

# Ti<sub>3</sub>Al 单晶塑性变形行为的晶体塑性有限元模拟

赵文娟<sup>1</sup>, 唐安<sup>1</sup>, 林启权<sup>1</sup>, 任玉平<sup>2</sup>, 徐俊瑞<sup>1</sup>, 宋滨娜<sup>3</sup>

(1. 湘潭大学, 湖南 湘潭 411105)

(2. 东北大学, 辽宁 沈阳 110819)

(3. 苏州大学, 江苏 苏州 215021)

**摘要:** 基于晶体塑性理论, 建立了滑移变形机制下 Ti<sub>3</sub>Al 单晶晶体塑性的细观本构关系, 并利用 ABAQUS/UMAT 用户子程序接口开发本构关系子程序, 将其应用于不同取向 Ti<sub>3</sub>Al 单晶的单向压缩模拟。分析不同取向时晶体滑移系的启动情况, 以及滑移系启动与取向的相互关系。结果表明: 基面滑移系 (0001) <11 $\bar{2}$ 0>, 柱面滑移系 {10 $\bar{1}$ 0} <11 $\bar{2}$ 0> 和锥面滑移系 {11 $\bar{2}$ 1} <11 $\bar{2}$ 6> 均被激活, 但由于滑移系之间临界剪切应力和施密特因子的不同, 各滑移系的启动情况存在显著差异。基面和锥面滑移系的临界剪切应力较大, 仅在施密特因子较大时启动; 特别是锥面滑移系, 其临界剪切应力最大, 因而该滑移系只有在压缩轴接近 [0001] 方向时才被激活。柱面滑移系的启动较为容易, 对塑性变形的贡献也最大。同时与实验结果相比较, 模拟结果基本与之吻合。

**关键词:** Ti<sub>3</sub>Al 单晶; 晶体塑性; 位错; 滑移系; 有限元; 本构关系

**中图分类号:** TG113.25<sup>+</sup>3

**文献标识码:** A

**文章编号:** 1002-185X(2018)06-1753-07

Ti<sub>3</sub>Al 是一种具有 D0<sub>19</sub> 结构的金属间化合物, 是 TiAl 基合金的基本组成相之一。TiAl 基合金在高温下具有较高的强度、弹性模量和抗氧化性能, 同时拥有低密度、高比强度和抗蠕变性能优良等特点, 目前已广泛应用于航空、航天、汽车、生物技术等领域<sup>[1-3]</sup>。各国学者针对 Ti<sub>3</sub>Al 金属间化合物的塑性变形行为进行了一系列的实验研究。Harry 和 Kerans 等<sup>[4,5]</sup>的实验结果表明, 当温度低于 600 °C 时, Ti<sub>3</sub>Al 多晶体表现出显著的脆性; 当温度高于 600 °C 时, 其塑性才会有有一定的改善, 研究者认为主要原因是 Ti<sub>3</sub>Al 在温度较低时沿 *c* 轴方向的位错滑移极为困难。Minonishi 和 Umakoshi 等<sup>[6,7]</sup>通过 Ti<sub>3</sub>Al 单晶单向拉伸和压缩试验研究 Ti<sub>3</sub>Al 滑移系的滑移情况, 发现其滑移通常发生在柱面、基面和锥面上。其中, 柱面滑移较容易被观察到; 基面滑移系启动较为困难; 锥面滑移系很少被观察到, 只有在特定取向才能启动。同时, Ti<sub>3</sub>Al 的低温脆性与滑移系的启动存在密切的关系。因此, 深入研究 Ti<sub>3</sub>Al 滑移系的启动对深入理解其低温脆性的微观机制有着重要意义。根据施密特定律, 晶体取向对滑移系启动有重要的影响, 而实际微观组织中晶体取向信息十分复杂, 仅靠实验难以全面深入探究。近年来,

基于晶体塑性理论的有限元方法是模拟材料介观尺度塑性变形的有效手段之一, 它可以在材料模型中加入晶粒取向、晶粒尺寸和滑移系等晶体学细观信息, 以研究滑移系启动、变形织构演化和弹塑性各向异性等问题。黄文等<sup>[8]</sup>采用晶体塑性有限元方法模拟单晶纯钛在高温下的单向拉伸试验, 模拟结果与试验现象相吻合, 揭示了单晶纯钛的单向拉伸中滑移系对塑性变形的贡献。赵蒙等<sup>[9]</sup>利用晶体塑性有限元方法模拟 TA15 钛合金高温压缩试验过程, 发现晶粒几何形状和晶粒取向会造成应力和应变的非均匀性分布, 晶粒取向和晶粒间相互作用的复杂性会导致各个滑移系开动存在差异。由此, 利用晶体塑性有限元模拟探究 Ti<sub>3</sub>Al 单晶取向对滑移系启动的影响是一种有效的方法。

本文在位错滑移变形机制下, 建立 D0<sub>19</sub> 结构单晶的数值本构关系。通过 ABAQUS/UMAT 用户子程序接口, 使用 FORTRAN 语言开发单晶本构关系子程序, 将其应用于不同取向 Ti<sub>3</sub>Al 单晶的单向压缩模拟, 研究滑移系启动情况以及单晶取向对滑移系启动的影响。

## 1 单晶本构模型

### 1.1 晶体变形运动学

收稿日期: 2017-06-06

基金项目: 国家自然科学基金 (51175445, 51201147, 51304141); 湖南省自然科学基金 (14JJ6016)

作者简介: 赵文娟, 女, 1980 年生, 博士, 副教授, 湘潭大学机械工程学院, 湖南 湘潭 411105, 电话: 0731-58292454, E-mail: wjzhao1024@xtu.edu.cn

晶体变形是位错沿着特定的晶体学平面的滑移和晶格畸变造成的<sup>[10]</sup>。当晶体滑移时，其初始构型经过变形梯度张量  $F$  变为当前构型，这一过程通过乘法分解原理分解为<sup>[11]</sup>：

$$F = F^e F^p \quad (1)$$

式中， $F^p$  为晶体沿滑移方向均匀剪切所对应的变形梯度张量， $F^e$  为晶格畸变和刚性转动所产生的变形梯度张量。

假设滑移系  $\alpha$  中滑移面法向和滑移方向向量分别用 2 个正交单位向量  $m^\alpha$  和  $n^\alpha$  表示，那么塑性变形梯度张量表示为：

$$\dot{F}^p (F^p)^{-1} = \sum_{\alpha=1}^N \dot{\gamma}^\alpha m^\alpha \otimes n^\alpha \quad (2)$$

式中， $\dot{\gamma}^\alpha$  表示滑移系  $\alpha$  的剪切应变率， $N$  为滑移系的总数。

### 1.2 率相关硬化模型和硬化公式

本研究采用基于指数函数的率相关硬化模型，由 Asaro 和 Needleman<sup>[12]</sup> 提出，该模型建立了各滑移系的分解剪应力  $\tau^\alpha$  与剪切应变率  $\dot{\gamma}^\alpha$  之间的关系，剪切应变率  $\dot{\gamma}^\alpha$  由以下方程表示：

$$\dot{\gamma}^\alpha = \dot{\gamma}_0^\alpha \operatorname{sgn}(\tau^\alpha) \left| \frac{\tau^\alpha}{g^\alpha} \right|^m \quad (3)$$

式中， $\dot{\gamma}_0^\alpha$  为滑移系  $\alpha$  的参考剪切应变率， $m$  为应变率敏感系数， $g^\alpha$  表示滑移系  $\alpha$  的当前强度。

$g^\alpha$  与剪切应变有关，由下列方程确定：

$$g^\alpha = \sum_{\beta=1}^N h_{\alpha\beta} |\dot{\gamma}^\beta| \quad (4)$$

$$h_{\alpha\beta} = q_{\alpha\beta} h_{\alpha\alpha} \quad (5)$$

$$h_{\alpha\alpha} = h_0 \sec h^2 \left| \frac{h_0 \gamma}{\tau_s - \tau_0} \right| \quad (6)$$

其中， $h_{\alpha\beta}$  为硬化系数，当  $\alpha = \beta$  时为自硬化系数  $h_{\alpha\alpha}$ ，当  $\alpha \neq \beta$  时为潜硬化系数； $q_{\alpha\beta}$  为比例系数； $h_0$  为初始硬化模量， $\tau_s$  为流动饱和应力值， $\tau_0$  为初始临界分切应力， $\gamma$  为所有滑移系上剪切应变的累积：

$$\gamma = \int_0^t |\dot{\gamma}^\alpha| dt \quad (7)$$

### 1.3 单晶的塑性本构关系

变形中的弹性性质不受塑性变形影响<sup>[8]</sup>，由此可以采用下列形式的弹性本构方程：

$$\overset{\nabla}{\sigma}^e = L : D^e \quad (8)$$

式中， $\overset{\nabla}{\sigma}^e$  表示以中间构型为基准状态的 Kirchhoff 应力张量的 Jaumann 导数<sup>[8]</sup>， $L$  是瞬时的弹性模量张量， $D^e$  为变形率张量的弹性部分。

进而，单晶的塑性本构关系可描述为：

$$\overset{\nabla}{\sigma} = L : D - \sum_{\alpha=1}^N (L : P^\alpha + \beta^\alpha) \dot{\gamma}^\alpha \quad (9)$$

其中， $\overset{\nabla}{\sigma}$  表示以初始构型为基准状态的 Cauchy 应力张量的 Jaumann 导数， $D$  为变形率张量。 $P^\alpha$  和  $\beta^\alpha$  可表示为式 (10)~(12)，式中  $P^\alpha$  和  $W^\alpha$  分别为 Schmid 因子的对称部分和反对称部分， $\sigma$  为 Cauchy 应力。

$$P^\alpha = \frac{1}{2} (m^\alpha \otimes n^\alpha - n^\alpha \otimes m^\alpha) \quad (10)$$

$$\beta^\alpha = W^\alpha \sigma - \sigma W^\alpha \quad (11)$$

$$W^\alpha = \frac{1}{2} (m^\alpha \otimes n^\alpha + n^\alpha \otimes m^\alpha) \quad (12)$$

基于上述率相关的晶体塑性理论，按照 ABAQUS 软件提供的用户材料子程序开发接口框架<sup>[13]</sup>，采用 FORTRAN 语言编写 Ti<sub>3</sub>Al 单晶体的本构关系子程序并用于之后的模拟分析。

## 2 单向压缩模拟过程

对 Ti<sub>3</sub>Al 单晶滑移系的已有实验研究表明<sup>[6,7]</sup>，在单晶体变形中一般可以观察到的滑移模式有：3 个对等的基面滑移系  $\{0001\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ ，3 个对等的柱面滑移系  $\{10\bar{1}0\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ 。上述的滑移系具有相同的滑移方向  $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ ，滑移方向都处在同一个平面内，不能提供平行于  $c$  轴方向的变形，因而  $c$  轴方向的变形主要由锥面滑移系  $\{11\bar{2}1\} \langle 11\bar{2}6 \rangle$  来协调。

本研究基于位错滑移变形机制，考虑上述滑移系，建立 Ti<sub>3</sub>Al 单晶的晶体塑性本构关系，用于不同取向 Ti<sub>3</sub>Al 单晶单向压缩模拟，各滑移系如表 1 所示。

### 2.1 几何模型的建立和边界条件

参考实际实验中单向压缩试样的大小<sup>[14]</sup>，在 ABAQUS/CAE 中建立尺寸为 3 mm×3 mm×6 mm 的几何模型。由于几何模型形状规则，这里单元类型选用

表 1 Ti<sub>3</sub>Al 单晶的滑移系

Table 1 Slip systems of single crystal of Ti <sub>3</sub> Al		
Type of slip	Slip systems	Detail
Basal	$\{0001\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$	B1 (0001)[ $\bar{2}110$ ]
		B2 (0001)[ $11\bar{2}0$ ]
		B3 (0001)[ $1\bar{2}10$ ]
Prismatic	$\{10\bar{1}0\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$	Pr1 (01 $\bar{1}0$ )[ $\bar{2}110$ ]
		Pr2 ( $\bar{1}100$ )[ $11\bar{2}0$ ]
		Pr3 ( $\bar{1}010$ )[ $1\bar{2}10$ ]
Pyramidal	$\{11\bar{2}1\} \langle 11\bar{2}6 \rangle$	Py1 (11 $\bar{2}1$ )[ $\bar{1}\bar{1}26$ ]
		Py2 (1 $\bar{2}11$ )[ $\bar{1}2\bar{1}6$ ]
		Py3 ( $\bar{2}111$ )[ $2\bar{1}\bar{1}6$ ]
		Py4 ( $\bar{1}\bar{1}21$ )[ $11\bar{2}6$ ]
		Py5 ( $\bar{1}2\bar{1}1$ )[ $1\bar{2}16$ ]
		Py6 ( $2\bar{1}\bar{1}1$ )[ $\bar{2}116$ ]

C<sub>3</sub>D<sub>8</sub>六面体单元。在几何模型的顶面施加  $U_x=0, U_y=0, U_z=-0.06 \text{ mm}$ , 底面施加  $U_x=0, U_y=0, U_z=0$  的位移边界条件, 名义应变为 0.01, 加载时间为 50 s, 初始应变速率为  $2 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ , 其边界条件如图 1 所示。

2.2 模型参数设置和单晶取向赋予

Ti<sub>3</sub>Al 晶体的弹性常数采用 Yoo 和 Zou<sup>[15]</sup>通过第一性原理计算得到的结果, 如表 2 所示。各滑移系的初始临界分切应力根据 Inui 等<sup>[14]</sup>的实验数据选取, 如表 3 所示。晶体取向以压缩轴与基面的夹角  $\Phi$  表示, 如图 2。模拟中  $\Phi$  角分别为 0°、31°、51°、68°和 90°, 依次对应 A、B、C、D、E 5 个取向。为方便建模, 将四轴坐标系  $O-a_1a_2a_3C$  中的晶面法向指数和晶向指数转换到直角坐标系  $O-xyz$  中, 转换关系如图 3 所示。

3 结果与分析

本文主要研究不同取向 Ti<sub>3</sub>Al 单晶体压缩变形中基面、柱面和锥面滑移系的启动情况, 探究各类滑移系启动与晶体取向之间的相互关系。随着外加压应力的施加, 当滑移系滑移产生剪切应变时, 表明此时滑移系启动。为便于分析, 表 4 列出了滑移系在各取向时的最大施密特因子。

由于本文所建立的坐标系中(图 3), 5 种取向单晶体的柱面滑移系 Pr2(见表 1, 下同)相对于压缩轴

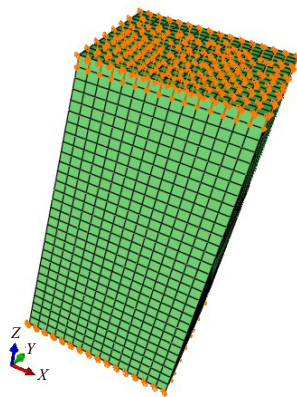


图 1 位移边界条件

Fig.1 Displacement boundary condition

表 2 Ti<sub>3</sub>Al 的弹性常数

Table 2 Elastic constants of Ti<sub>3</sub>Al (GPa)<sup>[15]</sup>

$D_{1111}$	$D_{1122}$	$D_{2222}$	$D_{1133}$	$D_{3333}$	$D_{1212}$	$D_{1313}$	$D_{2323}$
221	71	221	85	238	75	69	69

表 3 Ti<sub>3</sub>Al 各滑移系的初始临界分切应力

Table 3 Initial critical shear stress of slip systems of Ti<sub>3</sub>Al (MPa)<sup>[14]</sup>

Basal slip system	Prismatic slip system	Pyramidal slip system
330	100	910

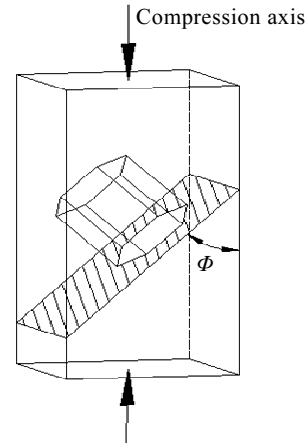


图 2 晶体相对于压缩轴的取向

Fig.2 Crystal orientation relative to compression axis

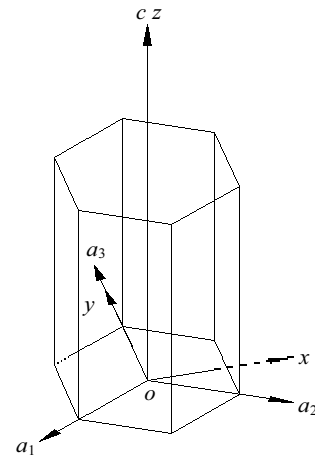


图 3 四轴坐标系与直角坐标系的关系

Fig.3 Relationship between four-axis and rectangular coordinate

表 4 基面、柱面和锥面滑移系的最大施密特因子  
Table 4 Largest Schmid factors of basal, prismatic and pyramidal slip systems

Orientation angle, $\Phi$ (°)	A	B	C	D	E
Basal (0001) $\langle 11\bar{2}0 \rangle$	0	0.445	0.490	0.345	0
Prismatic $\{10\bar{1}0\}\langle 11\bar{2}0 \rangle$	0.433	0.315	0.173	0.062	0
Pyramidal $\{11\bar{2}1\}\langle 11\bar{2}6 \rangle$	0.449	0.399	0.332	0.446	0.449

的施密特因子均为 0, 因此 Pr2 不滑移; 而 Pr1 和 Pr3 关于坐标面 xz 面对称, 它们的滑移量在 5 个取向均相等, 所以这里只用 Pr 来表示柱面滑移系的剪切应变情况。图 4a 表示 A 取向单晶体各滑移系剪切应变的变化情况。由图可见, 单晶体沿此取向时只有柱面滑移系 Pr 启动, 并且随着应变的增大其所产生的剪切应

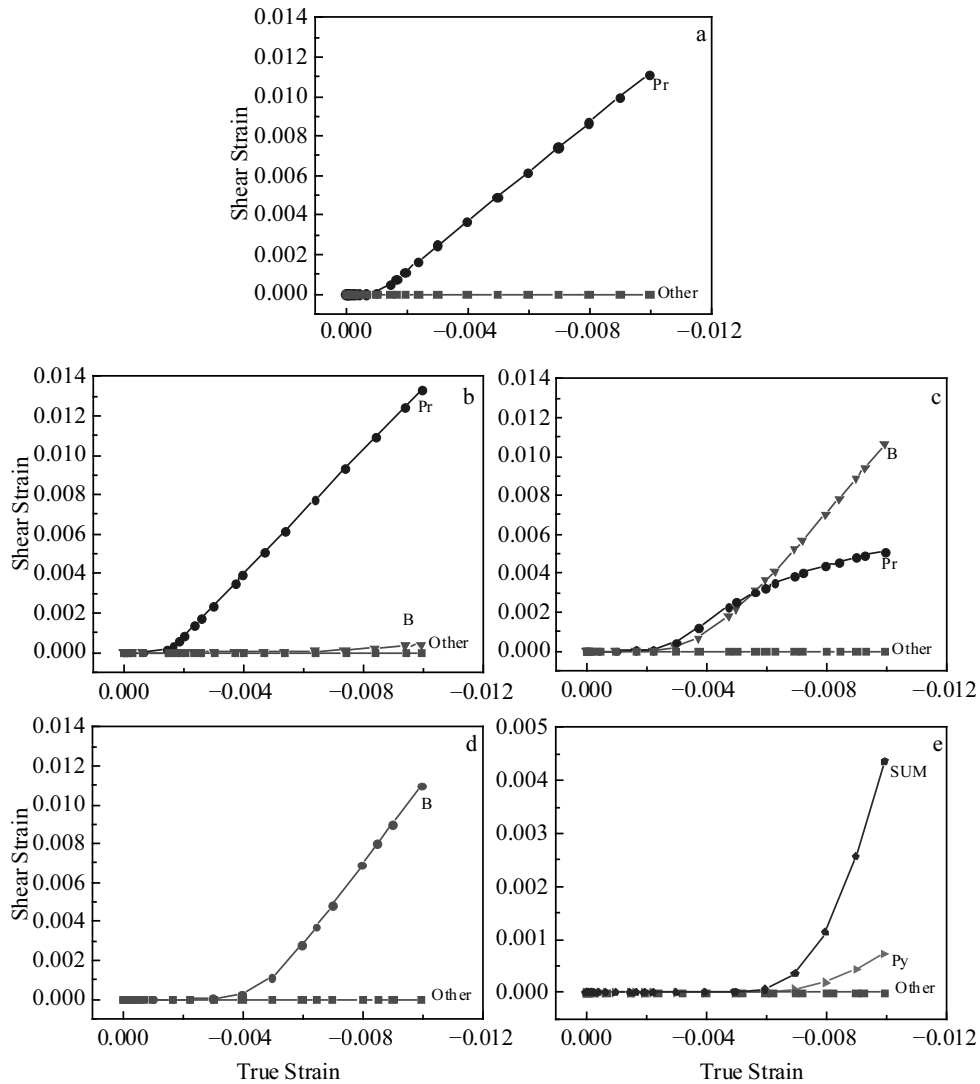


图 4 滑移系平均剪切应变曲线

Fig.4 Average shear strain curves of slip systems ((a~e) correspond to single crystal with orientation A~E, respectively)

变也逐渐增加，而其它滑移系均未被激活。这是因为，在此取向下面滑移系的施密特因子为 0（施密特因子的值见表 4，下同），塑性变形过程中滑移面上沿滑移方向上的分切应力为零，故而该滑移系始终没有滑移。对于柱面滑移系和锥面滑移系来说，虽然它们拥有几乎相同的施密特因子，但锥面滑移系的临界分切应力大约是柱面滑移系的 9 倍（见表 3），因而柱面滑移系启动，锥面滑移系未能被激活。

图 4b 和图 4c 分别表示取向 B 与 C 单晶体的滑移系启动情况。3 个基面滑移系中只有施密特因子最大的一个滑移系启动，用符号 B 表示。这 2 种取向的单晶体，基面滑移系和柱面滑移系都被激活。B 取向时，柱面滑移系首先启动，当真应变达到 0.005 时，基面滑移系才开始滑移。这是因为基面滑移系的临界分切应力是柱面滑移系的 3 倍，而在初始时其施密特因子

大约是柱面滑移系的 1.4 倍，所以柱面滑移系先滑移，随着塑性变形的进行，外载荷不断地增大，基面滑移系之后也开始启动。取向 C 时，柱面滑移系和基面滑移系几乎同步启动，在真应变达到 0.0055 之前，柱面的滑移量大于基面（图 4c），在真应变大于 0.0055 后，基面的滑移量开始大于柱面。此取向时柱面滑移系的临界分切应力较小，在初始阶段它的剪切应变大于基面滑移的剪切应变，但随着滑移的进行，位错运动会导致滑移系硬化，单晶的两个柱面滑移系滑移比只有一个基面滑移系滑移产生的硬化增长要快，所以在真应变大于 0.0055 之后，基面的滑移量开始大于柱面滑移。图 5 列出取向 C 单晶体各滑移系累积剪切应变的分布云图。它从另一个角度说明滑移系启动结果的正确性。图 5a, 5b 和 5c 中 SDV109、SDV110、SDV111 分别代表 3 个基面滑移系 B1、B2、B3（见表 1）整个

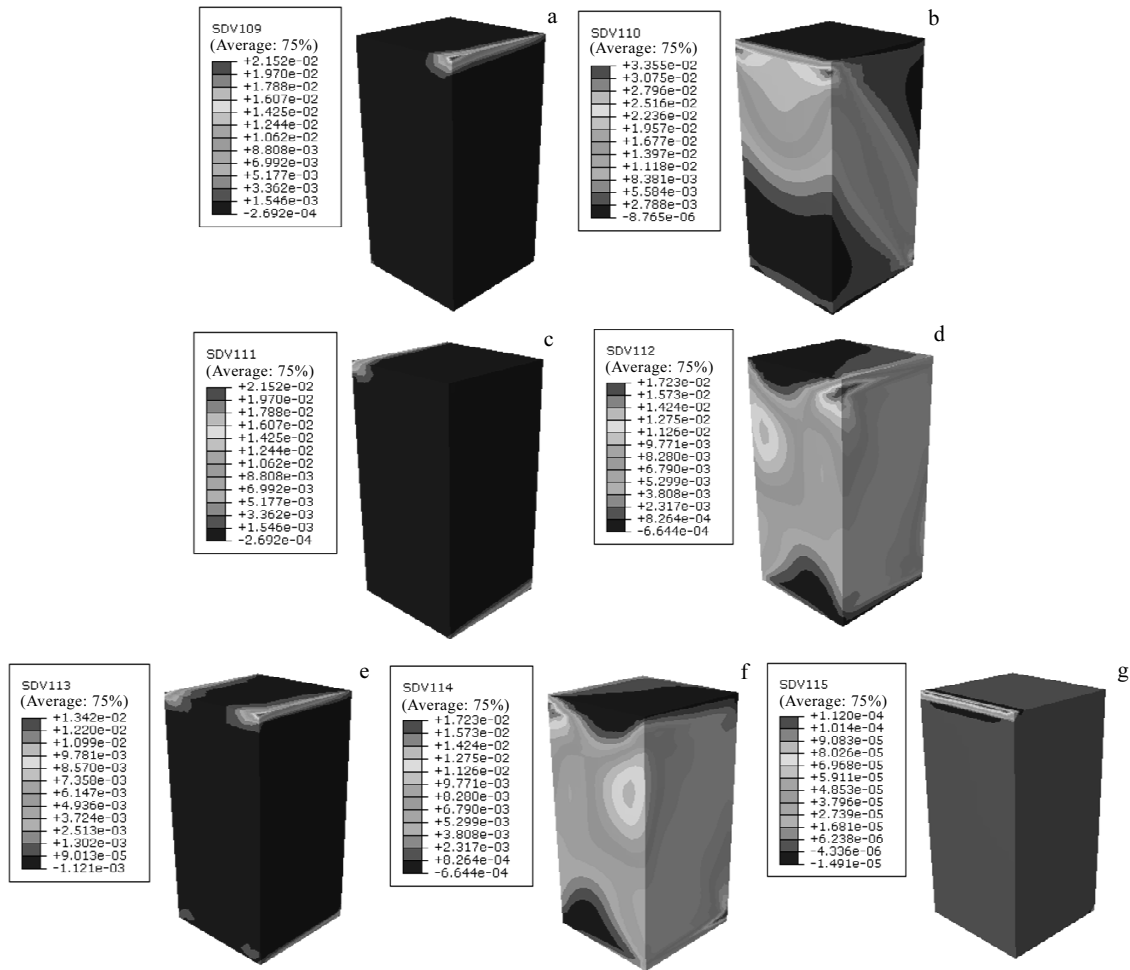


图 5 C 取向单晶体各滑移系累积剪切应变云图

Fig.5 Shear strain nephograms of slip systems for single crystal with orientation C

变形过程中的累积剪切应变, 忽略边缘效应在模型底面和顶面产生的误差。由图可知, B2 滑移系启动, 而 B1 和 B3 未能被激活。图 5d, 5e, 5f 中 SDV112、SDV113、SDV114 分别代表 3 个柱面滑移系 Pr1、Pr2、Pr3 (表 1) 的累积剪切应变。由图可知, Pr1 和 Pr3 启动, Pr2 没有被激活。图 5g 中 SDV115 表示锥面滑移系 Py1 的累积剪切应变。Py2~Py6 的剪切应变分布与 Py1 类似, 这里不再赘述。由图可知锥面滑移系并未启动。

图 4d 和图 4e 分别表示 D 与 E 取向单晶体的滑移系启动情况。对于锥面滑移系, 其各滑移系的滑移量较小, 这里用施密特因子最大的滑移系表征其滑移系启动情况, 符号为 Py。SUM 表示 6 个锥面滑移系剪切应变的总和。D 取向时, 相对于柱面滑移系, 基面滑移系的施密特因子占有绝对优势, 而锥面滑移系由于临界分切应力过大, 所以在此取向只有基面滑移系启动。E 取向时, 基面滑移系和柱面滑移系的施密特

因子均为零, 所以只有锥面滑移系启动。

结合图 4 与图 5 可知, Ti<sub>3</sub>Al 单晶体的滑移系启动与晶体取向存在密切的关系。基面滑移系仅在施密特因子较大的取向启动; 锥面滑移系启动困难, 只有在压缩轴接近[0001]方向时才启动; 柱面滑移系启动较为容易。

Inui 等<sup>[14]</sup>在室温下以  $2 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$  的应变速率对基面与压缩轴夹角为 0°、31°、51°、68°、90°的 Ti<sub>3</sub>Al 单晶试样进行了单向压缩试验, 观察到的实验现象如图 6 所示。图 6a, 6b 表示 0°时的滑移情况, 可以看到, 在此取向只有柱面滑移系滑移; 图 6c, 6d 分别表示 31°和 51°时的滑移情况, 此时柱面滑移系和基面滑移系都可以观察到; 图 6e, 6f 和 6g, 6h 分别表示 68°和 90°取向的情况, 由图可知, 图 6e, 6f 只有基面滑移, 图 6g, 6h 只有锥面滑移。Umakoshi 等<sup>[16]</sup>在研究 Ti<sub>3</sub>Al 单晶的塑性各向异性时, 单向压缩 4 种不同取向的 Ti<sub>3</sub>Al 单晶, 在光学显微镜下也观察到了类似本模

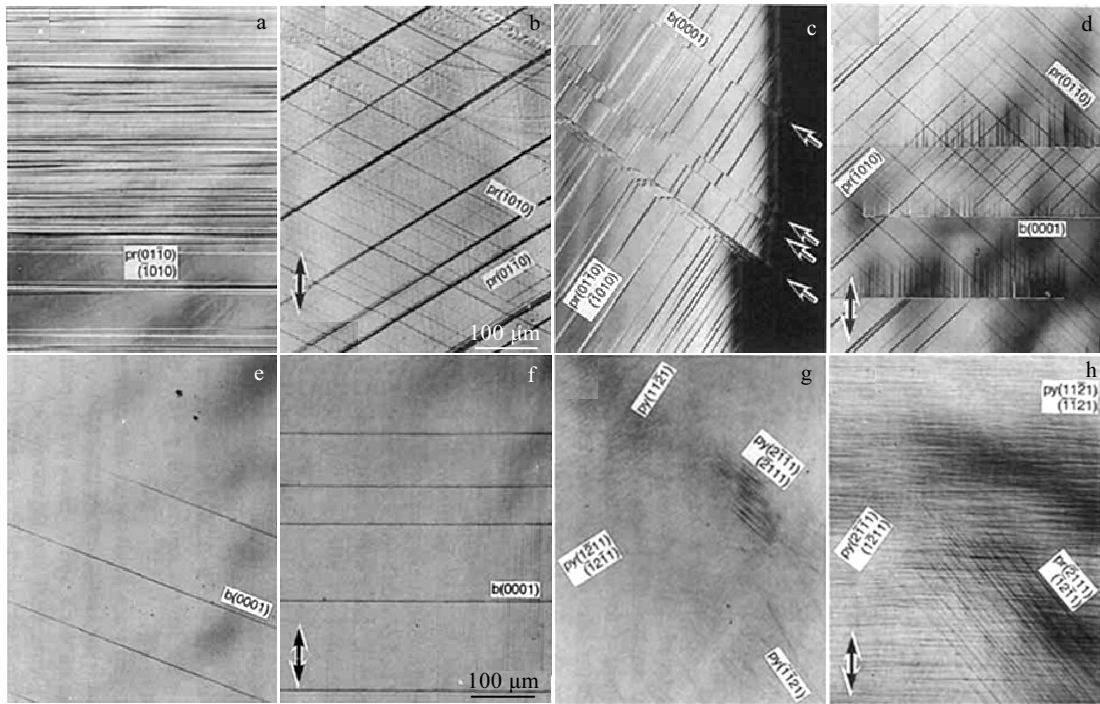


图 6 不同取向 Ti<sub>3</sub>Al 单晶的滑移系滑移情况

Fig.6 Gliding of slip systems of Ti<sub>3</sub>Al single crystal with different orientation angles<sup>[14]</sup>: (a, b) 0°; (c) 31°; (d) 51°; (e, f) 68°; (g, h) 90°

拟的滑移系启动结果。同样，Kishida 等<sup>[17]</sup>沿 *c* 轴方向拉伸 Ti<sub>3</sub>Al 单晶也只观察到了锥面滑移系滑移。与上述实验结果相比较，本研究的模拟结果基本与之一致。

Ti<sub>3</sub>Al 单晶的塑性变形与滑移系的滑移直接相关，本研究结果表明，基面滑移系和柱面滑移系的滑移方向均为  $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ ，且处在同一平面，只能提供 4 个独立的变形模式。变形如果要连续进行，则需要 5 个独立的变形模式<sup>[18]</sup>，而能够协调 *c* 轴方向变形的锥面滑移系只在压缩轴靠近 [0001] 方向时才启动，从而导致 Ti<sub>3</sub>Al 单晶各方向的变形无法协调，这可能是 Ti<sub>3</sub>Al 低温脆性的重要原因之一。

#### 4 结 论

1) 在滑移变形机制的基础上，可建立 D0<sub>19</sub> 结构 Ti<sub>3</sub>Al 单晶体的晶体塑性本构关系，利用该本构关系模拟不同取向 Ti<sub>3</sub>Al 单晶的单向压缩变形，模拟结果与实验结果基本一致，表明本文所建立模型可有效地描述 Ti<sub>3</sub>Al 单晶的塑性变形行为。

2) Ti<sub>3</sub>Al 单晶的取向强烈地影响各滑移系在变形中的启动。除了施密特因子极其不利的取向（施密特因子接近零）柱面滑移系不启动或者滑移较少之外，其它取向时柱面滑移系启动最为容易，且滑移量较大。基面滑移系启动较为困难，在相对于柱面滑移系取向

绝对占优的情况或者自身施密特因子较大时才启动。锥面滑移系启动最为困难，仅在加载轴靠近 [0001] 方向时才被激活。

#### 参考文献 References

[1] Appel F, Wagner R. *Materials Science and Engineering*[J], 1998, 22(5): 187  
 [2] Marketz W T, Fischer F D, Clemens H. *International Journal of Plasticity*[J], 2003, 19(3): 281  
 [3] Chen Yuyong(陈玉勇), Su Yongjun(苏勇君), Kong fantao(孔凡涛) et al. *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2014, 43(3): 757  
 [4] Harry Lipsitt A, Shechtman Dan, Schafrik Robert E. *Metallurgical Transactions A*[J], 1975, 6(11): 1991  
 [5] Kerans R J. *Metallurgical Transactions A*[J], 1984, 15(9): 1721  
 [6] Minonishi Yasuhide. *Philosophical Magazine A*[J], 1991, 63(5): 1085  
 [7] Umakoshi Y, Nakano T, Takenaka T et al. *Acta Metallurgica et Materialia*[J], 1993, 41(4): 1149  
 [8] Huang Wen(黄文), Wang Yang(汪洋), Ge Peng(葛鹏) et al. *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2010, 39(3): 469  
 [9] Zhao Meng(赵蒙), Li Ping(李萍), Li Chengming(李成铭) et

- al. Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2015, 44(4): 927
- [10] Sun Zhaoyang(孙朝阳), Guo Xiangru(郭祥如), Huang Jie(黄杰) *et al. Acta Metall Sin*(金属学报)[J], 2015, 51(3): 357
- [11] Tang Bin, Xie Shao, Liu Yi *et al. Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2015, 44(2): 267
- [12] Asaro R J, Needleman A. *Acta Metall*[J], 1985, 33(6): 923
- [13] Huang Y. *A User-Subroutine Incorporating Single Crystal Plasticity in the ABAQUS Finite Elementprogram*[D]. Boston: Harvard University, 1991
- [14] Inui H, Toda Y, Yamaguchi M. *Philosophical Magazine A*[J], 1993, 67(6): 1315
- [15] Zou J, Fu C L, Yoo M H. *Intermetallics*[J], 1995, 3(4): 265
- [16] Umakoshi Y, Nakano T, Sumimoto K *et al. Mat Res Soc Symp Proc*[J], 1993, 288: 441
- [17] Kishida K, Yoshikawa J, Inui H *et al. Acta Materialia*[J], 1999, 47(12): 3405
- [18] Groves G W, Kelly A. *Philosophical Magazine*[J], 1963, 8(8): 877

## Simulation of Plastic Deformation Behaviors of Ti<sub>3</sub>Al Single Crystal with Crystal Plasticity Finite Element Method

Zhao Wenjuan<sup>1</sup>, Tang An<sup>1</sup>, Lin Qiquan<sup>1</sup>, Ren Yuping<sup>2</sup>, Xu Junrui<sup>1</sup>, Song Binna<sup>3</sup>

(1. Xiangtan University, Xiangtan 411105, China)

(2. Northeastern University, Shenyang 110819, China)

(3. Soochow University, Suzhou 215021, China)

**Abstract:** A crystal plasticity constitutive model for Ti<sub>3</sub>Al single crystal was established based on slip deformation mechanism within the frame of crystal plasticity theory, and a program was compiled to describe it by means of secondary development of ABAQUS/UMAT user subroutine. Then we applied it to simulate the mechanical behaviors of Ti<sub>3</sub>Al single crystal with different orientations during unidirectional compression deformation. The activation of slip systems and the interaction between activation and orientation has been analyzed. The simulation results show that basal slip of (0001)<11 $\bar{2}$ 0>, prismatic slip of {10 $\bar{1}$ 0}<11 $\bar{2}$ 0>, and pyramidal slip of {11 $\bar{2}$ 1}<11 $\bar{2}$ 6> can be activated. However, there is dramatic difference on the ease or complexity of activation of various slip systems, which is due to the difference of critical shear stress and Schmid factor. It is difficult for basal slip and pyramidal slip to be activated because of their larger critical shear stress, which causes the activation of basal slip and pyramidal slip just with a larger Schmid factor. Pyramidal slip systems can be initiated only when compression axis is close to [0001] direction due to the maximum critical shear stress. Prismatic slip is much easier to be activated and also has the largest contribution to plastic deformation. Furthermore, the simulation results are in good agreement with the experimental results.

**Key words:** Ti<sub>3</sub>Al single crystal; crystal plasticity; dislocation; slip system; finite element; constitutive relationship

---

Corresponding author: Zhao Wenjuan, Ph. D., Associate Professor, School of Mechanical Engineering, Xiangtan University, Xiangtan 411105, P. R. China, Tel: 0086-731-58292454, E-mail: wjzhao1024@xtu.edu.cn