ band

降,原子轨道更易扩展,电子可动性增强,体系内部金属键键性会提升,这是导致体系塑性提升的原因所在^[36]。

4.2 态密度

态密度(density of states, DOS)为体系能带的投影,用来描述体系单位能量范围内($E \sim E + \Delta E$)的电子数目,能够给出局域能带范围内原子分波轨道间的相互作用以及电子态能级移动和能级弥散信息,可以用来分析轨道杂化和原子分波态对材料宏观性质的贡献^[36]。图7~图9为Ti-V系的总态密度(total density of states, TDOS)和分波态密度(partial density of states, PDOS)的示意图。图中零刻度线处为费米能级,费米能级左侧为价带,右侧为导带,Ti-V系的费米能级处态密度不为零,也能表明Ti-V系的为导体^[32-33,36]。并且在费米能级左右两侧均存在尖峰,表明有能隙存在,说明V原子的添加会在一定程度上导致体系内部出现共价键^[37]。根据PDOS图可以发现 β 相中主要是Ti原子的3d轨道电子参与成键,s和p轨道对成键贡献相对较小。而对于添加V原子的体系来说,主要是Ti原子的3d轨道电子和V原子的3d轨道电子共同参与成键,两种原子的s和p轨道对成键贡献均较小,并且添加的V原子数量越多,参与成键的V原子的3d轨道电子数量就越多。因此,结合弹性常数和弹性模量的计算结果,可以发现添加V

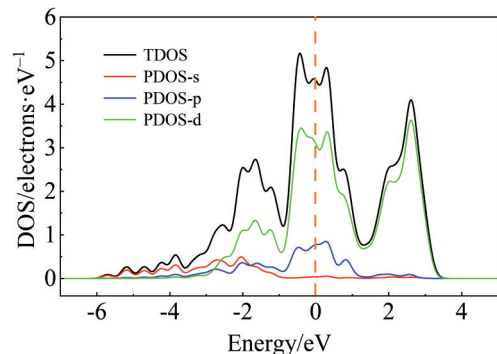


图7 β -Ti总态密度与分波态密度图

Fig.7 TDOS and PDOS of β -Ti

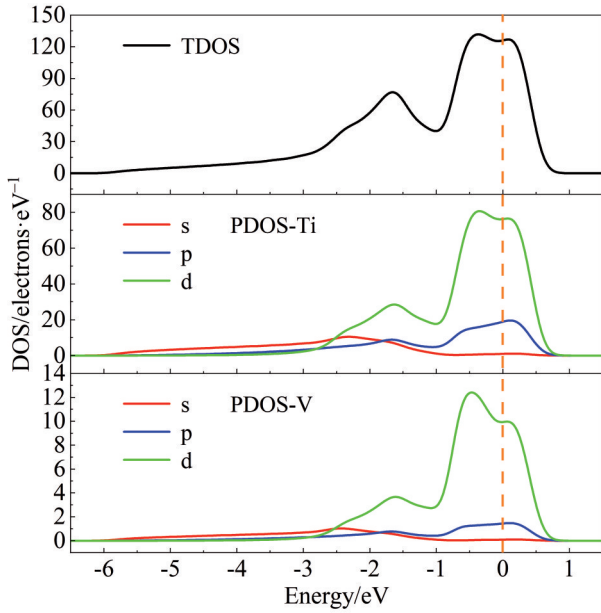


图8 $Ti_{49}V_5$ 总态密度与分波态密度图
Fig.8 TDOS and PDOS of $Ti_{49}V_5$

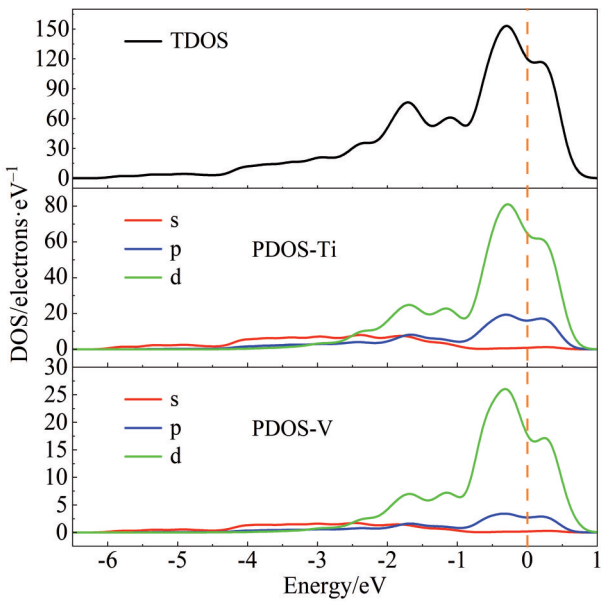


图9 $Ti_{44}V_{10}$ 总态密度与分波态密度图
Fig.9 TDOS and PDOS of $Ti_{44}V_{10}$

原子后,其3d轨道电子参与成键是提升体系机械稳定性和塑韧性的关键原因所在,并且V原子参与成键的3d轨道电子数量越多,体系的塑韧性提升效果就越明显,体系越稳定^[38-39]。

4.3 差分电荷密度

差分电荷密度可以判断在体系形成时,各原子周围电荷密度的转移情况,从而来判断各个原子之间的成键情况,可作为分析塑性好坏的依据之一。图10和图11为 $Ti_{53}V_1$ 的差分电荷密度三维及二维示意图,图中三维图的等值面为 7.5 e/nm^3 ,二维图中电荷密度最高为 9 e/nm^3 ,

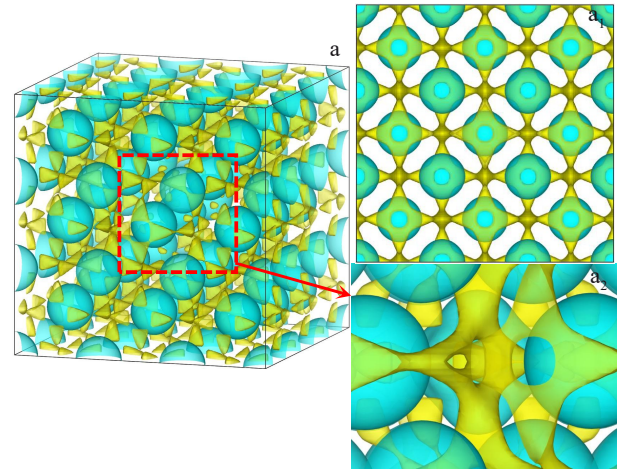


图10 $Ti_{53}V_1$ 差分电荷密度三维图、主视图和放大图
Fig.10 Three-dimensional diagram (a) of charge density difference of $Ti_{53}V_1$ as well as corresponding front view (a₁) and enlarged diagram (a₂)

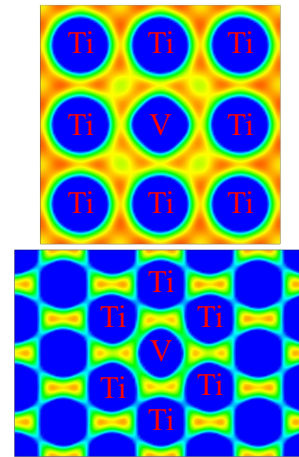


图11 不同方向观察的 $Ti_{53}V_1$ 差分电荷密度二维图
Fig.11 Two-dimensional diagrams of charge density difference of $Ti_{53}V_1$ observed from different directions

最低为 1 e/nm^3 。黄色部分表示电荷的聚集,蓝色部分表示电荷的流失。从图10中可以看出,当形成 $Ti_{53}V_1$ 时,Ti与V原子周围都是蓝色,表明在形成Ti-V体系时,两种原子均失去电子,电子分布在两种原子周围,从右下放大图中可以看出V原子周围的电荷具有一定方向性。并且从图11的二维图中可以发现电子均聚集在Ti与V原子的周围,这些电子大多是由两种原子的3d轨道电子所组成的,并且在Ti-Ti和Ti-V原子之间电子分布的方式会具备一定的方向性,电子分布具备方向性表明有共价键的存在,共价键的出现是体系稳定性得到提升的原因之一^[40-41]。

图12为 $Ti_{44}V_{10}$ 的差分电荷密度三维及二维示意图,可以发现随着V原子数量的提升,Ti与部分V原子仍旧

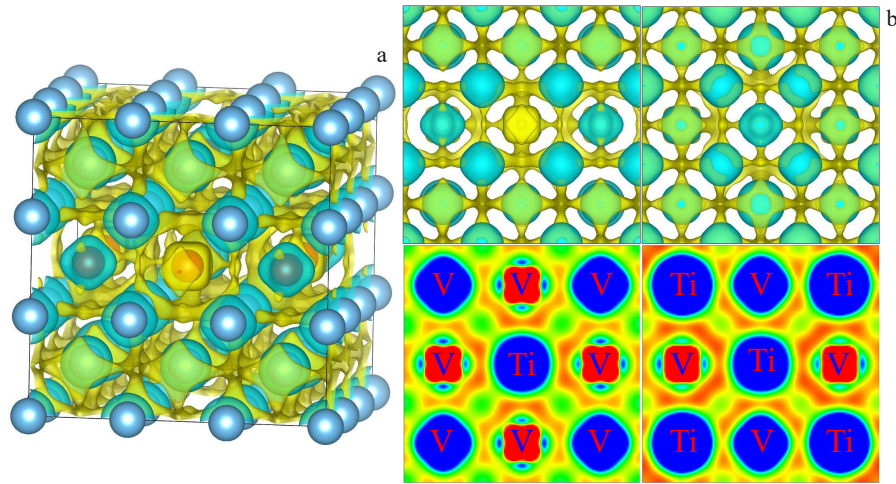


图 12 $Ti_{44}V_{10}$ 差分电荷密度的三维图和二维图

Fig.12 Three-dimensional diagram (a) and two-dimensional diagrams observed from different directions (b) of charge density difference of $Ti_{44}V_{10}$

表现为失去电子,但是已经有部分 V 原子开始得到电子,部分电子会聚集在 V 原子周围,如左图中红色原子所示,并且仍有部分电子游离在体系中。从二维图中能够发现围绕在 V 原子周围的电子的方向性增强,共价键键性提升,体系的稳定性会继续增强^[41-42]。

5 结论

1) V 原子的添加会使得 β -Ti 体系变得稳定, Ti-V 系的弹性常数和弹性模量的大小会随着 V 原子数量的增加而逐渐降低,表现为抗压和抗剪切变形能力的下降。同时 B/G 和 ν 也会随着 V 原子含量的增加而小幅提升,说明体系的塑韧性会得到提升, V 原子的添加会提升体系的塑韧性。

2) 电子结构分析表明 V 原子的添加会降低电子局域程度,提升电子的可动性,体系的金属键键性增强,塑性因此得到提升。DOS 分析表明 V 原子的 3d 轨道电子与 Ti 原子的 3d 轨道电子主要参与成键,这是提升塑性的关键所在,并且参与成键的 V 原子的 3d 轨道电子数量越多,塑性提升的效果越明显。差分电荷密度结果表明两种原子均失去电子,电子在两种原子周围聚集,表现出一定的方向性,表明有共价键的存在,共价键的出现也是体系机械稳定性得到提升的关键所在。

参考文献 References

- [1] Niu J Z, Wei M, Hao M Y *et al. Materials Science and Engineering A*[J], 2025, 922: 147611
- [2] Zhang C L, Bao X Y, Hao M Y *et al. Nature Communications*[J], 2022, 13: 5966
- [3] Cai T L, Wang G, Qiu Z G *et al. Journal of Alloys and Compounds*[J], 2025, 1010: 177318
- [4] Liu Xianghong(刘向宏), Zhao Ning(赵宁), Wang Tao(王涛) *et al. Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J],

2024, 53(11): 3101

- [5] Chen Song(陈松), Huang Sensen(黄森森), Ma Yingjie(马英杰) *et al. Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2024, 53(2): 435
- [6] Sun S H, Xu Z D, Wu B L *et al. Materials Science and Engineering A*[J], 2025, 922: 147627
- [7] Lv M Y, Min X H, Liu F J. *Acta Materialia*[J], 2025, 284: 120594
- [8] Yan L Y, Zhang H Y, Zhang S *et al. Journal of Alloys and Compounds*[J], 2025, 1010: 177258
- [9] Liu X H, Ren X L, An X L *et al. Journal of Materials Research and Technology*[J], 2024, 32: 3258
- [10] Yao Qiang(姚强), Xing Hui(邢辉), Guo Wenyuan(郭文渊) *et al. Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2009, 38(4): 663
- [11] Zhang Haijun(张海军), Qiu Shi(邱实), Sun Zhimei(孙志梅) *et al. Acta Metallurgica Sinica*(金属学报)[J], 2020, 56(9): 1304
- [12] Wang Qingjuan(王庆娟), Gao Xin(高欣), Wang Kuaishe(王快社) *et al. Hot Working Technology*(热加工工艺)[J], 2013, 42(12): 14
- [13] Zhao Yufei(赵宇飞), Fu Yuechun(符跃春), Hu Qingmiao(胡青苗) *et al. Acta Metallurgica Sinica*(金属学报)[J], 2009, 45(9): 1042
- [14] Premkumar M, Ashish P, Mukhopadhyay A *et al. Journal of Applied Research and Technology*[J], 2017, 15: 21
- [15] Zhou W C, Sahara R J, Tsuchiya K. *Journal of Alloys and Compounds*[J], 2017, 727: 579
- [16] Marker C, Shang S L, Zhao J C *et al. Computational Materials Science*[J], 2018, 142: 215
- [17] Ishii A. *Materials Today Communications*[J], 2024, 38: 107708
- [18] Jia Y D, Su H H, Cao S *et al. Acta Materialia*[J], 2024, 279: 120302
- [19] Ohno K, Kuwahara R, Pham T R *et al. Scientific Reports*[J], 2022, 12: 10070
- [20] Mei W, Sun J, Wen Y F. *Progress in Natural Science: Materials*

- International*[J], 2017, 27: 703
- [21] Skripnyak N V, Ponomareva A V, Belov M P *et al. Materials & Design*[J], 2018, 140: 357
- [22] Skripnyak N V, Ponomareva A V, Belov M P *et al. Acta Materialia*[J], 2020, 188: 145
- [23] Kresse G, Hafner J. *Physical Review B*[J], 1993, 47: 558
- [24] Kresse G, Hafner J. *Physical Review B*[J], 1994, 49: 14251
- [25] Kresse G, Furthmüller J. *Physical Review B*[J], 1996, 54: 11169
- [26] Kresse G, Furthmüller J. *Computational Materials Science*[J], 1996, 6(1): 15
- [27] Blöchl P E. *Physical Review B*[J], 1994, 50: 17953
- [28] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M. *Physical Review Letters*[J], 1996, 77(18): 3865
- [29] Monkhorst H J, Pack J D. *Physical Review B*[J], 1976, 13: 5188
- [30] Zhang Y W, Li S J, Obbard E G *et al. Acta Materialia*[J], 2011, 59(8): 3081
- [31] Hill R. *Proceedings of the Royal Society*[J], 1952, 65(5): 349
- [32] Yu J B, Feng H, Jiang S Y *et al. Materials Characterization*[J], 2023, 204: 113223
- [33] Yu J B, Jiang S Y, Sun D *et al. Journal of Materials Research and Technology*[J], 2022, 18: 3410
- [34] Pugh S F. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*[J], 1954, 45(367): 823
- [35] Ranganathan S I, Ostoja-Starzewski M. *Physical Review Letters*[J], 2008, 101(5): 055504
- [36] Wan Y J, Zeng Y, Qian X Y *et al. Physica B: Condensed Matter*[J], 2020, 591: 412241
- [37] Hu Y L, Bai L H, Tong Y G *et al. Journal of Alloys and Compounds*[J], 2020, 827: 153963
- [38] Sahara R, Emura S, Li S *et al. Science and Technology of Advanced Materials*[J], 2014, 15(3): 035014
- [39] Zhou W C, Sahara R, Tsuchiya K. *Journal of Alloys and Compounds*[J], 2017, 727: 579
- [40] Zhang X K, Yan J, Chen Y H *et al. International Journal of Plasticity*[J], 2023, 166: 103643
- [41] Liu Y Y, Yao Z P, Zhang P *et al. Materials & Design*[J], 2023, 225: 111565
- [42] Kwasniak P, Garbacz H, Kurzydowski K J. *Acta Materialia*[J], 2016, 102: 304

Effect of V on Mechanical Properties and Electronic Structure of β -Type Titanium Alloys

Yu Junbo¹, Zhang Yonggang¹, Dai Yi¹, Hou Zhimin¹, Yan Bingyao², Jiang Shuyong³

(1. Western Titanium Technologies Co., Ltd, Xi'an 710201, China)

(2. Engineering Research Center of Advanced Metal Composites Forming Technology and Equipment, Ministry of Education, Taiyuan University of Technology, Taiyuan 030024, China)

(3. College of Materials Science and Engineering, Taiyuan University of Technology, Taiyuan 030024, China)

Abstract: Taking β -Ti as the research object, the first-principles calculations based on density functional theory were performed to construct a model of Ti-V system with different V contents by substituting Ti atoms with V atoms and to calculate the mechanical properties and electronic structures. The calculation results indicate that the addition of V atoms decreases the elastic constant and elastic modulus of β -Ti and improves the plasticity and toughness of the system. This is because during the formation of the Ti-V system, both atoms lose electrons. Therefore, the electronic mobility of the system increases, the bonding strength of the metallic bond is enhanced, and the plasticity and toughness of the system are improved. In addition, the 3d-orbitals of Ti and V atoms are mainly involved in bonding, which is the key reason for the improvement of plasticity and toughness. Meanwhile, there are also some electrons with directivity gathered around the two atoms, which indicates that there is also a covalent bond within the system. The existence of covalent bond is the key to enhancing the mechanical stability of the system.

Key words: β -type titanium alloys; first-principles calculation; elastic constant; electronic structure

Corresponding author: Yu Junbo, Ph. D., Engineer, Western Titanium Technologies Co., Ltd, Xi'an 710201, P. R. China, E-mail: yujunbo_24@163.com