

大块金属玻璃中由热软化和自由体积产生诱导的剪切带行为比较

刘龙飞^{①②*}, 戴兰宏^②, 白以龙^②, 柯孚久^③

① 湖南科技大学湖南省机械设备健康维护重点实验室, 湘潭 411201;

② 中国科学院力学研究所非线性力学国家重点实验室, 北京 100190;

③ 北京航空航天大学理学院物理系, 北京 100083

* E-mail: wangerce@yahoo.com.cn

收稿日期: 2007-05-15; 接受日期: 2007-12-30

中国科学院重点项目(编号: KJCX-SW-L08)、国家自然科学基金(批准号: 10725211, 10721202)和湖南科技大学博士启动资金(编号: E50840)资助项目

摘要 比较研究了大块金属玻璃中由热软化和自由体积产生诱导的剪切带行为. 首先讨论了大块金属玻璃中剪切失稳的热软化和自由体积产生效应. 众所周知, 在普通金属材料中, 由塑性功转变来的热是其形成热塑剪切带的主要原因, 并且是与能量直接相关的. 与热软化相比, 自由体积产生是金属玻璃发生剪切失稳的另外一种主控因素, 由自由体积产生诱导的剪切失稳与由热软化诱导的剪切失稳完全不同, 失稳判据中不显含能量. 尤其是自由体积产生时的长波扰动总是不稳定的. 从而, 由自由体积产生和热软化耦合时的剪切失稳更像是由自由体积产生引发的. 同时, 在金属玻璃中, 复合自由体积产生提供了一种特殊和内在的剪切失稳特征生长时间. 剪切带的特征宽度由剪切带内相应的扩散过程控制: 热扩散和自由体积扩散. 作为粗略的估计, 用无量纲数 B , Deborah 数(表示失稳生长率和载荷时间关系)和 Lewis 数(表示不同扩散竞争)表示了热软化和自由体积产生在剪切带形成过程中的相对重要性. 这些结果对于理解大块金属玻璃剪切带形成机理具有非常重要的意义.

关键词

金属玻璃
剪切带
扩散
失稳

大块金属玻璃由于具有系列独特的物理、力学和化学性能, 被认为是具有广阔应用前景的新型材料之一, 从而引起了广大科学工作者研究的极大兴趣^[1-3]. 但是其在低温(如室温)高应力下的塑性变形都极易发生变形局部化, 形成剪切带, 进而在拉伸和简单剪切载荷下发生灾难性的破坏, 使得金属玻璃应用的可靠性变得难以预测, 成为了制约大块金属玻璃作为结构

材料推广应用的最大瓶颈之一^[4]. 因此, 揭示金属玻璃中剪切带形成机理, 得到其形成的清晰物理图像, 便成为了金属玻璃材料出现以来材料和力学科学工作者迫切希望解决的关键问题之一. 长期以来, 关于金属玻璃中剪切带的形成机理存在两种截然不同的假设: 自由体积产生^[5-8]和热软化^[9,10], 并且都有各自的理论分析、实验和数值计算结果依据. 例如, 在 20 世纪 70 年代初, Spaepen 及其合作者研究表明, 在没有发生温升的情况下, 剪切诱导的体胀也能够达到动态平衡, 诱导金属玻璃剪切带的形成^[5,7]. Pampillo^[11]和 Krishnanand 等人^[12]通过实验观察到了剪切带内原子结构变化的实验证据.

实验上, Bruck 等人^[13]和 Hufnagel 等人^[14]利用分离式 Hopkinson 压杆研究了一种 $Zr_{41.25}Ti_{13.75}Cu_{12.5}Ni_{10}Be_{22.5}$ 大块金属玻璃在应变率 $10^2 \sim 10^4 s^{-1}$ 范围内的动态压缩行为, 并使用高速差分热探测器测量了该金属玻璃材料在动态变形过程中的绝热热变化情况. 他们发现“在材料屈服前, 没有绝热热发生”. 但是, 在非均匀变形起始以后, 可以观察到明显的绝热温升现象. 在试样破坏以后, 剪切带内的温度可以接近于材料的熔点. 最近, Lewandowski 和 Greer^[15]利用在金属玻璃试样表面涂上易熔涂层的方法测量了金属玻璃剪切带内的温升. 结果表明, 在几个纳秒的时间内, 剪切带内的温升可以达到几千 K. 他们同时表示: “尽管如此, 剪切带的宽度似乎与温升无关. 这对于理解金属玻璃中剪切带及其相关软化机制非常重要, 因为这是限制大块金属玻璃应用的主要因素”. 在 Lewandowski 和 Greer^[15]发表研究结果的同一期《自然材料》上, Spaepen^[16]就此撰文质疑: “金属玻璃中的剪切带一定是热带吗?”

数值上, Falk 和 Shi^[17]对大块金属玻璃塑性变形进行的分子动力学模拟结果表明: “尽管在有限精度范围内没有测量到其密度的减小, 但是仍然发生了变形局部化”. 他们同时指出“这也可能是模拟中的人为现象”, “密度波动以及小的系统尺寸使我们难以探测到小于大约 3% 的密度变化. 然而, 这表明剪切带的形成对剪切带区内的密度变化可能是十分敏感的, 也可能不是导致局部化过程的最突出的细节”. 尽管如此, “仍然在应变局部化过程中观察到了纳米尺度空洞的动态形成”.

理论上, 现有的研究认为, 金属玻璃中的剪切失稳及局部化是由自由体积产生引起的, 如 1982 年 Steif 等人^[7], 2002 年 Huang 等人的报道^[8]. 最近, Dai 等人^[18]认为金属玻璃的剪切失稳与热软化和自由体积产生都有关.

从这些分析可以发现, 现有的研究对于金属玻璃中形成剪切带的真实物理图像如何还很不清楚, 并且存在着相当大的争议. 但是揭示大块金属玻璃剪切带形成的物理机制, 无论对于理解大块金属玻璃剪切带形成的物理图像, 还是为寻找和制备具有更好延性的大块金属玻璃结构材料提供科学依据, 都具有十分明显的科学意义. 同时, 该研究的开展将为进一步深入探讨大块金属玻璃塑性行为及推进其应用提供有价值的线索, 因此具有十分重要的科学价值和潜在的社会效益. 基于此, 本文比较研究了大块金属玻璃中剪切带形成的热软化效应和自由体积产生效应, 分别就这两种机制及其大小在剪切带不同阶段的重要性, 即剪切失稳判据、失稳生长以及剪切带特征等进行了分析.

1 控制参数和时间-空间尺度

根据连续介质力学方法, 包含热软化和自由体积产生的一维简单剪切控制方程组为

$$\rho \frac{\partial^2 \gamma}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 \tau}{\partial y^2}, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 \theta}{\partial y^2} + \frac{K \tau}{\rho C_v} \frac{\partial \gamma}{\partial t}, \quad (2)$$

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \xi}{\partial y^2} + G(\xi, \theta, \tau), \quad (3)$$

$$\tau = \tau(\gamma, \dot{\gamma}, \theta, \xi), \quad (4)$$

其中, t 为时间, y 为垂直于剪切方向的坐标轴, ρ 为密度, γ 为剪应变, $\dot{\gamma}$ 为剪应变率, τ 为剪应力, θ 为温度, ξ 为自由体积浓度, κ 为热扩散系数, C_v 为比热, K 塑性功转变为热的功热转换系数. D 为自由体积扩散系数, G 为自由体积的净变化率. 实际上, 方程(1)~(4)分别为动量方程、能量方程(热扩散)、自由体积扩散方程和热-塑性本构方程. 为了分析剪切失稳, 我们定义如下基于均匀变形时的参数: 应变硬化系数 $Q = (\partial \tau / \partial \gamma)$, 应变率硬化系数 $R = (\partial \tau / \partial \dot{\gamma})$, 热软化系数 $P = -(\partial \tau / \partial \theta)$, 自由体积软化系数 $F = -(\partial \tau / \partial \xi)$, 自由体积复合产生系数 $G_\xi = (\partial G / \partial \xi)$ (与 Davison 和 Stevens^[19]在 1972 年关于复合损伤的定义一致), 以及与自由体积相关的其他两个参数 $G_\theta = (\partial G / \partial \theta)$ 和 $G_\tau = (\partial G / \partial \tau)$. 基于现有的数据, 在后文中我们定性地假定所有这些参数都是大于零的, 虽然有些参数可能不总是正值. 比如, 有报道称一类铅基金属玻璃在应变率大于 $3 \times 10^3 \text{ s}^{-1}$ 时表现出应变率软化效应^[13]. 为了便于分析和估计剪切带的特性, 表 1 列出了大块金属玻璃中有关参数和变量的一些典型值. 值得注意的是, 自由体积净产生率 G 及其偏量 G_ξ 值的大小是从参考文献粗略估计的.

表 1 参数及其变化范围

性能		取值	参考文献
密度	ρ	$5.9 \times 10^3 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$	Conner 等人(2000) ^[20]
比热	c_p	$532 \text{ J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$, 在 θ_g	Conner 等人(2000) ^[20]
黏性(运动学)	ν	$\sim 10^{-3} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$, 在 1000 K, $\gg 10^{-3} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$, $\theta < \theta_g$	Conner 等人(2000) ^[20] Wang 等人(2004) ^[3]
热扩散系数	κ	$3.5 \times 10^{-6} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$	Conner 等人(2000) ^[20]
自由体积扩散系数	D	$< 10^{-16} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$	Wang 等人(2004) ^[3]
自由体积产生	G_ξ	$\sim > 10^0 \text{ s}^{-1}$	Huang 等人(2002) ^[8]
自由体积浓度	ξ	$\sim 10^{-2}$	Liu 等人(2005) ^[21,22] Huang 等人(2002) ^[8]
屈服应变	γ	10^{-2}	Conner 等人(2000) ^[20] Liu 等人(2005) ^[21-23]
应变率: 静态	$\dot{\gamma}$	$\sim < 10^{-3} \text{ s}^{-1}$	Conner 等人(2000) ^[20]
动态		$\sim 10^3 \text{ s}^{-1}$	Liu 等人(2005) ^[21,22]

对方程组(1)~(4)进行线性小扰动分析可以得到关于 α 的特征方程^[24]:

$$a_4 \alpha^4 + a_3 \alpha^3 + a_2 \alpha^2 + a_1 \alpha + a_0 = 0, \quad (5)$$

这里, α 为特征时间的倒数, 描述了扰动 $e^{\alpha t + iky}$ 是呈指数生长(当 α 具有正的实部)还是衰减(当所有 α 值的实部都是负值), 其中 k 为波数. 在热软化和自由体积产生耦合条件下, 方程(5)中的系数 a_i 分别为

$$a_4 = 1, \quad (6)$$

$$a_3 = [\beta + \rho C_v(Dk^2 - G_\xi) + \rho C_v G_\tau F] / \rho C_v, \quad (7)$$

$$a_2 = [k^2 \omega + \rho \beta(Dk^2 - G_\xi) + k^2 \rho \lambda G_\tau F + K \dot{\gamma} \rho G_\theta F] / \rho^2 C_v, \quad (8)$$

$$a_1 = k^2 [\omega(Dk^2 - G_\xi) + \lambda Q k^2 - K \tau G_\theta F] / \rho^2 C_v, \quad (9)$$

$$a_0 = k^4 \lambda Q(Dk^2 - G_\xi) / \rho^2 C_v, \quad (10)$$

其中 $\beta = K \dot{\gamma} P + \lambda k^2 + R C_v k^2$, $\omega = \lambda R k^2 + \rho C_v Q - K \tau P$.

在短波极限条件下(波数 $k \rightarrow \infty$), 均匀变形总是保持稳定. 这是因为此时特征方程具有以下系数:

$$a_4 = 1, \quad (11)$$

$$a_3 = (\lambda + R C_v + \rho C_v D) k^2 / \rho C_v, \quad (12)$$

$$a_2 = [\lambda R + \rho(R C_v + \lambda) D] k^2 / \rho^2 C_v, \quad (13)$$

$$a_1 = \lambda R D k^6 / \rho^2 C_v, \quad (14)$$

$$a_0 = \lambda Q D k^6 / \rho^2 C_v, \quad (15)$$

显然, 只有最后两个系数 a_1 和 a_0 具有 k 的最高项 k^6 . 因此, 此时 α 的解为

$$\alpha = -Q / R. \quad (16)$$

所以, 在极短波扰动条件下, 金属玻璃的均匀变形总是稳定的. 此时, 系统弛豫到稳定变形的特征时间为 $t_{RQ} = 1/|\alpha| = R/Q$, 是现有考虑条件下材料的内部特征时间尺度. 尤其值得注意的是, 在极短波扰动条件下, 与软化相关的参数, 如热软化系数 P , 自由体积软化系数 F , 以及自由体积复合产生率 G_ξ 都没有出现在特征方程中.

实际上, 包含在这个过程中的参数和变量暗含着几个时间和空间尺度, 相关的时间尺度分别为: 特征弛豫时间 $t_{RQ} = R/Q$, 外部施加载荷的特征时间 $t_{ex} = \gamma/\dot{\gamma}$ 和复合自由体积产生的特征时间 $t_G = 1/G_\xi$. 后面, 我们将发现, t_G 与自由体积产生导致的失稳生长密切相关. 由这些定义可知, $t_{RQ} \sim t_{ex}$. 从表 1 可以发现, 在准静态和动态载荷下, $t_{ex} = \gamma/\dot{\gamma}$ 分别在 10^1 和 10^{-5} s 的量级, $t_G = 1/G_\xi$ 在 10^0 s 量级, 并可能随着应变率的变化而不同. 重要的是, 从这些时间尺度可以导出一些时间相关的无量纲数. Deborah 数是最普遍和最重要的表示时间相关的无量纲数:

$$De = \frac{t_\tau}{t_{ex}} = \frac{\text{弛豫时间尺度}}{\text{观察时间尺度}}. \quad (17)$$

$De \ll 1$ 表示只能观察到本征弛豫的渐近状态; 但是当 $De \gg 1$ 时, 只能观察到本征弛豫的初始阶段. 显然, 只有当 $De \sim 1$ 即观察时间和弛豫时间可比时, 才能观察到整个弛豫过程.

对我们当前所考虑的情况来说, 以下两个 Deborah 数可能与我们的讨论相关, 第一个是

$$De = \frac{t_{RQ}}{t_{ex}} \sim O(1), \quad (18)$$

它表明弛豫到稳定变形的时间尺度与外加载荷的时间尺度可比; 第二个是

$$De_G = \frac{t_G}{t_{ex}} \sim \frac{\dot{\gamma}}{G_\xi \gamma}. \quad (19)$$

根据表 1 中所列参数的值, 对准静态过程来说, De_G 的量级可能为 $O(1)$; 而在动态载荷下, De_G 的量级可能远大于 $O(1)$. 因此, 如下文所示, 在准静态条件下, 剪切带偏向于由自由体积产生控制, 但在动态下可能就不明显. 我们需要再次强调的是, 此时的结果是基于表 1 中的数据估计的, 关于 G_ξ 的精确值需要进一步的研究. 否则, 难以澄清剪切带的形成路径. 另一方面, 在固定的时间尺度上(比如弛豫时间 t_{RQ}), 对应于三个不同的(黏性、热和质量)扩散过程存在着

三个长度尺度: $l_v^2 = \frac{\nu R}{Q} \gg l_k^2 = \frac{\kappa R}{Q} \gg l_D^2 = \frac{DR}{Q}$. 一般说来, 如表 1 所示, 动力学黏性 $\nu >$ 热扩散 $\kappa >$ 自由体积扩散 D . 此时, 上面提到的短波近似需满足

$$k^2 \gg \frac{1}{l_{\min}^2} \sim \frac{1}{Dt}. \quad (20)$$

同时, Lewis 数满足

$$Le = \frac{\kappa}{D} \gg 1. \quad (21)$$

(21)式表明, 在一定的时间尺度上, 与热扩散相关的特征长度尺度远大于自由体积扩散的特征长度尺度.

后文的研究会进一步表明, 这些时间和长度尺度将在金属玻璃剪切带形成的不同阶段不断地出现, 并扮演着非常重要的角色.

此外, 还存在着一个与剪切带过程中能量相关的无量纲数:

$$B = \frac{KP\tau}{\rho C_v Q} = \frac{K\tau\gamma}{\rho C_v \Delta\theta} \frac{P\Delta\theta}{Q\gamma}. \quad (22)$$

这个无量纲数表示在塑性变形过程中, 由塑性功 $\tau\gamma$ 转变来的热(导致为 $\Delta\theta$ 的温升)引起的热软化($P\Delta\theta$)效应与应变硬化效应之间的竞争关系.

这些时间和长度尺度以及无量纲数的含义, 在后面将会进一步讨论.

2 自由体积产生和热软化诱导的剪切带比较

2.1 剪切失稳

首先, 我们分别讨论由热软化和自由体积产生引起的剪切失稳. 在后文中, 为了简单, 我们分别用 T-失稳和 V-失稳代表由热软化和自由体积产生引起的剪切失稳.

不论是 T-失稳还是 V-失稳, 它们的特征方程都可以简化为关于 α 的三次方程:

$$\alpha^3 + a_2\alpha^2 + a_1\alpha + a_0 = 0. \quad (23)$$

按照 Routh-Hurwitz 稳定性准则, 只要下面三个不等式中的任何一个不成立, 失稳将发生, 即

$$a_2 > 0, \quad (24)$$

$$a_2 a_1 - a_0 > 0, \quad (25)$$

$$a_0 > 0. \quad (26)$$

在热软化条件下,

$$a_2 = \beta / \rho C_v = [K \dot{\gamma} P + \lambda k^2 + R C_v k^2] / \rho C_v, \quad (27)$$

$$a_1 = \omega k^2 / \rho^2 C_v = k^2 [\lambda R k^2 + \rho C_v Q - K \tau P] / \rho^2 C_v, \quad (28)$$

$$a_0 = \lambda Q k^4 / \rho^2 C_v. \quad (29)$$

从(27)~(29)式可知, 虽然失稳依赖于这些参数的复杂组合, 但在绝热条件下, 可以得到一个简单的失稳判据^[25]:

$$K \tau P > \rho C_v Q. \quad (30)$$

这正是无量纲数 $B > 1$ 的形式, 即为有名的白判据^[25]. 因此, T-失稳是一种与能量相关的失稳形式.

另一方面, 在自由体积产生条件下,

$$a_2 = (Dk^2 - G_\xi) + Rk^2 / \rho + G_\tau F, \quad (31)$$

$$a_1 = k^2 [Q + R(Dk^2 - G_\xi)] / \rho, \quad (32)$$

$$a_0 = k^2 Q (Dk^2 - G_\xi) / \rho. \quad (33)$$

显然, 方程(31)~(33)中 $(Dk^2 - G_\xi)$ 在失稳中起关键作用, 因为只有这一项才能改变这些系数的正负号. 此时, 只要 $(Dk^2 - G_\xi)$ 小于零, 失稳将会发生, 即

$$k^2 < G_\xi / D. \quad (34)$$

所以, 长波扰动 $k^2 < G_\xi / D$ 总是导致失稳, 这与热软化是截然不同的. 而且, 这时的失稳与能量无关, 但与所谓的自由体积复合产生 G_ξ 有关. 或者说, 自由体积的复合产生 G_ξ (具有时间倒数的量纲) 是引发失稳的驱动力, 而不是自由体积软化 F . 就这一点来说, 自由体积复合产生 G_ξ 在 V-失稳中的关键作用类似于损伤局部化中的类似作用^[26,27]. 对长波扰动 ($k \rightarrow 0$) 来说, 即使轻微的自由体积复合产生 G_ξ 也能触发失稳. 比如, 对一个小的测试样品 (10^{-3} m), 只要 $G_\xi > Dk^2 \sim 10^{-16} / 10^{-3 \times 2} \sim 10^{-10} \text{ s}^{-1}$, 也将发生失稳. 因此, 似乎自由体积产生比热软化更容易使金属玻璃发生剪切失稳.

现在, 我们回到热软化和自由体积产生耦合时的情况, 此时特征方程的系数如方程(6)~(10)所示. 与热软化时的情况一样, 耦合效应出现在系数 a_1 的 $\omega(Dk^2 - G_\xi)$ 项. 然而, 与热软化相比, 在系数 a_0 中有一个关键项 $(Dk^2 - G_\xi)$, 类似于自由体积产生时的情况. 所以, 对耦合情况来说, 失稳更可能是由自由体积产生引起的. 值得注意的是, 虽然在热软化和自由体积产生耦合时的控制方程组中包含了动量方程和能量方程, 但是按照方程(34)式, 失稳发生与否并不与热软化显式相关. 人们自然就会问: 难道热软化就对金属玻璃发生剪切失稳即剪切带的起始就没有影响了吗? 显然不是. 实际上, 在动态变形条件下, 热软化对失稳应该会有影响^[18].

2.2 剪切失稳的生长时间

一旦失稳发生, 剪切带生长的快慢就成为了关于剪切带形成的另一个关键问题. 再次, 我们从扰动近似来研究这个问题, 并分别估计其失稳后剪切带生长的特征时间.

对于 T-失稳, 剪切带生长的特征时间可用下式估计^[18,25]:

$$t_{\text{instability}} \approx 1/\alpha = \frac{R/Q}{(KP\tau)/(\rho C_V Q) - 1} = \frac{t_{\text{RQ}}}{B-1}. \quad (35)$$

显然, 在生长的初始阶段, 由于 $0 < B-1 \ll 1$, 此时生长非常缓慢. 然而, 当生长到一定阶段满足 $(B-1) \sim O(1)$ 时, 生长将被加速到弛豫时间尺度 t_{RQ} 的量级.

另一方面, 对于 V-失稳来说, 剪切带生长的特征时间为

$$t_{\text{instability}} \approx 1/\alpha = t_G = 1/G_\xi. \quad (36)$$

因此, 在这两种失稳条件下剪切带生长的特征时间是完全不同的. 从表 1 中的数据可知, V-失稳条件下剪切带生长的特征时间 t_G 大约在 10^0 s 的量级. 这与准静态实验中外加载荷的时间尺度可比, 但是对于动态实验的时间尺度 $t_{\text{ex}} \sim 10^{-5}$ s 而言显得太长. 于是, 与失稳发生时它们之间的区别联合起来一起考虑, 就可以描绘出金属玻璃发生剪切失稳形成剪切带的一个可能的图像: 首先, 由复合自由体积产生触发失稳并控制剪切带生长的早期阶段; 此后, 如果外加载荷的时间与内部时间尺度 t_G 相比足够长(比如准静态载荷), 并且没有足够的塑性功来触发失稳的话, 这时剪切带的形成完全由自由体积产生控制. 由于热软化能加速失稳, 随着塑性变形的增加, 在剪切带生长的后期阶段可能表现得像热塑剪切带的形式, 特别是在冲击形成的短载荷时间($\mu\text{s} \sim \text{ms}$)下(见方程(35)). 当然, 在这些估计中最难以确定的因素仍然是 $G(\xi)$.

下面我们从剪切带宽度估计来进一步探索金属玻璃发生剪切失稳形成剪切带的物理图像.

2.3 剪切带的宽度

由于现有对金属玻璃中剪切带的实验观察大多数是在剪切带完全形成以后进行的, 对剪切带宽度进行某些理论估计并与实验观察进行比较有益于理解其形成机制. 基于方程组(1)~(4), 后期稳态方程组和两种情况下方程组的类带解如下所示(为了便于比较, 将热软化和自由体积产生分别置于两栏).

T-剪切带:

$$\lambda \frac{\partial^2 \theta}{\partial y^2} + K\tau\dot{\gamma} = 0, \quad (37a)$$

$$\dot{\gamma} = g(\tau, \theta), \quad \frac{\partial \tau}{\partial y} = 0, \quad (37b)$$

$$y = \sqrt{\frac{\lambda}{2K\tau}} \int_{\theta}^{\theta_m} \frac{d\zeta}{\sqrt{\int_{\zeta}^{\theta_m} g(\tau, \eta) d\eta}}, \quad (37c)$$

V-剪切带:

$$D \frac{\partial^2 \xi}{\partial y^2} + G(\xi, \theta, \tau) = 0, \quad (38a)$$

$$\frac{\partial \tau}{\partial y} = 0, \quad (38b)$$

$$y = \sqrt{\frac{D}{2}} \int_{\xi}^{\xi_m} \frac{d\xi}{\sqrt{\int_{\xi}^{\xi_m} G(\eta, \theta, \tau) d\eta}}, \quad (38c)$$

其中 $\lambda = \rho C_v \kappa$ 为热传导系数, y 为垂直于剪切带的坐标, 下标 m 表示带中心的值. 很明显, 在稳态下, 热扩散和自由体积扩散是类似的. 然而, 两者的区别也是十分明显的, 即它们的被积函数不同, 其中一个为应变率(称外部时间尺度), 另外一个为自由体积净产生率 G (称内部时间尺度). 对这两种情况下剪切带宽度的表达式可以进一步简化为

$$\delta_T \sim \sqrt{\kappa \frac{\gamma^*}{\dot{\gamma}^*} \frac{\rho C_v \theta^*}{K \tau^* \gamma^*}} \sim \sqrt{\kappa \frac{\gamma^*}{\dot{\gamma}^*}}, \quad (39)$$

$$\delta_V \sim \sqrt{D \frac{\xi^*}{G^*}}, \quad (40)$$

其中“*”表示剪切带内的值. 从表 1 中的数据可知, δ_T 约为微米的量级, δ_V 约为纳米的量级. 现有的实验结果表明, 金属玻璃中剪切带的宽度在几纳米到几十纳米之间^[28]. 显然, 热塑剪切带的宽度要比金属玻璃中剪切带的宽度大得多, 自由体积产生诱导剪切带的宽度与实验结果相当, 这说明剪切带的形成主要是由自由体积产生引起的. 值得注意的是, 两者之比除了与各自不同扩散的时间尺度 $\gamma/\dot{\gamma}$ 和 ξ/G 有关外, 还与 Lewis 数密切相关. 对于耦合情况来说, 失稳似乎更可能是由自由体积产生引起, 但是热软化同样对金属玻璃中绝热剪切失稳起始及剪切带的形成有影响. 剪切带的宽度值 δ_{T+V} 可能位于两者之间, 即 $\delta_T > \delta_{T+V} > \delta_V$.

2.4 剪切带宽度的数值计算结果比较

究竟是热软化还是自由体积产生在大块金属玻璃剪切带形成中起主导作用, 虽然从失稳判据初步确认, 当自由体积浓度的复合增长率超过扩散时就能发生剪切失稳, 进而形成剪切带, 即自由体积产生所致. 但是现有的实验手段对与剪切带形成过程有关的一些关键参数还难以进行测量, 仅能够对剪切带形成后的宽度和剪切带内自由体积增加与否进行观察. 所以, 通过将计算得到的关于剪切带宽度等有关的结果与实验观察结果进行比较, 采用排除比较的方法反推其原因, 便成了当前的一种有效方法. 基于金属玻璃一维简单剪切控制方程组 (1)~(4), 本文就分别考虑热软化、自由体积产生和两者耦合软化时形成的剪切带情况进行了数值计算, 以希得到大块金属玻璃中剪切带形成的真实物理图像.

在只考虑热软化的计算时, 只给定自由体积浓度的初值, 忽略其演化. 在自由体积产生的计算过程中, 温度始终保持不变. 而热和自由体积产生耦合软化时, 两者的演化都要考虑. 三种情况下的计算结果如图 1 所示. 可以很明显的看出, 三种情况下的剪切带具有各自明显的特征.

首先, 热软化形成的剪切带宽度要比自由体积产生和耦合软化时形成的剪切带宽度宽得多. 其中, 自由体积产生和耦合软化时几乎完全一样, 剪切带宽度大约为 $w \approx 10 l_D \approx 10 \text{ nm}$, 这与实验观察到的剪切带宽度基本一致. 而热软化形成的剪切带宽度却宽许多, 大约为 $w \approx 250 l_D \approx 250 \text{ nm}$, 显然与实验观察结果相去甚远. 从这一点可以反推, 金属玻璃中剪切带的形成不可能是由热软化占主导的, 而是自由体积产生起主导作用. 从剪切带内应变的大小来看, 在相同的整体塑性变形时, 热软化和自由体积产生耦合时带内的应变要比只考虑自由体积产生时大, 说明热主要是对剪切带形成发展起了一定的促进作用. 其次, 在相同的整体塑性变形时, 自由体积产生和耦合软化时剪切带内的应变要比热软化时大, 说明自由体积产生的软化要比热的软化作用更强, 更易使金属玻璃材料发生剪切带损伤失效, 这也是宏观上金属玻璃容易发生脆性断裂的原因之一. 从计算自由体积产生时形成的剪切带宽度和实验观察到的剪切带宽度结果基本一致, 再一次表明自由体积产生在金属玻璃剪切带的形成中起主导作用. 而热软化时的剪切带宽度与实验观察结果相去甚远, 耦合时带内的应变要比自由体积产生时大, 说明热主要是对剪切带形成、发展起了一定的促进作用.

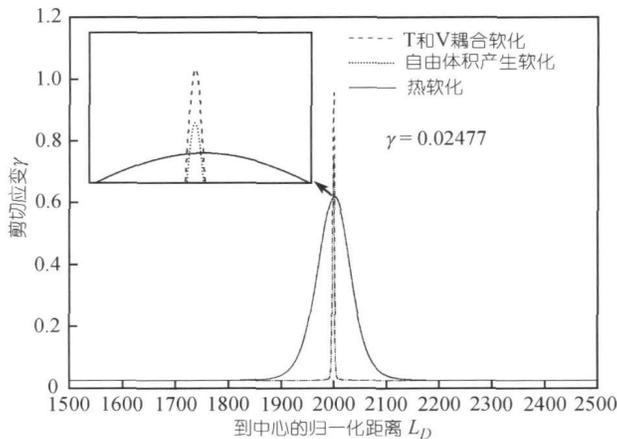


图1 热软化 T、自由体积产生软化 V 和两者(T 和 V)耦合三种情况下形成剪切带的计算结果

3 讨论

由热软化和自由体积产生诱导形成剪切带机制的主要区别可以总结如下.

(i) 热塑剪切失稳及其生长率由热软化控制, 是与能量相关的, 即 $B > 1$; 但是自由体积产生诱导剪切失稳是由复合自由体积产生 ($G_{\xi} > Dk^2$) 控制的, 与能量无关. 同时, 自由体积失稳判据 $G_{\xi} > Dk^2$ 表明, 长波 ($k^2 < G_{\xi} / D$) 扰动总会导致失稳. 因此, V-失稳似乎比 T-失稳更容易发生. 而且, T 和 V 耦合时的失稳模式表现得更像 V-失稳. 需要说明的是, 我们的分析与 Huang 等人^[8] 的模型不同之处在于, 他们只进行了准静态变形条件下的分析, 而忽略了温度对于金属玻璃塑性变形的影响. 所以, 他们的模型难以提供对于金属玻璃中具有不同时间尺度和温度效应剪切带形成的比较和深入理解. 而且, 已有的研究表明, 大块金属玻璃中剪切带的形成是一种

率依赖过程^[21,22,29-33]. 尤其是, 在动态实验试样断口观察到的比静态下更为显著的熔化特征^[20-22]表明, 在静态和动态下剪切带形成的温度效应是不同的. 因此, 本文关于大块金属玻璃中由热软化和自由体积产生诱导剪切带形成的耦合和比较研究具有重要的科学意义.

(ii) 在剪切带形成过程中, V-失稳和 T-失稳具有不同的特征时间尺度. 特别是, V-失稳有其自己生长的“时钟”, 即 $t_G = 1/G\xi$; 而 T-失稳生长的特征时间与失稳程度 $t_{RQ}/(B-1)$ 有关. 因此, Deborah 数

$$De_G = \frac{t_G}{t_{ex}} \sim \frac{\dot{\gamma}}{G\xi\gamma} \sim \begin{cases} < O(1) & \text{动态} \\ O(1) & \text{静态} \end{cases}$$

可能是 V-失稳可观察性的度量参数.

简单说来, 关于金属玻璃中剪切失稳和生长的结果如图 2 所示, 为了简化, 假设失稳发生在长波和绝热条件下. 当 $B \gg 1$ 时, 剪切带更可能是由热软化引起的, 如图 2 的上部分所示. 另一方面, 虽然在长波条件下 V-失稳在整个图平面内都能发生, 但是只有当 $De_G \sim < 1$ 时, V-失稳在加载时间内才变得明显, 如图 2 左下部所示.

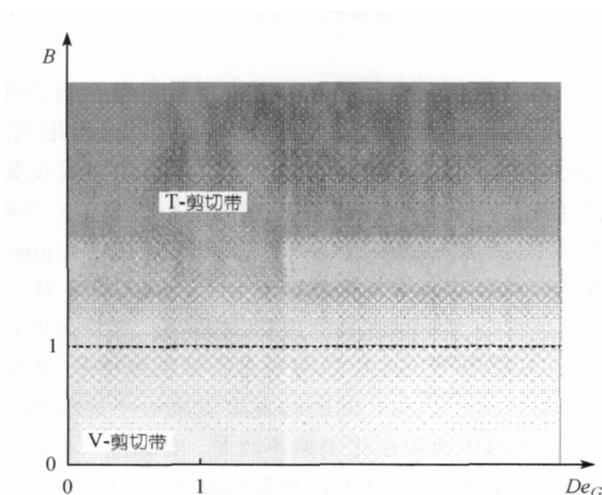


图 2 由热软化(用 B 表征)和/或复合自由体积产生(用 De_G 表征)诱导的剪切带

(iii) 完全形成后的剪切带宽度 δ 由带内相应的扩散过程控制: 热扩散和自由体积扩散, 分别可以估计为 $\delta_T \sim \sqrt{\kappa \frac{\gamma^*}{\dot{\gamma}^*}}$ 和 $\delta_V \sim \sqrt{D \frac{\xi^*}{G^*}}$. 同时, 它们依赖的时间尺度是不同的: 前者依赖于外部时间, 后者则依赖于它自己的时间尺度 ξ/G . 虽然两者的时间差别明显, 但是作为粗略的估计, Lewis 数 $Le = \frac{\kappa}{D} \gg 1$ 能较好地表示两者带宽之间的差异.

在考虑大块金属玻璃各种参数和变量的大小以后, 关于大块金属玻璃中剪切带形成的可能路径列于表 2 中.

表 2 大块金属玻璃中剪切带形成的可能路径^{a)}

	失稳	生长	完全宽度
T-模式	$B > 1$ 绝热	$t_T \sim \frac{\gamma}{\dot{\gamma}(B-1)} \sim \begin{cases} 10^{-5} \text{ s} & \text{动态} \\ 10^1 \text{ s} & \text{静态} \end{cases}$ (如果 $B-1 \sim O(1)$)	$\delta_T \sim \sqrt{k \frac{\gamma}{\dot{\gamma}}} \sim \begin{cases} 10^{-5} \text{ m} & \text{动态} \\ 10^{-2} \text{ m} & \text{静态} \end{cases}$ [?]
T+V-模式	$G_\xi > Dk^2$	$\sim 10^{-5} \text{ s}$ $\begin{cases} \text{动态} \\ \text{静态} \end{cases}$	$\delta_V < \delta_{T+V} < \delta_T$ [Y]
V-模式	$G_\xi > Dk^2$	$t_G \sim \frac{1}{G_\xi} \sim 10^0 \text{ s}$ $\begin{cases} t_d \sim 10^{-5} \text{ s} & \text{动态} \\ < t_s \sim 10^1 \text{ s} & \text{静态} \end{cases}$ [?]	$\delta_V \sim \sqrt{D \frac{\xi}{G}} \sim 10^{-8} \text{ m}$ [Y]

a) [Y] 可观察, [?] 难以观察

(iv) 数值计算结果表明, 热软化形成的热塑剪切带宽度要比实验观察到的剪切带宽得多, 严重偏离实验结果, 说明热软化不可能是金属玻璃中剪切带形成的主要原因. 自由体积产生以及热和自由体积产生耦合诱导剪切带的宽度与实验观察结果接近, 在 10 nm 量级, 这说明自由体积产生对金属玻璃中剪切带形成起主导作用, 是金属玻璃发生剪切失稳进而形成剪切带的主要原因. 而耦合时带内的应变要比自由体积产生时大, 说明热主要是对剪切带形成、发展起了一定的促进作用.

(v) 正如前文所述, 在本文的估计中最难以确定的参数是复合自由体积产生 $G(\xi)$. 在我们比较研究的理论分析中, 采用的是自由体积产生 G 及其导数的一般形式. 在目前, 关于 G 的唯象模型主要是基于 Spaepen 等人的自由体积模型^[5,7,8], 其具体形式及其推导过程见参考文献[5]. 虽然 Spaepen 等人发展的关于金属玻璃变形的自由体积模型是一个唯象模型, 但是它能较好地解释一些实验结果^[34-38], 得到了大多数研究者的认同. 后来, Argon^[6]认为, 金属玻璃的塑性变形是剪切应力下围绕自由体积区发生热激活剪切相变的结果. 基于任何令人满意的塑性理论除应力和应变外必须包含动力学态变量的思想, Langer 及其合作者最近提出了金属玻璃塑性变形的剪切相变区(STZ)模型^[39]. STZ 模型与自由体积模型^[5-7]最基本的差别在于它在零度下依然有效. 从一个态到另外一个态之间的转变将贡献一个应变增量, 并控制了金属玻璃的力学性能, 但与转变相关的自由体积演化仍然不清楚. 实际上, 本文的重点并不在 G 的细节上. 这些估计不影响本文提出的比较研究大块金属玻璃中剪切带形成的方法. 我们主要是通过研究不同软化机制下形成剪切带的特征, 并与实验比较, 从而反推其形成机制, 是一种新的方法或思想.

总的说来, 大块金属玻璃中由自由体积产生诱导的剪切失稳更容易发生, 但是可能生长得较慢, 并且形成的剪切带似乎窄些, 与实验观察结果基本一致. 然而, 热软化诱导的剪切失稳只有在能量判据($B > 1$)满足以后才能发生, 但是它能够被加速到与外载时间一致, 即更快些, 形成的剪切带也比自由体积产生时要宽, 严重偏离实验观察结果, 因而金属玻璃中形成的剪切带不可能是热塑剪切带. 在热软化和自由体积产生耦合时, 剪切失稳几乎总是从复合自由体积产生开始(表2左下边的虚线), 在准静态下(表2下边的虚线)满足条件 $De_G \sim < 1$ 时沿自由体积产生控制的方式(直线)生长. 但是, 在冲击载荷下, 剪切带的生长和形成是在热软化和自由体积产生共同作用下完成的(如表2虚线的向上分叉的部分).

正如文中提到的, 要得到大块金属玻璃中剪切带形成的精确物理图像, 还需对复合自由体积产生 $G(\xi)$ 进行进一步的研究.

4 结论

本文比较研究了大块金属玻璃中由热软化、自由体积产生和两者耦合软化时诱导的剪切带行为, 可以得到以下结论.

(i) 利用小扰动方法研究了三种条件下(热软化、自由体积产生和前两者耦合软化)金属玻璃剪切变形的稳定性, 分别得到了三种情况下的剪切失稳判据.

(ii) 得到了一系列与金属玻璃剪切带形成相关的参数、特征时间尺度和空间尺度, 以及表示它们之间相互关系的无量纲数.

(iii) 揭示了无量纲 Deborah 数与金属玻璃中是形成热塑剪切带还是自由体积剪切带之间的关系, 描绘了关于金属玻璃中剪切失稳和生长的示意图.

(iv) 分析和计算了各种条件下金属玻璃形成剪切带的宽度. 与实验观察结果比较表明, 自由体积产生是金属玻璃中形成剪切带的主要原因, 绝热热效应对这个过程起了一定的促进作用.

参考文献

- 1 Inoue A, Zhang T, Masumoto T, et al. La-Al-Ni amorphous alloys with a wide supercooled liquid region. *Mater Trans JIM*, 1989, 30: 965—972
- 2 Johnson W L. Bulk glass-forming alloys: Science and technology. *MRS Bull*, 1999, 24: 42—56
- 3 Wang W H, Dong C, Shek C H. Bulk metallic glasses. *Mater Sci Eng R*, 2004, 44: 45—89
- 4 Ashby M F, Greer A L. Metallic glasses as structural materials. *Scripta Mater*, 2006, 54: 321—326
- 5 Spaepen F. A microscopic mechanism for steady state inhomogeneous flow in metallic glasses. *Acta Metall*, 1977, 25: 407—415
- 6 Argon A. Plastic deformation in metallic glasses. *Acta Metall*, 1979, 27: 47—58
- 7 Steif P S, Spaepen F, Hutchinson J W. Strain localization in amorphous metals. *Acta Metall*, 1982, 30: 447—455
- 8 Huang R, Suo Z, Prevost J H, et al. Inhomogeneous deformation in metallic glasses. *J Mech Phys Solids*, 2002, 50: 1011—1027
- 9 Leamy H J, Chen H S, Wang T T. Plastic flow and fracture of metallic glass. *Metall Trans*, 1972, 3: 699—708
- 10 Liu C T, Heatherly L, Easton D S, et al. Test environments and mechanical properties of Zr-base bulk amorphous Alloys. *Metall Mater Trans A*, 1998, 29: 1811—1820
- 11 Pampillo C A. Localized shear deformation in a glassy metal. *Scripta Metall*, 1972, 6: 915—918
- 12 Krishnanand K D, Cahn R W. Recovery from plastic deformation in a Ni/Nb alloy glass. *Scripta Metall*, 1975, 9: 1259—1261
- 13 Bruck H A, Rosakis A J, Johnson W L. The dynamic compressive behavior of beryllium bearing bulk metallic glasses. *J Mater Res*, 1996, 11: 503—511
- 14 Hufnagel T C, Jiao T, Li Y, et al. Deformation and failure of $Zr_{57}Ti_5Cu_{20}Ni_8Al_{10}$ bulk metallic glass under quasi-static and dynamic compression. *J Mater Res*, 2002, 17: 1441—1445
- 15 Lewandowski J J, Greer A L. Temperature rise at shear bands in metallic glasses. *Nat Mater*, 2006, 5: 15—18
- 16 Spaepen F. Must shear band be hot? *Nat Mater*, 2006, 5: 7—8
- 17 Falk M L, Shi Y. Strain localization in a molecular-dynamics model of a metallic glass. In: *Supercooled Liquids*,

- Glass Transition and Bulk Metallic Glasses. Pittsburgh PA: Mat Res Soc Proc, 2003. 754, CC6.20: 1
- 18 Dai L H, Yan M, Liu L F, et al. Adiabatic shear banding instability in bulk metallic glasses. *Appl Phys Lett*, 2005, 87: 141916
 - 19 Davison L, Stevens A L. Continuum measures of spall damage. *J Appl Phys*, 1972, 43: 988—994
 - 20 Conner R D, Dandliker R B, Scruggs V, et al. Dynamic deformation behavior of W-fiber/metallic-glass matrix composites. *Int J Impact Eng*, 2000, 24: 435—444
 - 21 Liu L F, Dai L H, Bai Y L, et al. Characterization of rate-dependent shear behavior of Zr-based bulk metallic glass using shear-punch testing. *J Mater Res*, 2005, 21: 153—160
 - 22 Liu L F, Dai L H, Bai Y L, et al. Initiation and propagation of shear bands in Zr-based bulk metallic glass under quasi-static and dynamic loadings. *J Non-Cryst Solids*, 2005, 351: 3259—3270
 - 23 Liu L F, Dai L H, Bai Y L, et al. Behavior of multiple shear bands in Zr-based bulk metallic glass. *Mater Chem Phys*, 2005, 93: 174—177
 - 24 Bai Y, Dodd B. *Adiabatic Shear Localization: Occurrence, Theories and Applications*. Oxford: Pergamon Press, 1992
 - 25 Bai Y L. Thermo-plastic instability in simple shear. *J Mech Phys Solids*, 1982, 30: 195—207
 - 26 Bai Y L, Xia M F, Ke F J, et al. Damage field equation and criterion for damage localization, in rheology of bodies with defects. In: Wang R, ed. *Proceeding of IUTAM Symposium*. Dordrecht: Kluwer, 1998. 55
 - 27 Bai Y L, Bai J, Li H L, et al. Damage evolution, localization and failure of solids subjected to impact loading. *Int J Impact Eng*, 2000, 24: 685—701
 - 28 Zhang Y, Greer A L. Thickness of shear bands in metallic glasses. *Appl Phys Lett*, 2006, 89: 071907
 - 29 Mukai T, Nieh T G, Kawamura Y, et al. Dynamic response of a $\text{Pd}_{40}\text{Ni}_{40}\text{P}_{20}$ bulk metallic glass in tension. *Scripta Mater*, 2002, 46: 43—47
 - 30 Schuh C A, Nieh T G. A survey of instrumented indentation studies on metallic glasses. *J Mater Res*, 2004, 19: 46—57
 - 31 Jiang W H, Atzmon M. Rate dependence of serrated flow in a metallic glass. *J Mater Res*, 2003, 18: 755—757
 - 32 Dai L H, Liu L F, Yan M, et al. Serrated plastic flow in a Zr-based bulk metallic glass during nanoindentation. *Chin Phys Lett*, 2004, 21: 1593—1594
 - 33 Liu L F, Dai L H, Bai Y L, et al. Strain rate-dependent compressive deformation behavior of Nd-based bulk metallic glass. *Intermetallics*, 2005, 13: 827—832
 - 34 Donovan P E, Stobbs W M. The structure of shear bands in metallic glass. *Acta Metall*, 1981, 29: 1419—1436
 - 35 Pekarskaya E, Kim C P, Johnson W L. In-situ transmission electron microscopy studies of shear bands in a bulk metallic glass based composite. *J Mater Res*, 2001, 16: 2513—2518
 - 36 Li J, Wang Z L, Hufnagel T C. Characterization of nanometer-scale defects in metallic glasses by quantitative high-resolution transmission electron microscopy. *Phys Rev B*, 2002, 65: 144201
 - 37 Flores K M, Schuh D, Dauskardt R H, et al. Characterization of free volume in a bulk metallic glass using positron annihilation spectroscopy. *J Mater Res*, 2002, 17: 1153—1161
 - 38 Lu J, Ravichandran G. Pressure dependent flow behavior of $\text{Zr}_{41.2}\text{Ti}_{13.8}\text{Cu}_{12.5}\text{Ni}_{10}\text{Be}_{22.5}$ bulk metallic glass. *J Mater Res*, 2003, 18: 2039—2049
 - 39 Falk M L, Langer J S. Dynamics of viscoplastic deformation in amorphous solids. *Phys Rev E*, 1998, 57: 7192—7205