

优秀博士论文介绍

# 块体金属玻璃的剪切带行为

蒋敏强

(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)

## 0 引言

玻璃态物质以纷繁多样的形式广泛存在于自然与科技技术领域<sup>[1-3]</sup>. 除了人们熟知的门窗上的硅酸盐无机玻璃、各种塑料制品的高聚物玻璃外, 玻璃态还与光纤通讯、生物制品和生化药剂的保鲜存储、极端干燥条件下昆虫活性的保持等这些鲜为人知的方面密切相关. 甚至, 宇宙中的大部分水也是以玻璃态存在的<sup>[4]</sup>. 金属玻璃尤其是三维尺寸超过毫米尺度的块体金属玻璃作为玻璃这一古老家族的新成员<sup>[5-7]</sup>, 由于其独特的原子长程无序结构, 且不存在位错、晶界等传统意义上的结构缺陷, 表现出一系列优异的力学和物理性能, 成为当前最具发展潜力的新型材料之一, 已经在国防、空天等领域显示出广阔的应用前景<sup>[8-11]</sup>. 然而, 金属玻璃在室温下的塑性变形极易局部化, 形成几十纳米尺度的剪切带<sup>[12-14]</sup>; 剪切带的形成及快速扩展往往导致材料发生灾变破坏<sup>[15, 16]</sup>, 呈现出极低的室温延性, 极大地限制了这类材料的广泛应用. 本质上, 金属玻璃的变形局部化剪切带是由多个不同的物理机制耦合控制的多时空跨尺度问题, 其中涉及粘性/动量扩散、热/能量扩散、自由体积/质量扩散、失稳成核与发展、诱致裂纹扩展等多个速率过程, 它们均具有各自的特征时间和空间尺度. 这些多时空尺度速率过程的非线性关联耦合控制着块体金属玻璃的剪切带行为, 问题的关键是如何澄清耦合作用的控制机制与物理图像. 但是, 对于这类不具有传统意义微结构的金属玻璃材料的剪切带行为, 连续介质尺度的经典热塑剪切理论和基于传统材料结构的剪切带理论都无法完整的描述. 因此, 对于金属玻璃材料变形局部化剪切带及其诱导的断裂过程的研究, 不仅具有显著的工程意义, 而且具有重要的学术价值.

本文针对这一关键力学问题展开了系统的实验研究、理论分析和数值计算工作. 首先, 在“势能形貌”理论框架下, 从金属玻璃上游液体与下游固体的关联入手, 对塑性流动的剪胀效应进行了研究; 通过

对自由体积-热塑性耦合系统的理论分析, 阐明了自由体积主导、热辅助的剪切带失稳机制; 然后, 通过对块体金属玻璃剪切带特征厚度的理论预测、剪切带敏感性的表征、周期剪切带形成机理的分析, 验证了上述揭示的剪切带形成新机制; 最后, 提出了金属玻璃“准解理”断裂的“拉伸转变区”模型, 阐明了剪切带后期断裂过程中的能量耗散机制; 此外, 对金属玻璃固有塑性的微结构起源进行了初步的探索. 主要工作包括以下几个方面:

## 1 塑性流动的剪胀效应

在“势能形貌”理论框架下, 得到了金属玻璃上游形成液体动力学参数-Fragility 与下游玻璃固体体积模量、剪切模量之间两个固有的内有关联(见图 1), 结合金属玻璃体积变形的分子动力学模拟, 揭示出金属玻璃塑性流动虽然由剪切主控, 但是在此过程中必然伴随着与材料相关的原子尺度的剪胀效应. 这种塑性流动过程中伴随着的原子尺度剪胀效应导致了自由体积聚集, 从而引起材料的局部软化-剪切带. 此外, 基于得到的两个固有关联, 澄清了在国际上具有广泛争议的 Novikov-Sokolov 线性关联的成立条件: 绝对零度和极高频率. 相关结果发表在

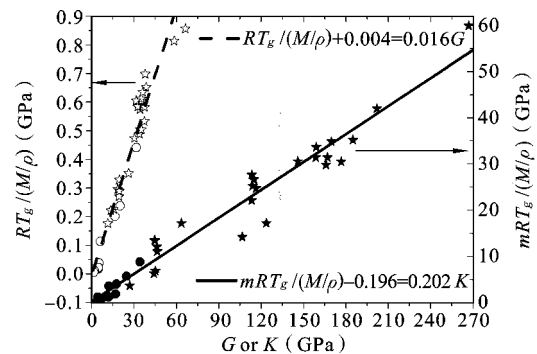


图 1 存在于玻璃材料中的两个固有关联<sup>[17]</sup>  
Fig. 1 The two intrinsic correlations are confirmed by metallic and nonmetallic glasses. Black and open Stars; metallic glasses; black and open circles; nonmetallic glasses<sup>[17]</sup>

文献[3,17-19].

### 2 剪切带失稳的物理起源

在已建立的源于原子尺度剪胀效应的自由体积与热塑耦合的剪切失稳理论框架基础上,通过摄动分析,得到了三种软化模式下(自由体积软化、热软化和耦合软化)剪切带失稳判据.通过定义自由体积失稳因子和热失稳因子,揭示在剪切失稳前自由体积软化和热软化是一个互相促进的过程(见图 2),相比于绝热软化,自由体积软化导致的剪切局部化

失稳要快并且更加容易,在自由体积和热耦合软化过程中起主控作用.热力耦合的剪切带分析进一步验证了这种自由体积软化的主控机制,揭示局部升温可能是剪切带形成的结果,而不是其起源(见图 3),绝热软化效应作为耦合的二次效应在高应变率时对剪切失稳起辅助促进作用.此外,分析表明前文揭示的剪胀效应也对剪切失稳起促进作用.相关结果发表在文献[20].

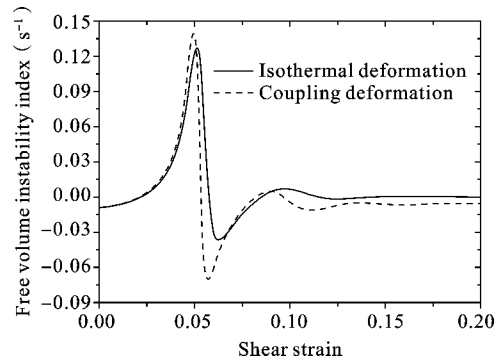
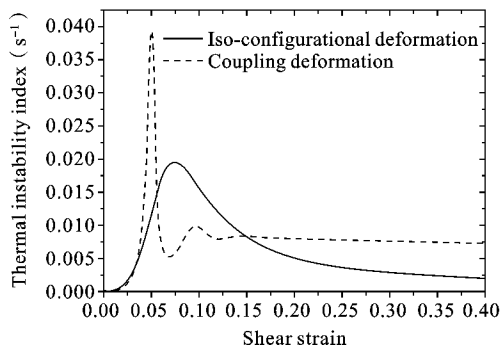


图 2 热失稳因子和自由体积失稳因子随剪切应变的变化<sup>[20]</sup>

Fig. 2 Change of thermal instability index and free volume instability index with shear strain<sup>[20]</sup>

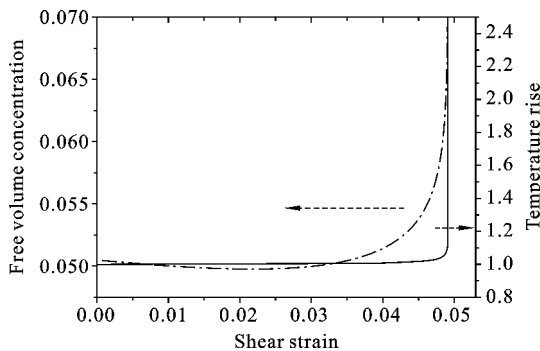


图 3 自由体积和温度在剪切局部化过程中的演化.

Fig. 3 Evolution of free volume and temperature during shear localization process

### 3 剪切带演化机理:剪切带韧性与厚度

通过发展帽形试样的动态“受迫”剪切技术与动态变形“冻结”技术,对金属玻璃的剪切带演化动力学进行了系统研究,发现纳米尺度的剪切带以渐进方式扩展,是一种高度局域化的过程.基于获得的关于剪切带演化的第一手实验资料,建立了一个金属玻璃剪切带局部演化动力学模型,其中考虑了动量(惯性)、能量(温度)以及质量(自由体积)的耗散过程.通过理论分析,揭示出动量扩散与自由体积扩散

的竞争平衡决定了剪切带扩展过程的临界耗散能(图 4).基于这个临界能,引入了剪切带韧性(Shear-band toughness)的概念,表征不同金属玻璃材料体系对剪切带扩展的难易程度.基于自由体积软化的主控机制,得到了与实验观测结果相符的金属玻璃剪切带特征厚度的理论表达式.分析表明,金属玻璃中剪切带的厚度主要取决于微观流动事件“剪切转变区(shear transformation zone, STZ)”的尺寸以及失稳过程中 STZ 激活的自由体积浓度,其背后的物

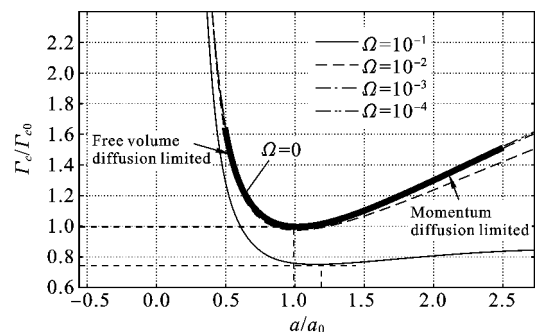


图 4 剪切带内临界耗散能与剪切带厚度的关系<sup>[21]</sup>

Fig. 4 Plot of the critical dissipation energy as a function of the shear-band thickness<sup>[21]</sup>

理含义是 STZ 运动导致的局部拓扑失稳,此过程中自由体积产生和扩散所达到的动态平衡决定了金属玻璃中剪切带的厚度. 相关结果发表在文献[21, 22].

#### 4 周期剪切带形成机制

为了考察不同加载条件对剪切带形成的影响,对金属玻璃切削过程中的剪切带行为进行了研究. 实验发现金属玻璃在切削过程中常常会产生一种独特的连续片状切屑,形成机理归因于刀具前面主剪切区内剪切带的周期性形成(图 5(a)). 基于实验观察,考虑在主剪切区内剪应力、自由体积和温度的平

衡,发展了一种热力耦合的正交切削模型来定量表征片状切屑的形成. 进一步通过线性扰动分析,揭示出周期剪切带形成的临界条件为自由体积流系数大于某一与工件材料和切削过程相关的临界值. 这种周期剪切带导致的片状切屑形成可以理解为一种自我维持的极限环失稳现象,即在主剪切区内应力、自由体积和温度的自动反馈(图 5(b)),其背后的物理机制是自由体积流和源的对称破缺,而不是热失稳. 理论预测的周期剪切带间距与实验观测值一致. 此研究结果进一步证实了我们前文提出的金属玻璃的剪切带形成新机制. 相关结果发表在文献[23].

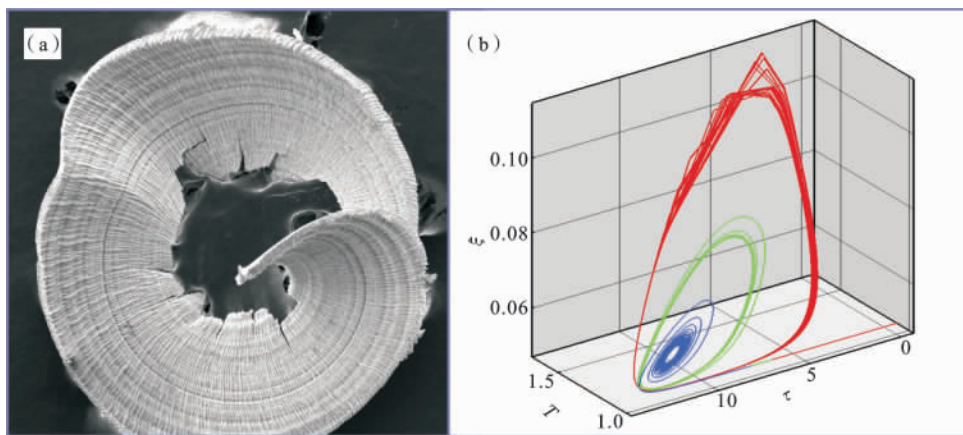


图 5 金属玻璃切削导致的周期剪切带斑图及其背后的形成机理: 极限环失稳现象<sup>[23]</sup>

Fig. 5 Pattern of periodic shear bands and the underlying mechanism: limit cycles<sup>[23]</sup>

#### 5 断裂过程中的能量耗散机制

针对一种典型的韧性金属玻璃体系,进行了一系列不同应变率、不同加载模式下的断裂实验. 首次在这种韧性体系中观察到了百纳米尺度的“韧窝”及纳米尺度的周期条痕结构. 基于断裂形貌的多尺度分析,提出了金属玻璃断裂的韧-脆转变准则(见图 6):当裂尖半径大于流体弯月失稳的临界波长时,金属玻璃将发生延性断裂,在此过程中能量主要以粘塑性耗散为主;反之,断裂将表现为“准解理”特征,能量主要以形成新表面的形式耗散. 特别地,在国际上首次提出了一种新的原子团簇运动模式,即“拉伸转变区(Tension Transformation Zone, TTZ)”,作为“准解理”耗散过程的基本单元,结合塑性流动过程的经典 STZ 模式,揭示出金属玻璃材料在断裂过程中的能量耗散机制是纳米尺度 STZ 和 TTZ 两个耦合元过程固有的相互竞争. 如果裂尖前端是以

STZ 运动为主,裂纹面将出现微米尺度的脉状纹理花样或者百纳米尺度的涟漪结构;反之,断裂面形貌将呈现纳米尺度的周期条痕,甚至无特征的“镜面区”以及裂纹路径的不稳定行为,如分叉等. 在裂尖前端 STZ 背景下,TTZ 的周期性激活,导致了纳米周期条痕的形成. 为了验证上述断裂能量耗散机制,采用原子力显微镜(AFM)对 NPC 的三维形貌进行了细致的扫描(三维形貌见图 7),并对其进行了非趋势波动分析(Detrended Fluctuation Analysis, DFA). 结果表明,NPC 沿着裂纹扩展方向具有长程关联性,存在显著的特征尺度,即间距;沿着峰方向也是长程关联的,并存在特征尺度,是塑性流动的结果;但是沿着谷的方向表现出长程无关性和强烈的分形特征,其分维为 1.48,是典型的脆性破坏特征. 这些结果证实了我们提出的“准解理”断裂过程的存在以及 TTZ 和 STZ 竞争的能量耗散机制. 此外,实

验还发现 NPC 的相互作用将会导致延性涟漪结构的产生, 显示出一种反常的延脆转变行为. 相关结果

发表在文献[15,24-26].

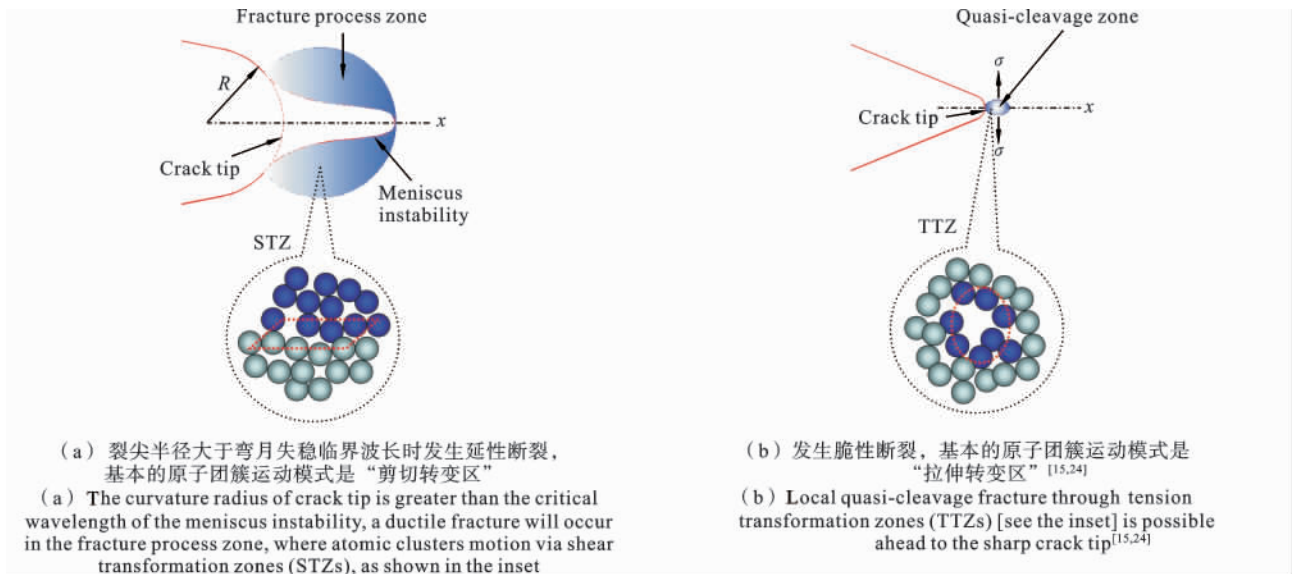


图 6 金属玻璃断裂韧脆转变机理示意图

Fig. 6 Schematic diagram of the ductile-to-brittle transition mechanism of metallic glasses during fracture

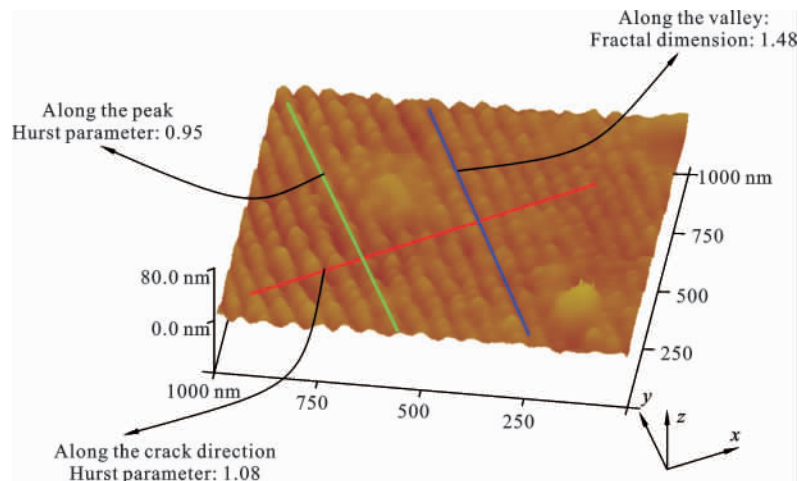


图 7 纳米周期条痕 AFM 扫描三维形貌的非趋势波动分析 [25]

Fig. 7 Detrended fluctuation analysis of NPC showing the fractal feature along the valley [25]

### 6 金属玻璃固有塑性变形能力与微结构的内在关联

在工程应用中, 金属玻璃的塑性或者延性是人们追求的力学性能. 但是, 什么样的微结构以及在加载过程中什么样的微结构运动有利于宏观塑性的提高, 这一问题到目前为止仍然没有得到很好的回答. 首先, 对二元金属玻璃体系进行了不同加载速率下纳米压入的三维分子动力学模拟, 通过对材料内部

参与不可逆运动原子的统计分析, 发现金属玻璃宏观塑性能力取决于不可逆原子团簇运动的空间尺度和时间非均匀程度. 进一步, 基于对 137 种金属玻璃和 56 种晶态合金弹性模量的统计分析 (见图 8), 以及金属玻璃最近邻分布的高斯模型, 得到了金属玻璃固有塑性能力的短程序条件: 密堆积、大无序度和非简谐. 这些条件看起来是矛盾的, 无法同时满足, 但是它们之间的某种平衡是金属玻璃塑性提高的关

键. 相关成果发表在文献[27,28].

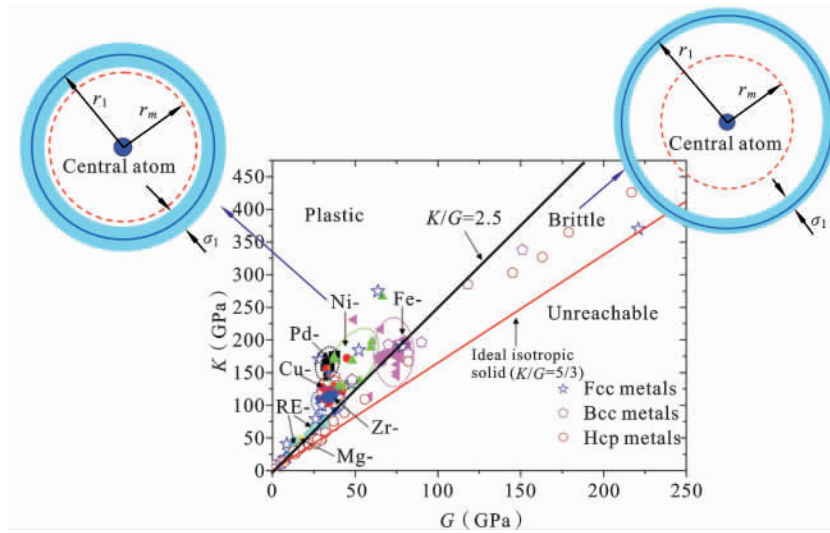


图 8 金属玻璃与晶态金属的体积模量和剪切模量的关系以及塑性和脆性体系对应的短程序结构示意图<sup>[28]</sup>

Fig. 8 Bulk modulus versus shear modulus for 137 BMGs and 56 polycrystalline metals, and SRO in plastic and brittle systems<sup>[28]</sup>

### 参考文献

- [1] Angell C A. Formation of glasses from liquids and biopolymers [J]. Science, 1995, 267: 1924-1935.
- [2] Debenedetti P G, Stillinger F H. Supercooled liquids and the glass transition [J]. Nature (London), 2001, 410: 259-267.
- [3] 戴兰宏, 蒋敏强. 液体的 fragility 及其与玻璃固体力学性能的关联 [J]. 力学进展, 2007, 37: 346-360.
- [4] Jenniskens P, Blake D F. Structural transitions in amorphous water ice and astrophysical implications [J]. Science, 1994, 265: 753-756.
- [5] Klement W J, Willens R H, Duwez P. Non-crystalline structure in solidified gold-silicon alloys [J]. Nature (London), 1960, 187: 869-870.
- [6] Inoue A, Zhang T, Masumoto T. Al-La-Ni amorphous alloys with a wide supercooled liquid region [J]. Materials Transactions, JIM, 1989, 30: 965-972.
- [7] Perker A, Johnson W L. A highly processable metallic glass:  $Zr_{41.2} Ti_{13.8} Cu_{12.5} Ni_{10.0} Be_{22.5}$  [J]. Applied Physics Letters, 1993, 63: 2342-2344.
- [8] Johnson W L. Bulk glass-forming metallic alloys: science and technology [J]. MRS Bulletin, 1999, 24: 42-56.
- [9] Schuh C A, Hufnagel T C, Ramamurty U. Mechanical behavior of amorphous alloys [J]. Acta Materialia, 2007, 55: 4067-4109.
- [10] Schroers J. Processing of bulk metallic glass [J]. Advanced Materials, 2009, 21: 1-32.
- [11] Liu Y, Jiang M Q, Yang G W, Guan Y J, Dai L H. Surface rippling on bulk metallic glass under nanosecond pulse laser ablation [J]. Applied Physics Letters, 2011, 99: 191902.
- [12] Dai L H, Yan M, Liu L F, Bai Y L. Adiabatic shear banding instability in bulk metallic glasses [J]. Applied Physics Letters, 2005, 87: 141916.
- [13] Dai L H, Bai Y L. Basic mechanical behaviors and mechanics of shear banding in BMGs [J]. International Journal of Impact Engineering, 2008, 35: 704-716.
- [14] Jiang M Q, Duan G H, Dai L H. Metallic glass nanofilms [J]. Journal of Non-Crystalline Solids, 2011, 357: 1621-1627.
- [15] 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 [J]. Philosophical Magazine, 2008, 88: 407-426.
- [16] Chen Y, Jiang M Q, Wei Y J, Dai L H. Failure criterion for metallic glasses [J]. Philosophical Magazine, 2011, 91: 4536-4554.
- [17] Jiang M Q, Dai L H. Intrinsic correlation between fragility and bulk modulus in metallic glasses [J]. Physical Review B, 2007, 76: 054204.
- [18] Jiang M Q, Dai L H. On mechanical properties of metallic glass and its liquid vitrification characteristics [J]. Ad-

- vanced Materials Research, 2008, 41-42: 247-252.
- [19] Jiang M Q, Jiang S Y, Dai L H. Inherent shear-dilatation coexistence in metallic glass [J]. Chinese Physics Letters, 2009, 26: 106103.
- [20] Jiang M Q, Dai L H. On the origin of shear banding instability in metallic glasses [J]. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 2009, 57: 1267-1292.
- [21] Jiang M Q, Dai L H. Shear-band toughness of bulk metallic glasses [J]. Acta Materialia, 2011, 59: 4525-4537.
- [22] Jiang M Q, Wang W H, Dai L H. Prediction of shear-band thickness in metallic glass [J]. Scripta Materialia, 2009, 60: 1004-1007.
- [23] Jiang M Q, Dai L H. Formation mechanism of lamellar chip in machining bulk metallic glass [J]. Acta Materialia, 2009, 57: 2730-2738.
- [24] Jiang M Q, Ling Z, Meng J X, Gao J B, Dai L H. Nanoscale periodic corrugation to dimple transition due to “beat” in a bulk metallic glass [J]. Scripta Materialia, 2010, 62: 572-575.
- [25] Jiang M Q, Meng J X, Gao J B, Wang X L, Rouxel T, Keryvin V, Ling Z, Dai L H. Fractals in fracture of bulk metallic glass [J]. Intermetallics, 2010, 18: 2468-2471.
- [26] Jiang M Q, Meng J X, Keryvin V, Dai L H. Crack branching instability and directional stability in dynamic fracture of a tough bulk metallic glass [J]. Intermetallics, 2011, 19: 1775-1779.
- [27] Jiang M Q, Jiang S Y, Ling Z, Dai L H. Smaller Deborah number inducing more serrated plastic flow of metallic glass [J]. Computational Materials Science, 2009, 46: 767-771.
- [28] Jiang M Q, Dai L H. Short-range-order effects on intrinsic plasticity of metallic glasses [J]. Philosophical Magazine Letters, 2010, 90: 269-277.

(中国科学院力学研究所固体力学重点学科推荐 导师:戴兰宏 研究员)