

非晶合金多重剪切带协同演化行为

陈艳 戴兰宏*

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

摘要 块体非晶合金(也称金属玻璃)是近年涌现的一类新型结构材料, 因具有优异的力学性能, 在国防、空天等领域显示出广阔的应用前景。然而, 室温下该类材料的变形极易形成纳米尺度剪切带, 而剪切带的快速扩展往往导致材料的宏观脆性破坏, 从而极大地限制其广泛的工程应用。因此, 该领域广泛关注的核心科学问题是: 纳米尺度剪切带形成与演化动力学。本文以 Zr 基非晶合金为研究对象, 系统研究弯曲载荷下多重剪切带群体演化行为。不同厚度的非晶合金弯曲实验表明, 在试样的拉伸端和压缩端涌现按一定间距排布的多重剪切带, 两端的剪切带呈现不对称行为并强烈依赖试样的特征尺寸。基于非晶合金自由体积本构模型, 数值分析了弯曲载荷下试样厚度及自由体积分布对多重剪切带演化行为的影响。进一步, 给出了剪切带形核与扩展竞争的物理机制。

关键词 块体非晶合金, 多重剪切带, 剪切带间距, 剪切错动

1 引言

块体非晶合金(也称金属玻璃)作为近几十年来材料科学领域的“新贵”, 因其优越的力学性能以及广阔的应用前景而备受青睐。然而, 与传统合金的塑性位错机制不同, 块体非晶合金通过纳米尺度的剪切带容纳塑性变形, 表现出极低的室温塑性, 极大地抑制了其作为工程结构材料的应用^[1-4]。剪切带作为裂纹的前兆, 其形成与演化行为对于理解非晶合金的破坏机理, 调控宏观塑性以及提高结构稳定性至关重要。

块体非晶合金的宏观塑性与剪切带形成与演化密切相关。在拉伸载荷下, 块体非晶合金中生成少数剪切带, 主剪切带的快速发展演化导致材料以准脆性的方式发生断裂^[5]。然而, 在约束载荷下, 如压缩、压痕和弯曲, 剪切带的相互交割促使多重剪切带的萌生, 使块体非晶合金表现出显著的塑性流动^[6-9]。块体非晶合金多重剪切带的演化由剪切带间距和剪切错动表征, 且多重剪切带的这些特征尺寸与样品的几何尺寸及加载应变密切相关^[8-10]。Conner 等^[8, 9]开展了弯曲载荷下非晶合金的多重剪切带行为研究。他们通过将剪切带看作 II 型裂纹, 建立了剪切带间距和错动对样品几何尺寸和弯曲曲率的依赖关系。随后, Ravichandran 和 Molinari^[10]发展了新的模型, 通过引入一个实验拟合的比例因子来描述剪切带间距。Yang 等人基于对称弯曲数值预测了剪切带间距与试样厚度成正比关系^[11]。值得注意的是, 这些工作没有考虑能反映非晶合金固有特征的本构和拉压不对称等效应。

* 作者 E-mail: lhdai@lnm.imech.ac.cn

本文针对块体非晶合金弯曲载荷下的剪切带行为开展了实验及数值分析。通过 Vit1(Zr41.2Ti13.8Cu10Ni13.5Be22.5)块体非晶合金的四点弯曲实验,得到了不同厚度试样的剪切带间距及错动的演化规律。进一步,通过数值分析,研究了拉压端多重剪切带随着试样厚度及初始自由体积分布的变化规律,揭示了其背后的物理机制。

2 四点弯曲实验及结果

我们选取 Vit1 块体非晶合金作为研究对象开展四点弯曲实验。Vit1 样品被切割为长 35mm、宽 2mm,厚度不等 (0.7mm、1.0mm、1.2mm)的薄板。为了便于微观观测,我们对关注的变形区域进行了机械抛光。四点弯曲原位加载实验在扫描电镜 (SEM, FEI-Sirion NC microscope) 下进行,常温加载速率为 0.033mm/min,通过 SEM 实时捕捉加载中剪切带的形核和发展过程。实验观察发现,剪切带从样品外边缘开始形核且呈现周期性的分布,如图 1 所示。样品拉伸和压缩端剪切带主要表现以下特点:(1)剪切带分布均匀,压缩端较拉伸端剪切带分布更密集;(2)在拉压两端,沿着剪切带均有明显的剪切错动,且沿着拉伸剪切带的剪切错动更显著。通过捕捉不同厚度试样在不同弯曲曲率下的剪切带形貌分布,发现无论是在拉伸端还是压缩端,剪切带间距随着样品尺寸的减小而减小;剪切错动随着样品厚度的增大而增大。

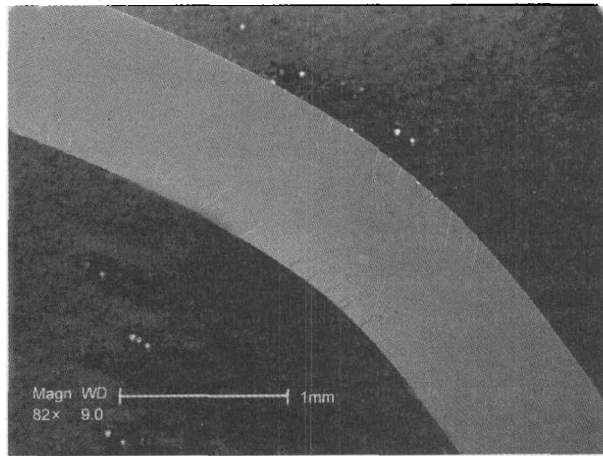


图1 Vit-1 非晶合金弯曲载荷下的多重剪切带形貌

3 多重剪切带演化理论及数值模拟

根据热力耦合的软化机制,块体非晶合金的剪切带起源与自由体积和热的演化密切相关^[12,13]。在该过程中,自由体积聚集被认为发挥主导作用,局部温升主要发生在剪切带形成后期起促进作用。因此,本文忽略热的影响,仅引入自由体积这一本征内变量进行讨论。在非晶合金中,原子间的重排,伴随着自由体积的产生和湮灭,引起局部的剪切应变^[14-16]。在 1977 年, Spaepen 基于应力激发的自由体积产生和自由体积湮灭之间的竞争,发展了稳

态非均匀流动模型^[17]。在该模型中, 塑性流动和自由体积演化均由剪应力驱动。通过引入第二应力不变量 J_2 , 可将这个模型扩展到多轴应力状态^[18, 19], 其中塑性流动方程表示为

$$\dot{\epsilon}_{ij}^p = \exp\left(-\frac{1}{V_f}\right) \sinh\left(\frac{\sigma_e}{\sigma_0}\right) \frac{s_{ij}}{\sigma_e} \quad (1)$$

式中, $V_f = \bar{V}_f / \alpha V^*$ 为退化的自由体积, 其中 \bar{V}_f 是平均自由体积, α 和 V^* 分别为原子叠加几何因子和原子硬球体积; 应力偏量和有效应力分别表示为 $s_{ij} = \sigma_{ij} - \sigma_{kk} \delta_{ij} / 3$ 和 $\sigma_e = \sqrt{3s_{ij}s_{ij}} / 2$; $\sigma_0 = 2k_B T / \Omega$ 是参考应力, 其中 k_B 是玻尔兹曼常数, T 为绝对温度, Ω 为原子体积。

作为结构无序度的表征参数, 外加应力将原子挤压到一个比自己体积小的空间从而产生自由体积; 同时原子的一系列跳跃引起自由体积的湮灭。考虑自由体积的产生与湮灭的速率过程, 其演化行为可由下面方程表征

$$\dot{V}_f = \frac{1}{\alpha} \exp\left(-\frac{1}{V_f}\right) \left[\frac{\sigma_0}{S\beta V_f} \left[\cosh\left(\frac{\sigma_e}{\sigma_0}\right) - 1 \right] - \frac{1}{n_d} \right] \quad (2)$$

式中, $\beta = V^* / \Omega \sim 1$, $S = E / 3(1 - \nu)$ 表示 Eshelby 因子, 其中 E 为弹性模量, ν 为泊松比, n_d 为湮灭相当于原子硬球体积的自由体积所需要的原子跳跃数, 取值为 3~10。

非晶合金的自由体积本构模型可由公式(1)~(2)进行描述。自由体积的初始分布将对非晶合金的变形产生重要的影响^[14, 20]。由于退火过程或热量的波动等原因, 可以引起非晶合金内自由体积的非均匀分布, 从而激发材料的非均匀变形。假设自由体积分布服从高斯分布^[14, 20], 即

$$V_{f0}(x, y) = \delta \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{\Delta_x^2} - \frac{(y-y_0)^2}{\Delta_y^2}\right) \quad (3)$$

式中, δ 为自由体积扰动幅度; (x_0, y_0) 是样品内随机的点坐标; Δ_x 和 Δ_y 为自由体积特征分散宽度, 表征自由体积分散度。 Δ_x 或 Δ_y 越大, 表征样品内部自由体积分布越分散或越均匀。

将上述本构通过编写 VUMAT 程序嵌入到有限元软件 ABAQUS 中。通过数值模拟的方法研究对于不同样品厚度及初始自由体积分布的非晶合金弯曲下的剪切带行为。针对平面应变问题, 建立长厚比 (1:t) 分别为 4:1、6:1 和 12:1 的长方形薄板试样; 自由体积分布可通过参数 Δ_x 和 Δ_y 来进行调整。Vt1 的相关力学和材料参数如下^[18, 19]: 弹性模量 $E = 96 \text{ GPa}$, 泊松比 $\nu = 0.36$, $k_B = 1.38 \times 10^{-23} \text{ J/K}$, $\Omega = 2.34 \times 10^{-29} \text{ m}^3$, $T = 300 \text{ K}$, $n_d = 3$, $\alpha = 0.15$, $\beta = 1$, $\delta = 0.1$ 。

4 结果与讨论

4.1 剪切带间距随试样厚度的变化

通过数值模拟可以得到试样在弯曲载荷下的剪切带形貌演化。在外加载荷作用下, 试样内的自由体积迅速增加聚集, 导致材料局部粘性迅速下降, 从而形成应变高度集中的剪切

条带。图2给出了三种不同厚度试样在弯曲下的剪切带形貌图。由图2可以发现：(1)剪切带从拉压端的自由边缘开始形核，向中性轴扩展，且相互交割，形成按一定间距分布的多重剪切带；(2)随着剪切带的形成，拉压端自由面出现剪切错动；(3)拉压端剪切带呈现不对称行为，压缩端剪切带更为密集；(4)随着试样厚度的减小，剪切带分布更均匀。这些现象与实验所观察结果一致。从试样内的自由体积浓度分布可以发现，在厚度较大的样品内，各点的自由体积浓度差异较大，意味着塑性应变更集中；而在小厚度样品中，自由体积浓度分布差异较小，表明试样内的塑性形变更为均匀。

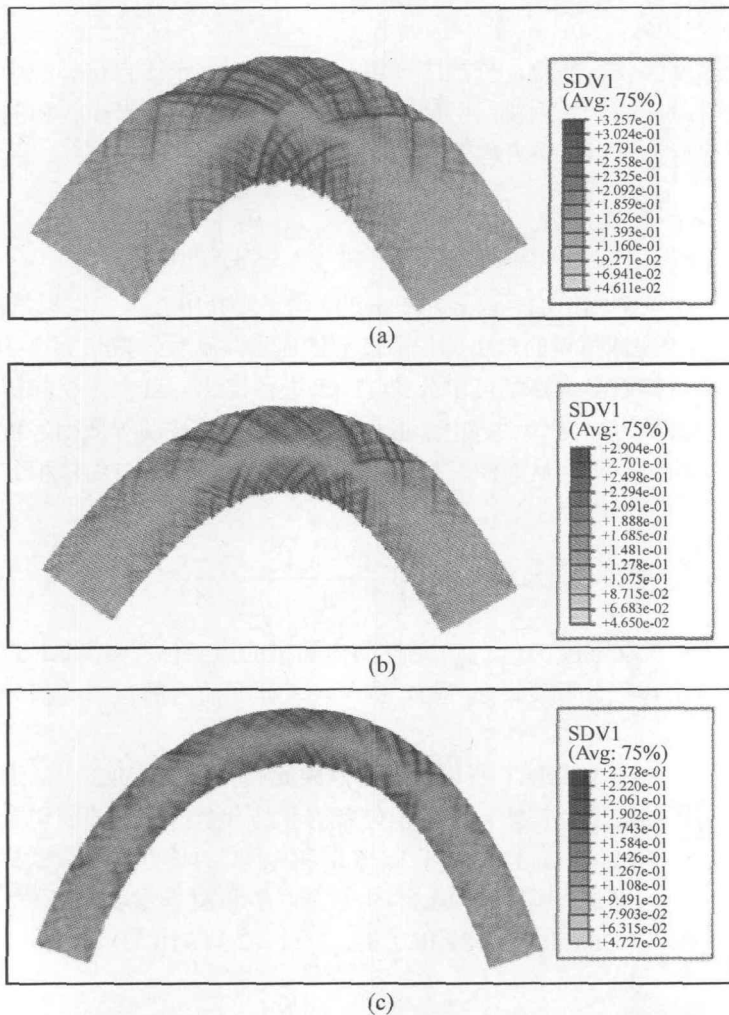


图2 长厚比分别为 4:1、6:1 和 12:1 试样的多重剪切带形貌

进一步，剪切带的分布密度可由剪切带间距来进行定量表征。通过分析发现，试样拉压两端的剪切带间距随着样品厚度的变小呈现减小的趋势，如图3所示。拉伸端的剪切带间距普遍大于压缩端的剪切带间距。注意到，拉伸端的剪切带间距约为试样厚度的 $1/6$ 而压缩端的剪切带间距约为试样厚度的 $1/10$ ，与实验统计的结果接近。剪切带间距与样品厚度保持类似线性的变化关系，表明随着样品厚度的减小，试样中可以形成非常密集的剪切

带, 呈现准均匀的塑性变形。这与实验中所观察的尺寸效应相一致^[9, 21]。同时, 拉压端剪切错动均随着试样厚度的增加而增大。

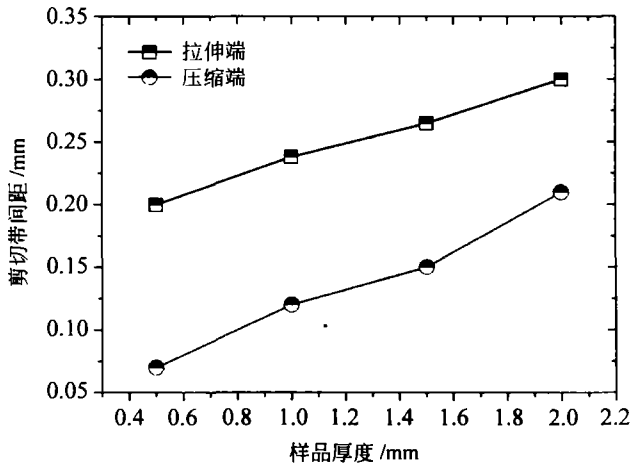


图3 拉压端剪切带间距随试样厚度的变化规律

4.2 多重剪切带随自由体积分布的变化

非晶合金中的初始自由体积分布对多重剪切带的形核与长大具有重要的影响^[20]。通过改变自由体积的初始分散度发现, 随着自由体积初始分散度的增大, 多重剪切带分布更均匀, 如图4所示。由图4(a)可知, 当 $\Delta_y/t=1$ 时, 对应初始自由体积分布最为不均匀的情况, 试样中的剪切带差别显著。在试样中间位置附件, 形成了几条主剪切带, 而其他位置分布着一些较小的剪切带。主剪切带的优先扩展将导致材料发生破坏, 从而使材料表现出差的宏观塑性。当 $\Delta_y/t=25$ 或更大时(图4(b)和(c)), 初始自由体积在材料内部的分布趋于均匀, 此时试样中的剪切带发展均等, 没有明显的主剪切带, 表现出很好的塑性承载能力。

4.3 多重剪切带行为内在竞争机制

在准静态加载下, 剪切带间距随着样品厚度的减小而减小(剪切带数密度增大), 表明薄样品更易形成多重剪切带。另一方面, 剪切错动随着样品厚度的增加而增大, 说明剪切带在较厚的样品中更易扩展。实际上, 剪切带的演化包括两个基本阶段, 即形核与长大。在多重剪切带演化过程中, 一方面, 已有的剪切带相互竞争表现出各向异性的扩展趋势; 另一方面, 新的剪切带将会不断萌生。新剪切带的形核与已有剪切带的长大, 两者竞争决定了剪切带的形貌及材料的宏观塑性。剪切带间距与单位长度剪切带的数量密切相关, 而剪切带的数量又由剪切带形核决定, 因此剪切带间距的变化体现了剪切带的形核。同时, 剪切错动反映剪切带扩展。实际上, 剪切带间距与剪切错动之间的竞争就是剪切带形核与扩展的竞争。在薄的样品或自由体积分布较均匀的样品中, 剪切带易形核难扩展, 因此有利

于多重剪切带的形成，从而表现好的宏观塑性。

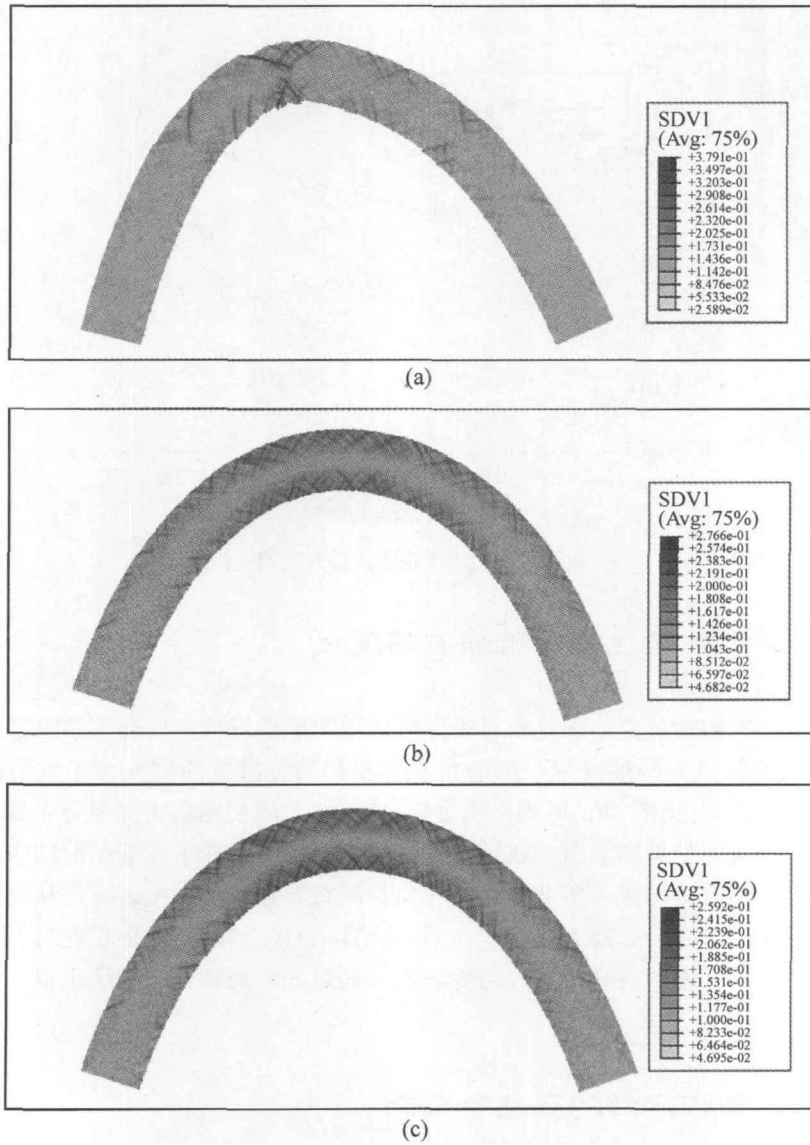


图4 不同自由体积分布试样的多重剪切带形貌
(a) $\Delta_v/t=1$; (b) $\Delta_v/t=5$; (c) $\Delta_v/t=10$

5 总结

本文系统研究了 Vit1 非晶合金弯曲载荷下多重剪切带群体演化行为。通过四点弯曲实验及数值模拟得到了多重剪切带随样品厚度及初始自由体积分布的变化规律。分析发现，样品厚度越小，自由体积分布越均匀，越有利于多重剪切带的形成。进一步，揭示了多重剪切带是剪切带形核与扩展竞争的结果。

致谢

本研究受国家杰出青年基金和国家自然科学基金创新研究群体项目（项目编号：10725211, 11021262）的资助。

参考文献

1. Schuh C, Hufnagel T, Ramamurty U. Mechanical behavior of amorphous alloys. *Acta Mater*, 2007, 55 (12): 4067~4109
2. Chen M W. Mechanical Behavior of Metallic Glasses: Microscopic Understanding of Strength and Ductility. *Annu Rev Mater Res*, 2008, 38 (1): 445~469
3. Dai L H, Bai Y L. Basic mechanical behaviors and mechanics of shear banding in BMGs. *Int J Impact Eng*, 2008, 35 (8): 704~716
4. 戴兰宏, 蒋敏强. 液体的 fragility 及其与玻璃固体力学性能的关联. *力学进展*, 2007, 37: 346~360
5. Jiang M Q, Ling Z, Meng J X, Dai L H. Energy dissipation in fracture of bulk metallic glasses via inherent competition between local softening and quasi-cleavage. *Philos Mag*, 2008, 88 (3): 407~426
6. Liu L F, Dai L H, Bai Y L, Wei B C, Eckert J. Behavior of multiple shear bands in Zr-based bulk metallic glass. *Mater Chem Phys*, 2005, 93 (1): 174~177
7. Xie S, George E P. Hardness and shear band evolution in bulk metallic glasses after plastic deformation and annealing. *Acta Mater*, 2008, 56 (18): 5202~5213
8. Conner R D, Li Y, Nix W D, Johnson W L. Shear band spacing under bending of Zr-based metallic glass plates. *Acta Mater*, 2004, 52 (8): 2429~2434
9. Conner R D, Johnson W L, Paton N E, Nix W D. Shear bands and cracking of metallic glass plates in bending. *J Appl Phys*, 2003, 94 (2): 904~911
10. Ravichandran G, Molinari A. Analysis of shear banding in metallic glasses under bending. *Acta Mater*, 2005, 53 (15): 4087~4095
11. Yang Q, Mota A, Ortiz M. A Finite-Deformation Constitutive Model of Bulk Metallic Glass Plasticity. *Comput Mech*, 2005, 37 (2): 194~204
12. Dai L H, Yang M, Liu L F, Bai Y L. Adiabatic shear banding instability in bulk metallic glasses. *Appl Phys Lett*, 2005, 87: 141916~19
13. Jiang M Q, Dai L H. On the origin of shear banding instability in metallic glasses. *J Mech Phys Solids*, 2009, 57 (8): 1267~1292
14. Argon A S. Plastic deformation in metallic glasses. *Acta Metall*, 1979, 27: 47~58
15. Steif P S, Spaepen F, Hutchinson J W. Strain localization in amorphous metals. *Acta Metall*, 1982, 30: 447~455
16. Wright W J, Hufnagel T C, Nix W D. Free volume coalescence and void formation in shear bands in metallic glass. *Journal of applied Physics*, 2003, 93 (3): 1432~1437
17. Spaepen F. A microscopic mechanism for steady state inhomogeneous flow in metallic glasses. *Acta Metall*, 1977, 25: 407~415
18. Huang R, Suo Z, Prevost J H, Nix W D. Inhomogeneous deformation in metallic glasses. *J Mech Phys Solids*, 2002, 50: 1011~1027

19. Gao Y F. An implicit finite element method for simulating inhomogeneous deformation and shear bands of amorphous alloys based on the free-volume model. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, 2006, 14 (8): 1329~1345
20. Chen Y, Jiang M Q, Dai L H. How does the initial free volume distribution affect shear band formation in metallic glass? *Sci China Ser G-Phys Mech Astron*, 2011, 54 (8): 1488~1494
21. Yokoyama Y, Yamano K, Fukaura K, Sunada H, Inoue A. Enhancement of ductility and plasticity of $Zr_{55}Cu_{30}Al_{10}Ni_5$ bulk glassy alloy by cold rolling. *Mater Trans JIM*, 2001, 42: 623~632