Ti-Al-Zr-Ta-Nb 多组元高温钛合金固溶过程元素偏聚行为的 MC/MD 模拟研究

王 龙[1]，郅喜望[1, 2]，叶 栋[2]，李 文[1]，殷亚军[1]，南 海[2]，周建新[1]

（1. 华中科技大学材料成形与模具技术全国重点实验室，湖北武汉 430074；
2. 北京航空材料研究院股份有限公司，北京 100094）

摘要：为揭示多组元高温钛合金固溶过程中原子尺度元素交互与偏聚机制，采用混合MC/MD模拟方法，研究Ti-5.9Al-3.5Zr-2.0Ta-0.3Nb（at.%）合金在700~1 200 ℃固溶过程的元素偏聚行为。通过原子配位数、化学短程有序参数及团簇空间分布分析表明，Al、Zr、Ta和Nb溶质原子间普遍存在吸引作用，其中Al-Ta、Ta-Nb对表现出强烈键合倾向；Al与Ta原子配位数显著升高且具有强温度依赖性，Ta原子配位数在1 200 ℃达7.76，证实二者为多元团簇形成核心，Zr与Nb原子配位数增长平缓且温度响应弱，参与团簇程度有限。溶质偏聚具有显著温度依赖性，700~900 ℃偏聚主要发生于晶界，1 000~1 200 ℃转向相变诱导无序界面区富集。本研究从原子尺度阐明温度-相变-元素交互内在关联，为多元高温钛合金成分设计与热处理优化提供理论依据。

关键词：高温钛合金；分子动力学模拟；蒙特卡洛模拟；化学短程有序；元素偏聚；固溶处理；多组元合金

中图分类号：TG146.2+3；TG111.5 **文献标识码：**A **文章编号：**1001-4977（2026）09-0979-09

DOI：10.27014/j.cnki.zhuzao.2026.0124

MC/MD Simulation Study on Element Segregation Behavior During Solution Treatment of Ti-Al-Zr-Ta-Nb Multicomponent High-Temperature Titanium Alloy

WANG Long[1], QIE Xi-wang[1, 2], YE Dong[2], LI Wen[1], YIN Ya-jun[1], NAN Hai[2], ZHOU Jian-xin[1]

(1. State Key Laboratory of Materials Processing and Die & Mould Technology, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan 430074, Hubei, China; 2. Beijing Institute of Aeronautical Materials Co., Ltd., Beijing 100094, China)

Abstract: To reveal the atomic-scale elemental interaction and segregation mechanism of multicomponent high-temperature titanium alloy during solution treatment, a hybrid MC/MD simulation method was used to investigate the element segregation behavior of Ti-5.9Al-3.5Zr-2.0Ta-0.3Nb (at.%) alloy during solution treatment at 700-1 200 ℃. Analysis of atomic coordination numbers, chemical short-range order parameters and cluster spatial distribution shows that attractive interactions generally exist among the solute atoms of Al, Zr, Ta and Nb, among which the Al-Ta and Ta-Nb pairs exhibit strong bonding tendency. The coordination numbers of Al and Ta atoms increase significantly with strong temperature dependence, and the coordination number of Ta atoms reaches 7.76 at 1 200 ℃, confirming that they are the core of multicomponent cluster formation. The coordination numbers of Zr and Nb atoms grow gently with weak temperature response, indicating limited involvement in clustering. Solute segregation shows significant temperature dependence: segregation mainly occurs at grain boundaries at 700-900 ℃, and shifts to enrichment in disordered interface regions induced by phase transformation at 1 000-1 200 ℃. This work clarifies the intrinsic relationship among temperature, phase transformation and elemental interaction at the atomic scale, providing a theoretical basis for composition design and heat treatment optimization of multicomponent high-temperature titanium alloys.

Key words: high-temperature titanium alloy; molecular dynamics simulation; Monte Carlo simulation; chemical short-range order; element segregation; solution treatment; multicomponent alloy

基金项目：航材院创新基金（KJSJ261901）；国家自然科学基金项目（52435007，52201042）。

收稿日期：2026–03–18 收到初稿，2026–04–20 收到修订稿。

作者简介：王龙（2000–），男，博士生，研究方向为数值模拟、组织演变和钛合金。E-mail：d202480526@hust.edu.cn

通信作者：李文，男，助理研究员。E-mail：liwenhust@hust.edu.cn

引用格式：王龙，郅喜望，叶栋，等 . Ti-Al-Zr-Ta-Nb 多组元高温钛合金固溶过程元素偏聚行为的 MC/MD 模拟研究 [J]. 铸造，2026，75（9）：979–987.

Wang Long，Qie Xiwang，Ye Dong，et al. MC/MD simulation study on element segregation behavior during solution treatment of Ti-Al-Zr-Ta-Nb multicomponent high-temperature titanium alloy [J]. Foundry，2026，75（9）：979–987.

钛合金因其优异的比强度、良好的耐腐蚀性和高温性能，已成为航空、航天及先进能源装备等领域不可或缺的关键结构材料[1-2]。随着航空航天发动机推重比和热效率的不断提升，对钛合金工作温度上限的要求日益严苛，推动了高温钛合金的持续发展[3]。以Ti-Al-Sn-Zr-Mo-Si系为代表的近α型高温钛合金，通过多元合金化和精细的组织调控，其长期使用温度已提升至600 ℃以上[4]。为进一步突破性能瓶颈，新型多组元高温钛合金的研发成为重要方向，其中通过添加Nb、Ta等高熔点、高稳定性的β相稳定元素，以优化合金的显微组织、提升高温蠕变抗力及热稳定性，展现出巨大潜力[5-6]。

热处理是调控钛合金微观组织，从而优化其力学性能的核心工艺手段[7]。通过精确控制固溶温度、冷却速率及时效制度，可以有效地调控α/β相的比例、形貌、尺寸分布以及晶界特征，进而实现强度、塑性、蠕变和疲劳性能的最佳匹配[8]。在热处理过程中，合金元素的原位扩散、偏聚行为以及由此引发的团簇、有序相或析出相的形成与演化，是微观组织演变背后原子尺度的主导机制[9]。例如，Al元素的晶内偏聚可产生固溶强化，而β稳定元素（如Nb、Ta）在α/β相界面的富集则会影响相变动力学与相稳定性[10]。因此，深入厘清热处理过程中各类元素的扩散动力学及交互作用机制，是揭示组织-性能关联规律、实现热处理工艺理性化设计的关键。

在上述合金体系中，Ti65合金（Ti-Al-Sn-Zr-Mo-Si-Nb-Ta-W-C）作为我国自主研发的典型高温钛合金，通过优化Sn、Zr、Mo和Si等元素的配比，在650 ℃温度下展现出优异的蠕变抗力和热稳定性，已广泛应用于先进航空发动机高压压气机盘件和叶片等关键热端部件[11]。该合金的宏观力学性能强烈依赖于热处理过程中微观组织的演变，而微观组织的形成又与各合金元素的扩散、偏聚及交互作用密切相关[12]。因此，从原子尺度揭示Ti65合金中多元合金元素在热处理过程中的行为机制，对于进一步优化其热处理工艺、挖掘性能潜力具有重要意义。

随着计算材料学的飞速发展，分子动力学（MD）模拟已成为在原子尺度上研究材料动态行为、揭示微观物理机制的有力工具[13]。通过求解牛顿运动方程，MD模拟能够直观地展示原子在飞秒至纳秒时间尺度内的运动轨迹，定量计算扩散系数、相变能垒和界面能等关键参数[14]。对于钛合金的热处理模拟，关键在于构建可准确描述多组元体系原子间相互作用的势函数。近年来，嵌入原子法（EAM）及其改进形式（如MEAM）势函数凭借对金属体系优异的描述能力，被广泛应用于Ti-Al-X多组元体系的模拟研究中[15-16]。现有研究已在α/β相变[17]、位错运动[18]以及简单二元/三元扩散[19]等方向取得了丰硕的研究成果。

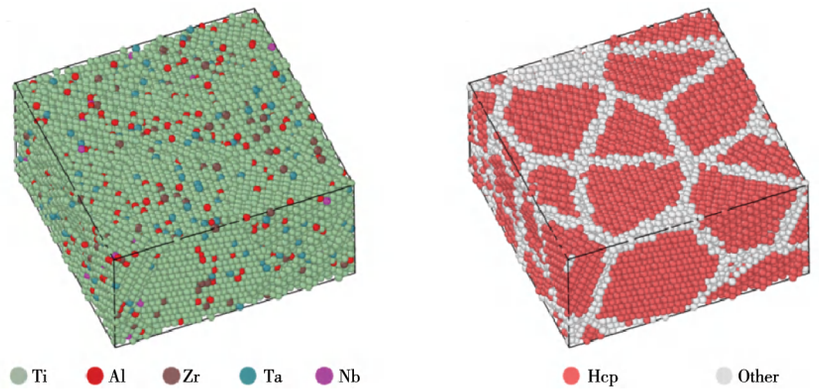
然而，针对Ti65合金这类复杂工业合金，目前尚缺乏能够同时准确描述所有组元间相互作用的原子间势函数，具体面临以下三个核心难点：首先，在多组元势函数方面，准确描述Ti、Al、Zr、Ta和Nb五种元素间复杂的键合特性极具挑战性，现有势函数多针对二元或三元体系，缺乏可靠外推至五元体系的通用势函数。其次，在计算效率方面，固溶处理涉及毫秒级及以上的元素扩散过程，而传统分子动力学（MD）模拟仅能覆盖纳秒时间尺度，难以有效还原真实的成分均匀化过程。最后，在机制解析方面，四种溶质元素存在复杂的竞争与协同效应，如何从海量原子轨迹数据中解耦各元素的作用机制，是揭示微观组织演变内在规律的关键所在。

为克服上述难点，本研究应用了Huang等[20]开发的MEAM势函数，该势函数已系统拟合Ti、Al、Zr、Ta、Nb等多种二元及三元体系参数，能够合理描述含难熔元素合金的力学与热力学行为；同时引入混合MC/MD方法，通过热力学驱动的随机原子交换加速体系向平衡态弛豫，有效解决了MD模拟时间尺度不足的问题[21-22]。基于上述方法，本研究综合运用配位数、短程有序参数及团簇可视化等手段，从原子轨迹中阐明多元素间的扩散竞争与协同机制。

本研究基于Ti65合金的成分范围[23-24]，设计了以钛为基体、包含Al、Zr、Ta和Nb的多组元模型体系。各元素比例（at.%：Al=5.9，Zr=3.5，Ta=2.0，Nb=0.3）的设定旨在反映实际合金中元素的相对含量，同时确保足够的原子统计代表性，以捕捉元素间相互作用的竞争与耦合效应。需要说明的是，Ti65合金实际成分中含Ta（约2.0wt.%）和Nb（0.3wt.%~0.5wt.%），二者同属VB族，均为强β相稳定元素，在钛合金中具有相似的扩散与偏聚行为；Al和Zr则是主要的α稳定元素。因此，该五元模型能够直接反映Ti65合金中核心元素在热处理过程中的相互作用与偏聚行为。基于上述模型，计算了总系统能量、原子配位数和化学短程有序（SRO）等参数，利用OVITO可视化工具[25]全面模拟并分析高温钛合金热处理过程中合金化元素的偏聚行为。

1 模拟方法

如图1所示，利用atomsk软件[26]建立了初始的计



（a）原子分布　　（b）晶粒与晶界分布

图1　分子动力学模拟计算初始体系模型

Fig. 1 Initial models for the molecular dynamics simulation calculations

算体系，图1（a）展示了模型内各类原子的分布，图1（b）展示了晶粒与晶界的分布。模型尺寸为10 nm×10 nm×5 nm，原子数量为29 062，利用Voronoi方法建立包含12个晶粒的多晶模型。为确保模型的合理性，晶粒的位置、尺寸和晶体取向均被随机化。分子模拟采用了LAMMPS（Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator）软件[27]，温度和压力通过Nose–Hoover法在等温等压（NPT）系综中调节，时间步长为1 fs。为减弱边界条件对模拟结果的影响，全程均采用周期性边界条件。本研究采用一种原子替代方法，按照设定原子百分比（at.%：Al=5.9，Zr=3.5，Ta=2.0，Nb=0.3），将Al、Zr、Ta和Nb元素原子替换Ti原子，随后开展能量最小化计算，以此形成结构稳定、组分均匀的固溶体初始模型。

为了尽可能模拟实际工程中铸件热处理固溶过程，参照Ti65高温钛合金的热处理温度参数，设计了从700~1 200 ℃（间隔100 ℃一组，共六组）的模拟试验。已建立的Ti-Al-Zr-Ta-Nb初始模型在等压条件下从室温加热至目标温度（700~1 200 ℃），加热速率为10 ℃/ps。保温过程中采用NPT系综与MC/MD混合方法，每1 000步MD模拟后进行一步MC模拟，随机交换一对原子；恒温时长保持10 ns，以确保体系达到平衡状态。每50 ps记录一次原子数据，包含各原子的速度、坐标及原子势能。将获取的数据导入至Ovito，完成簇状特征的可视化与分析，进一步探究不同温度条件下的原子扩散行为。弛豫结束后，模型从弛豫温度降温至300 K，降温速率为10 ℃/ps。整个体系的搭建与模拟流程如图2所示。

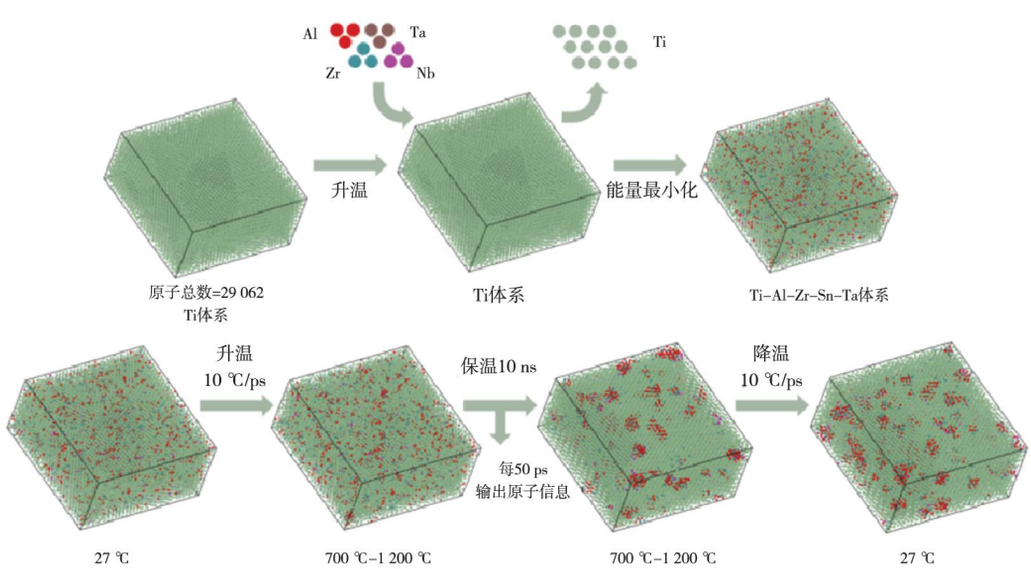


图2　Ti-Al-Zr-Ta-Nb体系建模与仿真示意图

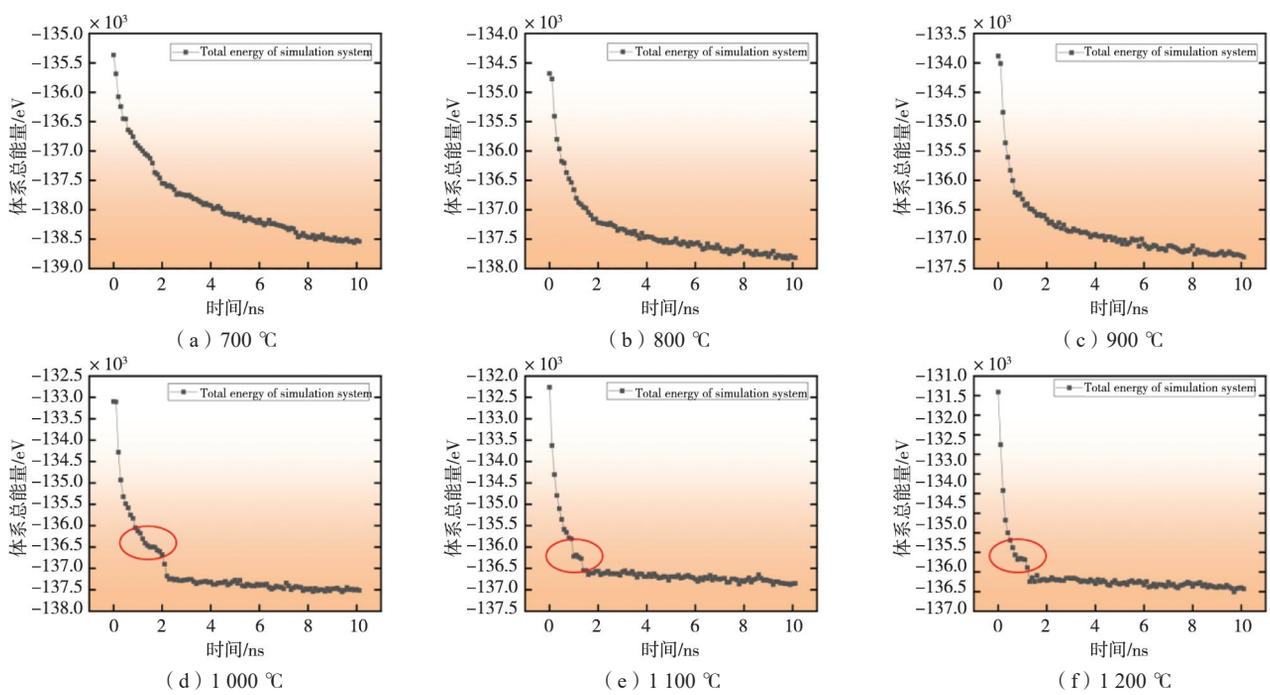
Fig. 2 Schematic diagram of the modeling and simulation process for the Ti-Al-Zr-Ta-Nb system

2 模拟结果与分析

2.1 总系统能量、原子配位数与短程有序参数

图3展示了在10 ns的弛豫过程中，不同温度下模拟系统总能量随时间的变化。所有温度下的系统总能量均经历初始快速下降后趋于稳定，表明体系最终达到了平衡或亚平衡状态。如图3（a）-图3（c）所示，在700、800和900 ℃下，系统总能量在0~2 ns内迅速下降，随后缓慢降低直至达到最小值。这种单调下降的能量曲线通常对应于体系在单一相区（α相区）内的结构弛豫和缺陷退火过程，系统通过原子位置的局部调整来释放初始构型引入的应变能，最终稳定在α相的自由能极小值点。

然而，在1 000、1 100和1 200 ℃下（图3（d）-图3（f）），能量演化曲线表现出显著不同的特征：在初始1 ns的快速下降后，系统总能量进入了一个短暂的平台期。以1 000 ℃为例，该平台期持续约0.8 ns，随后能量再次开始下降，最终达到一个更低的总能量值。随着温度升高至1 100 ℃和1 200 ℃，该平台期的持续时间明显缩短。这一能量演化的“平台期”特征，可以归结为高温下发生的α→β相变过程[28]。平台期对应相变初期的形核与势垒跨越阶段：初始的能量快速下降对应于α相内部的热化与弛豫。当系统温度超过该成分钛合金的α/β相变点时，亚稳的α相将向稳定的β相转变。相变初期，新相（β相）形核需要克服一定的热力学势垒。在分子动力学模拟的时间尺度内，



（a）700 ℃　（b）800 ℃　（c）900 ℃

（d）1 000 ℃　（e）1 100 ℃　（f）1 200 ℃

图3　系统总能量在10 ns内随时间的变化

Fig. 3 Time evolution of the total system energy over 10 ns

此阶段体系的宏观总能量变化暂时停滞，形成平台。温度越高，原子扩散能力越强，热涨落越大，克服形核势垒所需的时间越短。因此，从1 000 ℃到1 200 ℃，平台期（即形核孕育期）的持续时间依次减少，这与经典的相变动力学理论定性一致[29-30]。

为定量表征溶质原子的局域结构演化，我们统计了弛豫结束后Al、Zr、Ta和Nb原子的平均配位数（Coordination Number，CN），截断半径依据体系径向分布函数第一谷值设定为0.36 nm。如图4所示，所有溶质原子的平均配位数均随热处理发生显著变化：初始均匀分散态下，各原子平均配位数仅为1.3~1.4，而弛豫后均大幅跃升，标志着原子从孤立随机分布向形

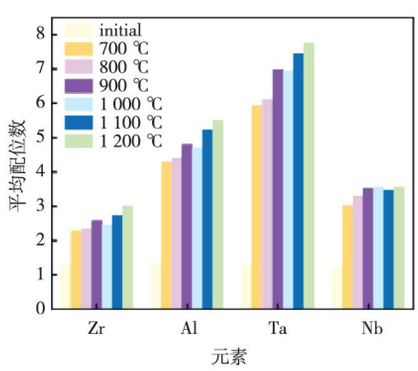


图4　体系平衡后Al、Zr、Ta、Nb原子配位数的分布

Fig. 4 Coordination number distributions of the Al，Zr，Ta，and Nb atoms after system equilibration

成局域团簇的结构转变。

然而，不同元素的增长幅度与温度响应呈现显著差异：Zr与Nb的配位数增长相对平缓，最终分别稳定在2~3与3~4的区间，且随温度升高仅微弱增加，表明二者在团簇形成中的驱动作用相对有限，其偏聚行为趋于饱和；相比之下，Al与Ta的增长极为显著，分别达到4~6与5~8的较高水平，且表现出强烈的温度依赖性——尤其是Ta原子的平均配位数从700 ℃的5.92持续升高至1 200 ℃的7.76，已接近BCC结构的理想配位数（8），暗示以Ta为中心的局域环境更趋近于β相特征。这些差异的物理根源在于元素的扩散能力与化学亲和力不同：Al与Ta之间强烈的相互吸引及其自身的高偏聚倾向，使其成为多元团簇形成的核心，高温显著加速其长程扩散与聚集，从而导致配位数明显增加；而Zr与Nb的扩散或化学驱动力较弱，因而其局域聚集程度对温度提升不敏感。综上所述，平均配位数的演变直观量化了团簇的形成与生长，揭示出高配位数的Al、Ta原子是团簇的结构骨架与热力学驱动力来源，而Zr、Nb则以较低程度参与其中，为理解多元钛合金中复杂的非均匀相变与微观组织形成提供了关键的原子尺度结构参量。

为定量表征多元钛合金体系中不同元素间的化学相互作用与偏聚倾向，本研究计算了Warren-Cowley化学短程序（Chemical Short-Range Order，SRO）参数。该参数定义了在围绕一个中心A类原子的第m配位壳层内，找到B类原子的概率相对于完全随机固溶体状态的偏离。对于一个包含n种元素的体系，其m壳层的SRO参数构成一个$n \times n$的矩阵。对于特定的原子对A-B，其参数α_m^{AB}的计算公式为：

$$\alpha_m^{AB}=1-\frac{P_m^{AB}}{X_B} \tag{1}$$

式中：P_m^{AB}是观测概率，表示在实际模拟的原子构型中，一个A类原子其第m配位壳层内邻居原子为B类原子的平均比例。X_B是B类原子在体系中的总体原子分数。α_m^{AB}其物理意义明确：若$\alpha_m^{AB}=0$，表明A与B原子呈随机分布，无特定相互作用；若$\alpha_m^{AB}>0$，意味着两者相互排斥，倾向于远离（有序化或相分离）；若$\alpha_m^{AB}<0$，则表明两者相互吸引，倾向于互为近邻（异类原子偏聚）。对于同一元素（A=B），α_m^{AA}的正值表示同类原子聚集，负值则表示其趋于分散。

如图5所示，为定量揭示不同弛豫温度下各元素间的化学相互作用，我们计算了体系的第一近邻Warren-Cowley短程序（SRO）参数，结果以5 × 5矩阵热图形式呈现。其中，行（A）代表中心原子类型，列（B）代表近邻原子类型。对角线元素（A=B）反映同类原子的聚集（正值）或分散（负值）倾向；非对角线元

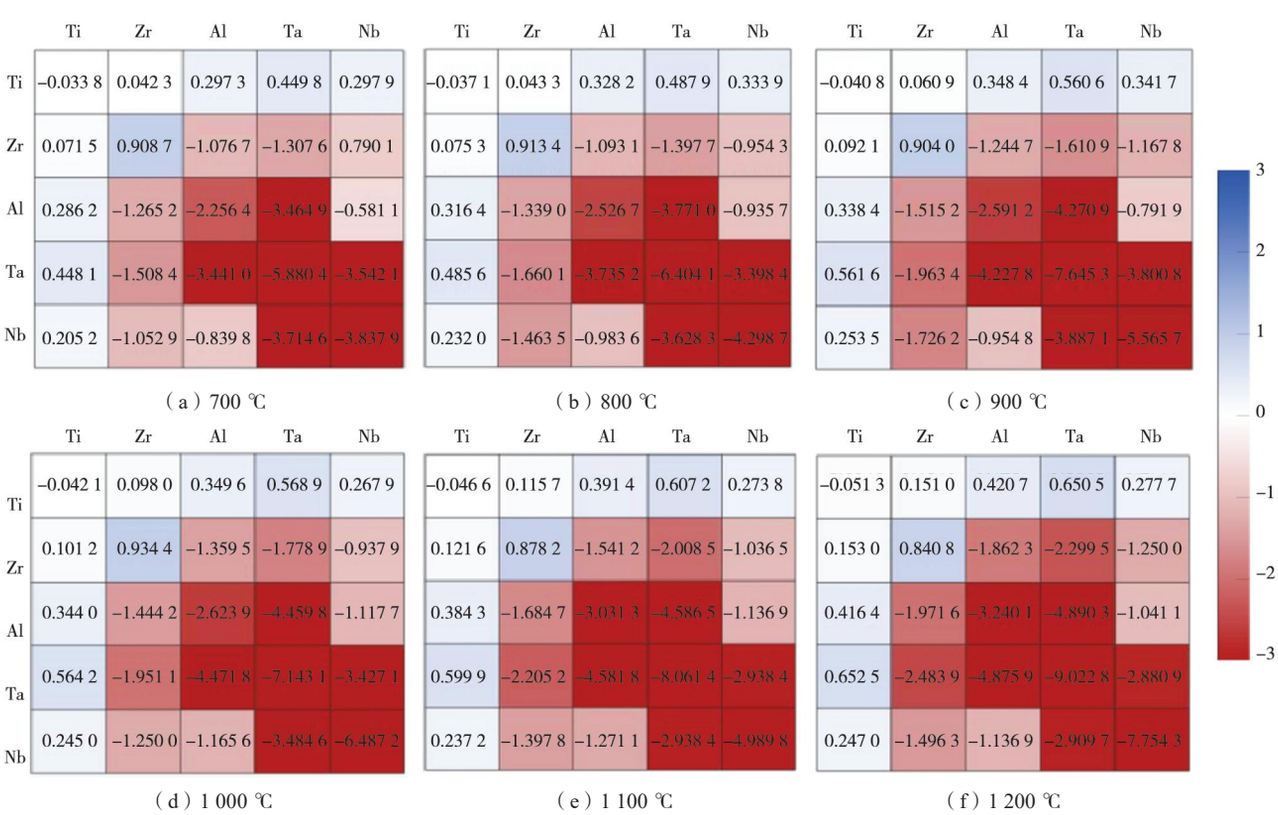


图5 不同温度下体系弛豫后各元素相互作用的SRO参数热力图

Fig. 5 Heat maps of SRO parameters for the elemental interactions after system relaxation under different temperatures

素（A≠B）则直接量化了异类原子对间的化学偏好：负值（图中红色）表示相互吸引，正值（图中蓝色）表示相互排斥。分析热图可知，除基体Ti外，主要溶质元素（Al、Zr、Ta和Nb）之间呈现出普遍的吸引趋势。在排除Ti行与Ti列后的4×4子矩阵中，绝大部分区域显示为红色，表明Al、Zr、Ta和Nb四者之间，包括其自身（如Al-Al、Ta-Ta和Nb-Nb），均存在不同程度的吸引作用。这一现象预示着在弛豫后的体系中，这些溶质原子并非随机分布，而是倾向于形成富含多元组分的局域团簇或短程有序结构。特别值得注意的是，Al-Ta、Ta-Ta、Ta-Nb及Nb-Nb对应的SRO参数值均低于−3，表现出强烈的吸引倾向，表明Ta与Nb原子可能作为团簇的核心，与Al等元素产生显著的化学键合[31]。

温度对特定原子对的相互作用具有明确的调制效应。例如，随着温度从700 ℃升至1 200 ℃，Ta-Nb对的SRO负值从−3.54减弱至−2.88，表明其吸引趋势随温度升高而有所缓和，这可能源于热扰动对特定化学键的削弱。与之相反，Al与其余溶质原子（如Al-Zr、Al-Ta）的SRO负值在高温下进一步加深，说明Al的界面活性或与其他元素的协同作用在高温下反而得到增强。

对于基体Ti原子，其与Zr的SRO参数接近零，证实Zr在Ti基体中趋于完全随机固溶。而Ti与Al、Ta、Nb等元素则显示出微弱的正值，表明Ti与这些溶质原子间存在轻微的排斥倾向，这从化学角度解释了为何溶质原子更倾向于偏聚至晶界或相互结合，而非均匀溶解于Ti基体之内。

2.2 团簇可视化与分析

Al-Zr-Ta-Nb团簇通过OVITO软件的Cluster analysis方法自动识别。图6展示了模拟体系在700~1 200 ℃弛豫过程团簇的演变过程。0 ns时，Al、Zr、Ta和Nb原子在模型内均匀分布，经过不同温度的弛豫后，均观察到不同程度的原子的偏聚。在1 100 ℃和1 200 ℃下，团簇迅速形成，随后逐渐增大。700 ℃与800 ℃下形成的团簇比高温下形成的团簇要更小，形成的速度也更为缓慢。这是因为团簇的形成与生长是热激活扩散过程：温度越高，原子扩散系数越大，溶质原子的迁移速率和碰撞结合频率显著增加，导致团簇在相同时间内生长至更大尺寸[32]。随着温度升高，在10 ns弛豫结束后的体系可以观察到偏聚的趋势是逐步提高的。

通过PTM方法对弛豫后室温体系的结构分析表明，如图7所示，弛豫温度通过调控相变行为主导了晶界网络的演化。在700~900 ℃的α相区弛豫后，晶粒较初始状态（晶界原子占比37.3%）明显粗化，对应晶界原子占比降至25.8%~29.8%。然而，当弛豫温度升至1 000~1 200 ℃的β相区时，晶界原子占比骤降至5.3%以下。这一非单调变化并非源于晶界原子数量的真实减少，而是α→β相变引发的结构性后果。高温β相

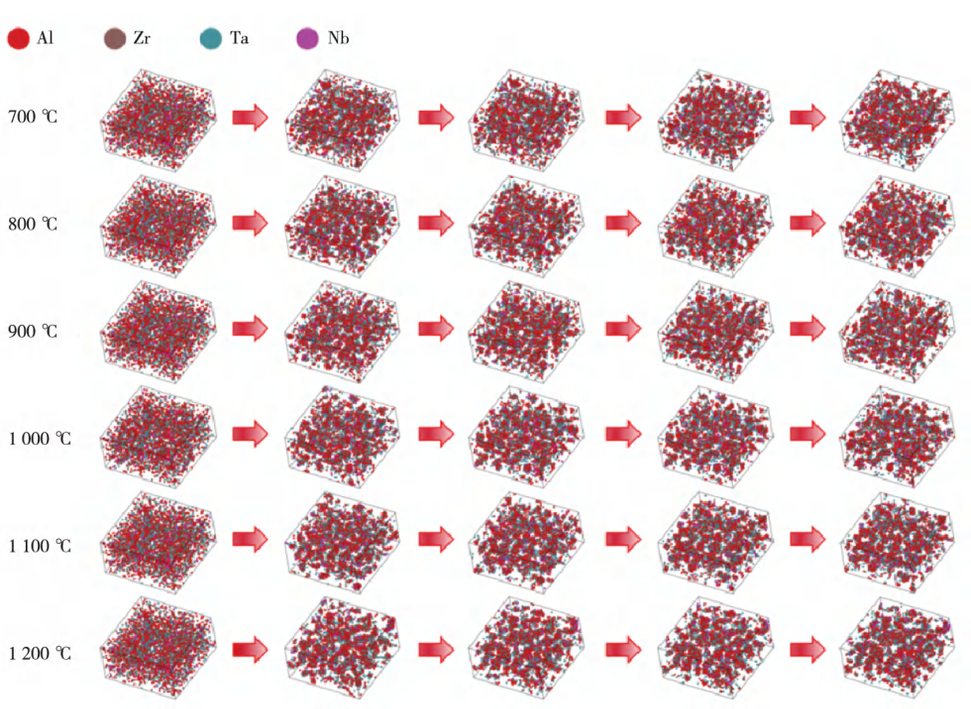


图6 不同温度下合金团簇在10 ns内的演变过程

Fig. 6 The evolution processes of alloy clusters over 10 ns under different temperatures

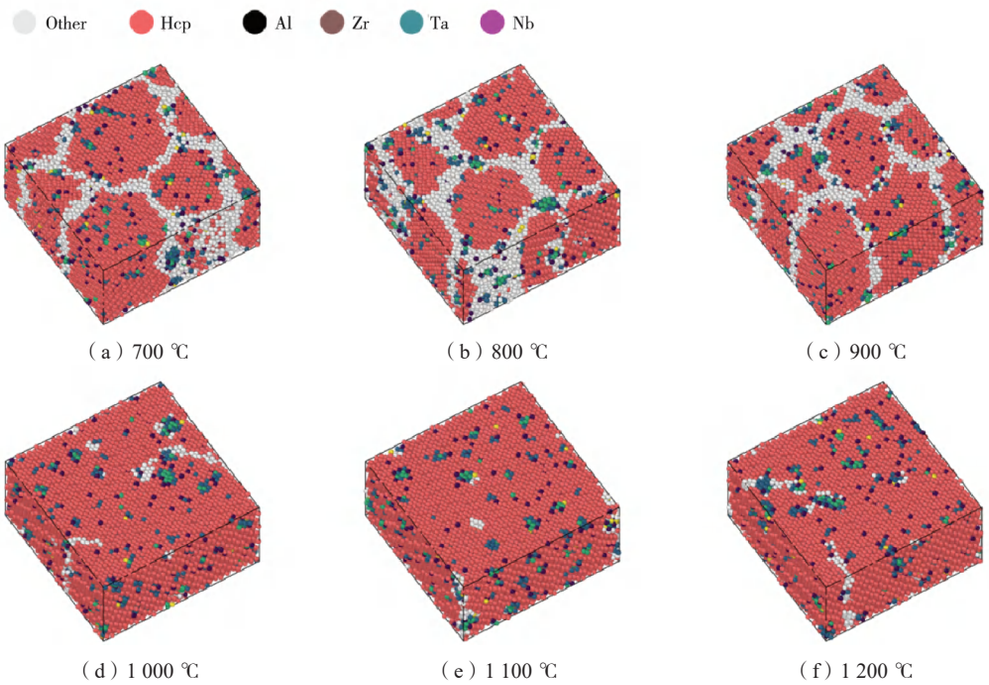


图7 晶粒与合金团簇在不同温度下弛豫后冷却至室温的体系内的分布特性

Fig. 7 Distribution characteristics of the grains and alloy clusters after relaxation under different temperatures and subsequent cooling to room temperature

在淬火过程中发生无序转变，产生大量高度畸变的非晶态界面原子。这些原子因无法被PTM模板识别而被归类为“其他”，致使算法可识别的“清晰晶界”比例大幅降低，实质上反映了相变引发的拓扑无序对传统晶界结构信号的掩蔽效应。

在700~900 ℃的较低温度下，Al、Zr、Ta和Nb等溶质原子强烈偏聚于晶界，尤其富集在能量更高的三叉晶界处。这主要归因于尺寸失配应变能的弛豫：晶界作为结构开放区域，能更有效地容纳与基体原子半径差异较大的溶质原子，从而降低系统总弹性应变能。当温度升高至β相区（≥1 000 ℃）后，元素普遍富集于被标记为“其他”的无序原子区域。这些区域为溶质提供了比传统晶界更优的容纳空间引导溶质原子发生由“晶界偏聚”向“无序区富集”的再分配。这一转变微观地印证了高温下相变过程对元素相互作用与扩散路径的重构作用。

为定量揭示合金元素在晶界区域的扩散与偏聚行为，如图8所示，统计了Al、Zr、Ta和Nb四种溶质原子在700~900 ℃弛豫后晶界总原子数中的占比。分析发现，各元素的晶界富集程度呈现显著差异，且对温度的响应行为截然不同。相较于其在体系中的总体原子分数（5.9at.% Al，3.5at.% Zr，2.0 at.% Ta，0.3at.% Nb），所有溶质在晶界均发生正偏聚，但其偏聚强度顺序为：Nb（富集系数~4.3）>Ta（~1.8）>Al（~1.7）>Zr（~1.1）。其中，Zr与Nb的晶界占比在不同温度下

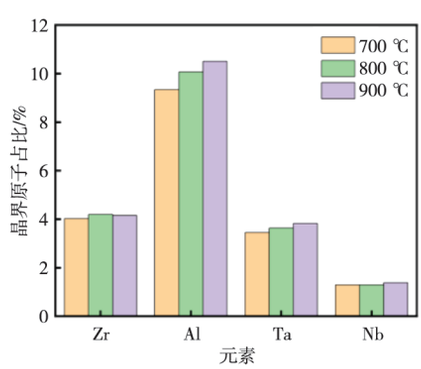


图8 Al、Zr、Ta、Nb原子在700~900 ℃下晶界原子的占比

Fig. 8 Percentages of the Al，Zr，Ta，and Nb atoms located at grain boundaries under 700-900 ℃

基本保持恒定，分别约为4.0%与1.3%；而Al与Ta的占比则随温度升高持续增加，Al从9.34%升至10.51%，Ta从3.45%升至3.82%。这一对比表明，前两者的偏聚在试验温区内已趋近热力学平衡，而后两者的过程仍受扩散动力学控制。

上述差异化行为主要由于原子尺寸、扩散能力及元素-基体相互作用的竞争[33-34]。Zr原子扩散较慢，且其尺寸效应带来的应变能驱动相对有限，故仅呈现轻微的平衡偏聚。Nb原子虽浓度极低，但其大原子半径在晶界处能高效释放弹性应变能，驱动了强烈的平衡富集。对于Al和Ta，温度升高显著增强了其长程扩散能力，使更多原子得以迁移至晶界。尤其是Ta，其较高的扩散势垒使得升温对其偏聚的加速效应更为明

显；而Al作为α相稳定元素，可能与Ti基体在晶界形成局域有序团簇，进一步增加了界面浓度。这种元素特异的偏聚机制直接影响合金的高温性能：强偏聚元素（Nb，Ta）可有效钉扎晶界，提升组织稳定性；而Al的偏聚则有助于维持晶界强度，优化合金的综合力学行为。

3 结论

基于MC/MD混合方法的原子尺度模拟，系统研究了Ti-5.9Al-3.5Zr-2.0Ta-0.3Nb多组元高温钛合金在700~1 200 ℃热处理过程中的元素交互作用机制，主要结论如下。

（1）弛豫后Al、Ta原子的平均配位数显著升高，且表现出强烈的温度依赖性（Ta原子配位数在1 200 ℃时达7.76），证实二者为多元团簇形成的核心；而Zr、Nb原子的配位数增长平缓且对温度不敏感，表明其在团簇中参与程度有限，主要起辅助作用。

（2）通过第一近邻Warren-Cowley短程序参数分析发现，除基体Ti外，Al、Zr、Ta、Nb溶质原子之间普遍存在吸引作用，尤以Al-Ta、Ta-Nb等原子对的负值最为显著（$\alpha<-3$），表明体系存在形成富含多元组分的（Al、Zr、Ta和Nb）团簇的热力学驱动力。温度对特定原子对的相互作用具有明确的调制效应：Ta-Nb对的吸引趋势随温度升高而减弱，而Al与其他溶质元素的协同作用则在高温下增强。

（3）在700~900 ℃的α相区，溶质原子主要偏聚于晶界及三叉晶界处，以弛豫尺寸失配产生的弹性应变能。所有溶质在晶界均呈正偏聚，其强度顺序为：Nb>Ta>Al>Zr。其中，Zr与Nb的偏聚趋于热力学平衡，占比基本不随温度变化；而Al与Ta的偏聚过程受扩散动力学控制，其晶界浓度随温度升高持续增加。

本工作通过原子模拟，在微观尺度上揭示了温度、相变与元素交互之间的内在关联，为理解多组元高温钛合金中复杂的固溶、偏聚及团簇化行为提供了机制性见解。研究成果对高温钛合金成分设计、热处理工艺优化以及合金微观组织精准调控，进而提升其高温性能，具有重要的理论指导意义。

参考文献：

[1] 金和喜，魏克湘，李建明，等. 航空用钛合金研究进展 [J]. 中国有色金属学报，2015，25（2）：280–292.

[2] 李梁，孙健科，孟祥军. 钛合金的应用现状及发展前景 [J]. 钛工业进展，2004（5）：19–24.

[3] 蔡建明，弭光宝，高帆，等. 航空发动机用先进高温钛合金材料技术研究与发展 [J]. 材料工程，2016，44（8）：1–10.

[4] 魏宝敏，台立民. Ti-Al-Sn-Zr-Mo-Si系高温钛合金的研究进展 [J]. 特种铸造及有色合金，2013，33（5）：424–428.

[5] Souza S A，Manicardi R B，Ferrandini P L，et al. Effect of the addition of Ta on microstructure and properties of Ti-Nb alloys [J]. Journal of Alloys and compounds，2010，504（2）：330–340.

[6] Li J，Xu Y，Xiao W，et al. Development of Ti-Al-Ta-Nb-（Re）near-α high temperature titanium alloy：Microstructure，thermal stability and mechanical properties [J]. Journal of Materials Science & Technology，2022，109：1–11.

[7] Ma K，Ren S，Sun H，et al. Molecular dynamics simulations of TC4 titanium alloy with mechanical property calculations after various heat treatments [J]. Physical Chemistry Chemical Physics，2022，24（41）：25367–25372.

[8] Du Z，Xiao S，Xu L，et al. Effect of heat treatment on microstructure and mechanical properties of a new β high strength titanium alloy [J]. Materials & Design，2014，55：183–190.

[9] Santhosh R，Geetha M，Nageswara Rao M. Recent developments in heat treatment of beta titanium alloys for aerospace applications [J]. Transactions of the Indian Institute of Metals，2017，70（7）：1681–1688.

[10] Chen Y，Du Z，Xiao S，et al. Effect of aging heat treatment on microstructure and tensile properties of a new β high strength titanium alloy [J]. Journal of Alloys and Compounds，2014，586：588–592.

[11] Zhao Z B，Wang Q J，Liu J R，et al. Effect of heat treatment on the crystallographic orientation evolution in a near-α titanium alloy Ti60 [J]. Acta Materialia，2017，131：305–314.

[12] Sun J，Lu H，Liang Y，et al. Effects of different heat treatment temperatures on the microstructure and mechanical properties of additive manufacturing Ti65 alloys [J]. Materials Characterization，2025，219：114592.

[13] Xiong L H，Chen K，Ke F S，et al. Structural and dynamical properties of liquid Ag74Ge26 alloy studied by experiments and ab initio molecular dynamics simulation [J]. Acta Materialia，2015，92：109–116.

[14] Yi T. Systematic studies on structural instability in microscopic polycrystalline Ti-6Al-4V alloys subject to annealing via molecular dynamics [J]. Journal of Mechanical Science and Technology，2025：1–7.

[15] Li N，Hao Z，Xu L，et al. A review of molecular dynamics simulation of different Ti-Al-based alloys [J]. Metals，2024，14（9）：1018.

[16] He T，Li X，Qi Y，et al. Molecular dynamics simulation of primary irradiation damage in Ti-6Al-4V alloys [J]. Nuclear Engineering and Technology，2024，56（4）：1480–1489.

[17] Li J，Lu W，Liu L，et al. Molecular dynamics simulation of microstructural evolution and mechanical behavior of titanium alloy subjected to laser shock peening [J]. Optics & Laser Technology，2024，175：110748.

[18] Liu J，Zhang L. Investigation on the diffusion behaviors and mechanical properties of the Ti/Al interface using molecular dynamics simulation [J]. Journal of Materials Engineering and Performance，2024，33（6）：2920–2939.

[19] Ma G，Wang J，Di T，et al. Effect of heat treatment on microstructure，phase transformation behavior and shape memory effect of NiTi shape memory alloy manufactured by additive manufacturing [J]. Journal of Alloys and Compounds，2025：181340.

[20] Huang X，Liu L，Duan X，et al. Atomistic simulation of chemical short-range order in HfNbTaZr high entropy alloy based on a newly-developed interatomic potential [J]. Materials & Design，2021，202：109560.

[21] Nitol M S，Mishra A，Xu S，et al. Moment tensor potential and its application in the Ti-Al-V multicomponent system [J]. Physical Review Materials，2025，9（6）：063601.

[22] Liu H，Chen R，Chen B，et al. Sequential phase transformations in $Ta_{0.4}Ti_2Zr$ alloy via tensile molecular dynamics simulations with deep potential [J]. Chinese Physics B，2026，35（1）：017102.

[23] Liu T，Shi K，Zhao J，et al. Effect of hot isostatic pressing processing parameters on microstructure and properties of Ti60 high temperature titanium alloy [J]. China Foundry，2023，20（1）：49–56.

[24] 刘宏宇，刘田雨，刘鸿羽，等. β稳定元素Mo、Nb、Ta、W对铸造高温钛合金组织性能的影响研究 [J]. 材料导报，2025，39（S2）：609–612.

[25] Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO-the open visualization tool [J]. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering，2009，18（1）：015012.

[26] Hirel P. Atomsk：a tool for manipulating and converting atomic data files [J]. Computer Physics Communications，2015，197：212–219.

[27] Berz M，Makino K. Computational accelerator physics 2003：proceedings of the Seventh International Conference on Computational Accelerator Physics，Michigan，USA，15-18 October 2003 [C]. CRC Press，2005.

[28] 常辉，周廉，张廷杰. 钛合金固态相变的研究进展 [J]. 稀有金属材料与工程，2007（9）：1505–1510.

[29] Sietsma J，S van der Zwaag. A concise model for mixed-mode phase transformations in the solid state [J]. Acta Mater，2004，52：4143–4152.

[30] Strychor R，Williams J C，Soffa W A. Phase transformations and modulated microstructures in Ti-Al-Nb alloys [J]. Metallurgical Transactions A，1988，19（2）：225–234.

[31] Zheng M，Bian Z，Chen W，et al. Atomic behavior of nickel-based single crystal superalloy during heat treatment process based on molecular dynamics [J]. Physica Scripta，2024，99（6）：065911.

[32] Xie L，Brault P，Thomann A L，et al. AlCoCrCuFeNi high entropy alloy cluster growth and annealing on silicon：a classical molecular dynamics simulation study [J]. Applied Surface Science，2013，285：810–816.

[33] Gafner S L，Redel L V，Gafner Y Y. Molecular-dynamics simulation of the heat capacity for nickel and copper clusters：shape and size effects [J]. Journal of Experimental and Theoretical Physics，2012，114（3）：428–439.

[34] Zhang Y，Jiang S. Atomistic mechanisms for temperature-induced crystallization of amorphous copper based on molecular dynamics simulation [J]. Computational Materials Science，2018，151：25–33.

（编辑：潘继勇，pjy@foundryworld.com）