



非晶合金专题

非晶合金塑脆断裂转变的控制参数

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

*联系人, E-mail: lhdai@lnm.imech.ac.cn

收稿日期: 2012-03-19; 接受日期: 2012-04-18; 网络出版日期: 2012-05-15

国家自然科学基金(批准号: 11132011, 10725211, 11002144, 11021262)、国家自然科学基金委员会-中国工程物理研究院联合基金(批准号: 10976100)、国家重点基础研究发展计划(编号: 2009CB724401, 2012CB937500)资助项目

摘要 材料的塑脆断裂转变及机理一直以来都是材料和力学领域的研究热点. 近百年来, 针对晶体材料的塑脆行为, 相继发展了一系列弹、塑性的起裂临界判据及塑脆表征参数. 非晶合金作为近年来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, 该材料变形局部化剪切带导致的室温低塑性极大地限制了其工程应用. 因此, 弄清非晶合金的塑脆断裂行为及转变条件显得尤为迫切. 在传统理论的基础上, 结合非晶合金固有的特性, 目前已发展了塑脆转变的单参数和双参数控制理论. 本文将对这些理论进行简要的回顾, 进一步揭示这些控制参数的相互关联及非晶合金塑脆转变的实质.

关键词 塑脆转变, 拉压强度差异, 非晶合金, 断裂, 剪切带

PACS: 61.43.Dq, 61.43.Bn, 62.20.Fe, 81.05.Kf

doi: 10.1360/132012-296

材料的失效起始于不可恢复的变形. 它包括从屈服到断裂的整个过程, 通常可以分为塑性失效和脆性失效两类^[1]. 在塑性失效中, 材料断裂前将伴随一定的塑性流动. 而对于脆性失效, 材料一旦屈服将迅速断裂, 几乎不发生塑性形变. 材料的塑脆行为依赖于材料的固有性质, 及温度、应力状态、应变率等外在条件. 一直以来, 材料的塑脆转变都是材料和力学领域关注的重要课题. 非晶合金作为一类新型材料, 具有优越的力学物理性能和广泛的应用前景^[2-7]. 其潜在的应用与材料的塑性及断裂行为密切相关^[8-16]. 由于内部结构长程无序的特点, 非晶合金在常温条

件下极易发生非均匀的塑性变形, 形成纳米尺度的剪切带^[17,18]. 一条或几条主要剪切带的快速扩展导致材料破坏, 表现低塑性, 从而极大的抑制了非晶合金作为结构材料的应用. 因此, 弄清非晶合金的塑脆转变条件及机理显得尤为迫切^[19-21].

材料的变形行为与其内部原子结构及原子间相互作用密切相关. 晶体材料的塑脆行为可以通过位错滑移机制来很好理解. 研究者们将晶体材料的塑脆性质刻画为裂尖剪应力和拉伸应力的竞争, 或裂纹扩展和裂尖位错发射的竞争, 发展了一系列单参数理论来表征晶体固体的塑脆转变. 然而, 由于非晶

引用格式: 陈艳, 戴兰宏. 非晶合金塑脆断裂转变的控制参数. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2012, 42: 551-559

Chen Y, Dai L H. Inherent parameters governing ductile-brittle transition in metallic glasses (in Chinese). Sci Sin-Phys Mech Astron, 2012, 42: 551-559, doi: 10.1360/132012-296

合金缺乏位错和晶界, 这些传统的理论在描述其塑脆转变和复杂的失效行为上往往存在着不足. 首先, 非晶合金拉压塑性具有不对称的特点, 通常拉伸塑性显著小于压缩塑性^[22]. 而单个参数无法同时表征拉、压不同的塑性. 其次, 非晶合金失效伴随拉压强度的差异(Strength-Differential, S-D)、断裂角的不对称偏转和多种断裂模式^[14,23,24]. 这些行为表明非晶合金的失效不仅仅是由偏应力控制. 静水应力或正应力在该材料的屈服和断裂过程中发挥着重要的作用^[25-28]. 除了剪应力主控失效模式以外, 非晶合金还存在拉伸正断和压缩劈裂等完全脆性的断裂模式^[22,23,29].

在过去的几年里, 研究者们基于传统的理论, 从弹性模量或理论强度出发, 提出了一系列控制非晶合金塑脆性的理论, 这些理论大多只涉及单个的控制参数. 近年来, 随着人们对非晶合金内部结构认识的逐步加深^[30-38], 使得从原子层次去探索非晶合金的塑脆转变机理成为可能. 基于原子结构及其相互作用, 研究者建立了控制非晶合金塑脆转变的双参数理论并揭示了其物理机制. 本文将简要回顾目前已有的塑脆控制理论及重要参数, 对现有控制参数之间的物理关联作简明的阐述, 进而揭示非晶合金塑脆断裂转变的实质.

1 晶体材料塑脆控制参数

1.1 起裂控制参数

材料受力从变形到失效, 存在脆性和塑性两种破坏模式. 早在20世纪初期, 研究者们建立了一系列表征材料脆性及塑性断裂的控制参数.

1921年, Griffith^[39]基于弹性体能量平衡的观点研究了玻璃、陶瓷等脆性材料中的裂纹扩展问题. 他指出脆性材料的断裂是已有裂纹扩展的结果. 当外力所做的功大于裂纹扩展形成新表面所需要的能量时, 裂纹将起裂破坏. 随后, Orowan^[40]和 Irwin^[41]通过对延性材料裂纹扩展过程的研究, 提出裂纹扩展前在其尖端附近存在一个塑性区, 提供裂纹扩展的能量不仅仅用于形成新表面, 而且还用于塑性功消耗. 从而, 建立了一个广义的裂纹扩展临界判据, 即能量释放率因子满足 $G=G_c$, 其中 G 为裂纹扩展单位面积弹性系统释放的能量, G_c 为反映材料抵抗断裂能力的参数, 仅与材料性质相关. G_c 越大, 说明材料断

裂需要吸收的能量越多, 从而越难发生断裂. 能量准则考虑的是裂纹尖端的应力及应变的综合效果. 而对于脆性材料, 裂纹尖端的应力集中往往是影响材料断裂行为的主要因素.

1957年, Irwin^[41]提出了应力场强度的观点. 通过弹性力学理论, 分析了裂纹尖端的应力及应变场, 并引入应力强度因子 K 来表征裂尖附近应力场强弱的程度. K 与外载性质、裂纹及裂纹体几何形状等因素相关. Irwin 认为当裂纹尖端的应力强度因子 K 达到临界条件, 即 $K=K_c$ 时, 裂纹发生失稳扩展. K_c 是断裂韧度, 描述材料抵抗断裂的能力. 实际上, 应力强度因子 K 与应变能释放率 G 相互关联, 存在 $G=K^2/E$ (对应平面应力) 或 $G=(1-\nu^2)K^2/E$ (对应平面应变) 的转换关系, 其中 E 为杨氏模量, ν 为泊松比.

按照能量原理, 裂纹的扩展是由应力和应变的综合量达到临界值而发生的. 从应力出发可以有有效的预测脆性材料的裂纹失稳扩展, 但当裂纹尖端大范围屈服以后, 应变在裂纹的起裂过程中发挥主导作用. 相比于脆性材料, 塑性材料形成新断裂表面所需要的能量往往远小于塑性变形所做的功. 1965年, Wells^[42]提出了针对弹塑性材料的裂纹张开位移 COD 准则, 即 $\delta=\delta_c$ 时, 裂纹将开裂. δ 是原裂纹尖端垂直裂纹方向上所产生的位移. δ_c 是裂纹临界张开位移. 通常 δ_c 越大, 表明材料在破坏前所能承受的塑性变形越多, 从而材料塑性越好.

1968年, Rice^[43]提出 J 积分因子, 用以作为弹塑性断裂的起裂准则. J 积分是围绕裂纹尖端闭合曲线的积分. 当 $J=J_c$ 时, 材料中的裂纹发生失稳扩展. 在线弹性情况下, K 与 J 可以互相转化: $J=K^2/E$ (对应平面应力) 或 $J=(1-\nu^2)K^2/E$ (对应平面应变). 通过 J 积分的方法, Rice 推导了裂纹尖端塑性区半径

$$R = \frac{3J_c}{4\sqrt{2}(1+\pi/2)\tau_y\gamma_0}, \quad (1)$$

其中 τ_y 为屈服强度, γ_0 为初始屈服应变. 通常认为, 塑性区半径的大小与材料宏观塑性成正比. 可以发现 J_c 越大, R 越大, 意味着材料塑性变形能力越强.

由于从断裂出发, 得到的大多是裂纹起裂的临界条件, 而非失稳扩展的条件. 通过这些参数衡量材料的韧性或塑性能力过于保守. 因此, 研究者们从晶体材料的位错变形机制着手寻找固有的特征参量来对材料的塑脆行为及转变予以表征.

1.2 基于位错机制的塑脆控制参数

1954年, Pugh^[44]基于传统晶体金属的塑性位错机制推导了应变 $\varepsilon = f(\sigma/\mu b)$ 及固有的断裂应力 $\sigma_F = Bad$, 其中 σ 为应力, μ 和 B 分别为剪切、体积模量, b 为 Burger 矢量, a 为材料相关参数, d 为常数. 进而断裂应变可以表示为 $\varepsilon_F = f(Bad/\mu b)$. 对于相同晶格结构的材料, alb 恒定, 从而有 $\varepsilon_F = f(B/\mu) \propto B/\mu$. Pugh^[44]指出体积模量与剪切模量比 B/μ 是衡量晶体金属塑性能力的指标, B/μ 越大, 材料延展性越好, 反之, 材料表现脆性. 对于各向同性材料, 体积模量与剪切模量比 B/μ 与泊松比 ν 存在如下对应关系:

$$B/\mu = 2(1+\nu)/3(1-2\nu), \quad (2)$$

因此, 材料塑性同样可以用泊松比 ν 进行表征. 需要指出的是, 对于不同的晶格材料, 塑性除依赖于弹性模量外, 还依赖于材料的晶格结构. 通常面心立方结构塑性最佳, 其次为体心立方和六方晶格^[45].

随后, Rice 和 Thomson^[46]基于晶体的位错理论, 通过裂尖位错自发发射的难易程度来确定裂尖是否发生钝化, 并提出了一个无量纲数来表征裂尖钝化程度:

$$RT = \mu b/\gamma, \quad (3)$$

其中 b 为 Burgers 矢量、 γ 为裂纹表面能. 当 RT 较小 ($RT \leq 7.5-10$) 且位错芯间距较大时, 对应于延性材料; 而当 RT 较大, 位错芯间距较小时, 对应于脆性材料. RT 依赖于剪切模量和断裂表面能. 当增大材料的剪切模量或减小断裂表面能时, RT 将增大, 此时材料位错发射将逐渐被抑制, 裂纹将以解理的形式向前扩展. Rice 和 Thomson 发现对于面心立方金属, 裂纹尖端会自发发射位错形成钝化; 而对于体心立方金属, 尖裂纹通常比较稳定, 不发射位错.

剪切模量 μ 表征材料抵抗剪切变形能力, 体积模量 B 或断裂表面能 γ 描述材料抵抗断裂的能力. 不难发现, 特征参数 B/μ 和 RT 实际上刻画了材料剪切与断裂的相互竞争.

1.3 基于强度的塑脆控制参数

1967年, Kelly 等人^[47]通过晶体材料平衡裂尖场的拉伸应力与剪应力的竞争来预测材料是发生完全脆性破坏还是延性破坏. 他们提出当最大拉伸应力与剪应力之比大于理想的解理剪切强度比, 即

$$\sigma/\tau > \sigma_0/\tau_0 \quad (4)$$

时, 材料表现为完全脆性的破坏模式. 反之, 材料的断裂将伴随一定的塑性流动. 通过这个准则可以对材料塑脆性进行分类. 对于面心立方金属, σ_0/τ_0 非常大, 通常大于 10, 材料在失效过程中伴随大量的塑性流动; 对于钻石等脆性固体, σ_0 与 τ_0 相当, 此时材料易于发生解理破坏, 表现完全脆性特征.

该准则分别用理想剪切强度和理想解理强度来表征材料剪切和解理的难易程度. 通过两者的比值反映剪切和解理两种失效模式的竞争, 从而确定材料最终的破坏模式和塑脆性.

1.4 塑脆转变过程区尺寸

除了用弹性模量比或固有强度比衡量塑脆转变之外, Lawn 等人^[48,49]针对岩石陶瓷等脆性材料建立了表征材料由变形主导到断裂主导模式转换的特征长度

$$a^* = \xi\gamma E/H^2, \quad (5)$$

其中 ξ 为无量纲的材料参数, H 为材料硬度, $H^2/\xi\gamma E$ 可作为衡量材料的塑脆性指标. 当 $H^2/\xi\gamma E$ 越大时, a^* 越小, 意味着材料更容易发生断裂破坏而非塑性变形.

最近, Gao^[50]从断裂释放能出发建立了完全脆性材料的断裂过程区尺寸

$$l = \gamma E/\sigma_0^2, \quad (6)$$

认为当材料内部的缺陷尺度小于该过程区尺寸时, 材料对缺陷不敏感. 除了上述的过程区尺寸外, 裂纹尖端塑性区也是衡量材料塑性好坏的一个重要指标, 其大小可以通过断裂韧度和屈服强度 ($\propto K_c^2/\sigma_y^2$) 或临界 J 积分因子等 (如(1)式所示) 进行表征. 塑性区越大, 说明裂纹尖端钝化越显著. 这样可以有效抑制尖裂纹的迅速扩展, 有利于材料的宏观塑性.

综上所述, 对于传统晶体材料, 通常单个特征参数已足够表征其塑脆转变.

2 非晶合金塑脆控制参数

非晶合金由于长程无序的结构特点, 其塑性变形不再服从传统的位错机制. 在自由体积和热的共同作用下, 这类材料常温条件下极易发生剪切局域化, 形成纳米尺度的剪切带, 宏观上表现脆性. 用什么参数来表征非晶合金的塑脆性一直以来都是该领域研究者关注的热点.

2.1 弹性模量比(泊松比)与剪切模量扰动

1975年, Chen 等人^[51]发现非晶合金的泊松比与材料的塑性存在相关性: 高泊松比的非晶合金具有更好的塑性. 2005年, Lewandowski 等人^[52]通过对现有块体非晶合金弹性模量及断裂能等实验数据的深入系统分析, 发现用以表征晶态合金的塑脆性因子 μ/B 同样适用于非晶合金. 通过统计非晶合金断裂能和剪切体积模量比的规律(如图 1 圆形标记所示), 他们发现当 μ/B 达到某一临界值(0.41–0.43)时, 材料的断裂能迅速下降, 材料由韧性转变为脆性. 同时, 相比晶态合金, 非晶合金临界 μ/B 值较高且塑脆转变更剧烈. 通过 μ/B 与泊松比 ν 之间的对应关系, 他们进一步得到断裂能随泊松比的变化规律(如图 1 菱形标记所示). 泊松比越大, 材料所需要的断裂能越高, 从而材料的韧性越好. Lewandowski 等人^[52]发现非晶合金韧脆转变对应的临界泊松比为 0.31–0.32, 在该值附近材料的韧脆转变将非常显著. 如 Zr 基非晶合金在高温(623 K)经不同时间退火后, 其断裂韧度迅速下降, 而泊松比和剪切体积模量比在临界值附近, 几乎没有变化.

泊松比反映材料抵抗体积变形与抵抗形状变形能力的竞争. 泊松比越大, 意味着材料抵抗形状变形的能力越差, 从而易于发生塑性形变. 它是衡量非晶合金塑脆性的一个重要依据^[45,53–55]. 通过调节泊松

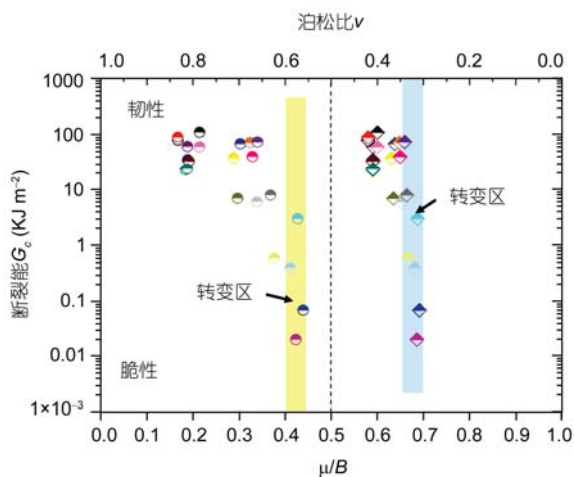


图 1 (网络版彩图)断裂能分别随弹性模量比 μ/B (圆形符号) 及泊松比 ν (菱形符号) 的变化规律(数据引自^[52])

Figure 1 (Color online) Fracture energy changes respectively with ratio μ/B (marked by circle) and Poisson ratio ν (marked by rhombus) (the data were referenced from^[52]).

比大小, 可以有效地改善非晶合金的塑性能力, 这在一些非晶合金中得到了有效的实验验证^[53,56,57].

2008年, Poon 等人^[58]提出泊松比不是影响非晶合金塑性的唯一因素, 还存在另外一个重要的参数即剪切模量扰动. 他们认为剪切模量扰动是导致临界泊松比变化的重要原因. 不同的非晶体系具有不同的特征剪切模量扰动量, 从而对应于不同的临界泊松比.

2.2 剪切正断强度比与拉压不对称因子

由于非晶合金断裂角偏离 45° 以及断裂模式的多样性, 传统的 Tresca, Mises 及 Mohr-Coulomb 准则均不足以很好地表征该材料的失效行为. Zhang 和 Eckert^[23]由此提出了一个统一的拉伸断裂准则, 即:

$$\sigma^2/\sigma_0^2 + \tau^2/\tau_0^2 \geq 1, \quad (7)$$

其中 τ_0 为材料剪切强度, σ_0 为材料拉伸断裂强度. Zhang 和 Eckert 进一步指出剪切解理强度比 τ_0/σ_0 控制材料的塑脆转变及断裂模式的转换. 如图 2 所示, 随着 τ_0/σ_0 的增大, 材料的拉伸断裂角会逐渐增大, 当 $\tau_0/\sigma_0 = \sqrt{1/2}$ 时, 拉伸断裂角达到 90° . 此时, 材料发生拉伸正断. $\tau_0/\sigma_0 \rightarrow 0$ 对应于塑性较好而强度较低的材料; $\tau_0/\sigma_0 \approx 1/3 - 2/3$ 对应高强度材料, 如非晶合金; $\tau_0/\sigma_0 \geq \sqrt{1/2}$ 对应高硬度的脆性材料, 如岩石、陶瓷等. $\tau_0/\sigma_0 = \sqrt{1/2}$ 为临界转变点.

随着对非晶合金塑性及断裂行为认识的逐步深入, 研究者们发现非晶合金拉压载荷下呈现不同塑性变形能力和断裂强度, 通常压缩塑性和强度高于

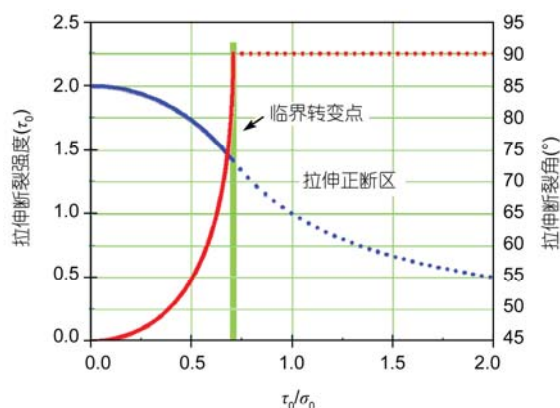


图 2 (网络版彩图)拉伸断裂强度及断裂角随 τ_0/σ_0 的变化规律
Figure 2 (Color online) The correlations of tensile fracture strength and angle with τ_0/σ_0 .

拉伸情况, 即所谓的“拉压不对称性”. 这种“拉压不对称”源于非晶合金的材料微结构, 是该类材料的本征反映, 也是非晶合金区别于晶态合金变形断裂行为的一个重要特征. 显然, 单个控制参数不足以表征内蕴“拉压不对称性”的非晶合金塑脆行为. 为此, 最近 Chen 等人^[14]从非晶合金的短程序结构和原子间相互作用出发, 提出了非晶合金的统一失效准则, 即

$$(\sigma/\bar{\sigma}_0 + \beta)^2 + (\tau/(\alpha\bar{\sigma}_0))^2 = 1, \quad (8)$$

其中理想正断强度 $\bar{\sigma}_0 = (\sigma_f^C + \sigma_{max}^T)/2$; 剪切正断强度比 $\alpha = \bar{\tau}_0/\bar{\sigma}_0$, 表征非晶合金的内摩擦性能; 拉压强度差异系数或 S-D 因子 $\beta = (\sigma_f^C - \sigma_{max}^T)/(\sigma_f^C + \sigma_{max}^T)$, 表征材料的剪胀效应; σ_{max}^T 是理想的拉伸强度, σ_f^C 是虚拟的理想压缩强度, $\bar{\tau}_0$ 为理想的剪切强度. α , β 和 $\bar{\sigma}_0$ 为相互独立的材料本征参数. 通过它们, 可以建立微观原子结构及相互作用与宏观失效行为之间的关联.

进一步发现, 无量纲参数 α 和 β 统一控制非晶合金的断裂模式转变及塑脆行为. 这两个参数的协同控制可以通过构造的失效图来清楚展现.

如图 3, 单轴拉伸和压缩下的断裂角随 α 和 β 的变化而变化, 拉伸载荷下断裂角变化范围为 $45^\circ-90^\circ$, 压缩下为 $45^\circ-0^\circ$. 拉伸断裂角等值线由 45° 变化到 90° , 表征材料由剪切破坏过度到准解理破坏. 压缩

断裂角等值线从 45° 减小到 0° , 表征材料由剪切破坏逐渐过度到劈裂. 由此, 可以统一的描述非晶合金的四种典型的断裂模式, 即拉伸载荷下剪切断裂(I)和拉伸正断(II), 压缩下的剪切断裂(III)和劈裂($\theta^C \rightarrow 0^\circ$, IV). 从而, 图 1 可以对应不同的非晶合金, 断裂模式分别遵循 I 和 III, II 和 III, 及 II 和 IV($\theta^C \rightarrow 0^\circ$). 值得注意的是, 当断裂角为 90° 时, 非晶合金由塑性断裂变化为理想脆性破坏, 塑脆转变临界条件为

$$\alpha = \sqrt{(1-\beta)/2}, \quad (9)$$

其中 α 表征材料内摩擦性能, 衡量剪切运动的难易程度; $\sqrt{(1-\beta)/2}$ 表示准解理的临界条件. 两者之间的竞争决定最终的断裂形式. 当 $\alpha > \sqrt{(1-\beta)/2}$, 准解理将优先于剪切失效而导致灾变性破坏. 沿着转变线, 随着 β 由 0 增加到 1, 对应的准解理临界值 $\sqrt{(1-\beta)/2}$ 由 $\sqrt{1/2}$ 减小为 0, 表明材料更容易发生理想脆性断裂. 此时, 塑脆转变临界条件(9)更易达到. 通过对几种典型的非晶合金的 α 和 β 值^[17,59-63]分析发现, 对于塑性较好的非晶合金, 如 Zr-, 和 Pd-基非晶合金, 通常对应于较小的 α 和 β 值; 而脆性非晶合金, 如 La-基非晶合金, 通常具有较大的 α 和 β 值. 因此, α 值越小, 材料无论是在拉伸还是压缩载荷下都表现更好的塑性; β 值的增大将提高材料的拉伸脆性及拉压塑性差异. 参数 α 和 β 协同控制非晶合金的整体塑性和断裂模式, 两者缺一不可.

不难发现, 当忽略 S-D 效应, 不考虑非晶合金的“拉压不对称性”, 即 $\beta=0$, 塑脆转变条件(9)可退化到 Zhang 和 Eckert 的拉伸断裂模式转变条件^[23], 即 $\tau_0/\sigma_0 = \sqrt{1/2}$. 然而, 对于非晶合金, 由于其固有的剪胀效应, β 的作用通常是不可忽略的. 通过分析 β 为不同值($\beta=0, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6$)时, 拉伸强度 σ^T 和压缩强度 σ^C 随 α 的变化趋势, 可以将材料划分为三类, 即分别由 α 主控, α 和 β 共同主控及 β 主控. 如图 4 所示, 当 $\beta=0$, 拉伸强度始终等于压缩强度($\sigma^T = \sigma^C$)且拉压强度随着 α 的增大而增大, 当 $\alpha = \sqrt{1/2}$, 达到最大值 $\bar{\sigma}_0$. 当 $\beta \neq 0$ 时, 拉伸强度 σ^T 和压缩强度 σ^C 随 α 的变化分别如图所示两簇曲线. 当 $\alpha=0$ 时, 两条曲线重合, 此时 $\sigma^T = \sigma^C$. 随着 α 的增大, 拉压强度之间的差距逐渐加大直至达到一个恒定值 $2\beta\bar{\sigma}_0$. 同时, β 越大, 拉压强度的差异越大. 实际上, 注意到在晶体

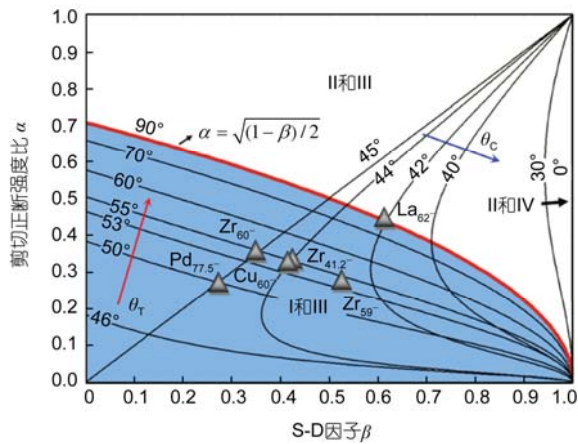


图 3 (网络版彩图)非晶合金失效模式及塑脆转变图

拉伸和压缩破坏角随 α 和 β 发生变化. I-IV 分别对应拉伸载荷下的剪切断裂、拉伸正断, 压缩载荷下的剪切断裂和压缩劈裂^[14]

Figure 3 (Color online) Map of failure modes and ductile-brittle transition for metallic glasses: dependence of tensile and compressive failure angles on α and β . I-IV correspond to shear failure and normal tensile fracture in tension, and shear failure and split in compression, respectively.

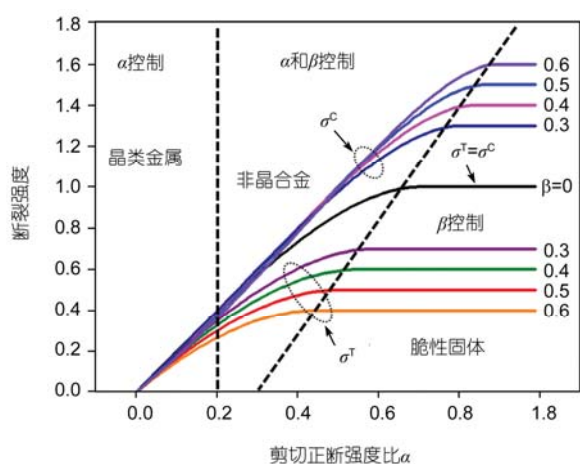


图4 (网络版彩图)对于不同 β 值($\beta=0, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6$), 拉压断裂强度随剪切正断强度比 α 的变化规律

Figure 4 (Color online) Dependence of fracture strength on α for different β ($\beta=0, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6$), both in tension and compression.

合金中, 静水应力及正应力几乎不影响材料的破坏行为, 对应 $\alpha \rightarrow 0$. 在这种情况下, 无论拉伸和压缩载荷下, 材料都是以剪切的形式破坏, 参数 β 几乎不发挥作用, 对应于图 4 中的 α 控制区. 当 α 足够大时, 如对于非晶合金, 静水应力或正应力在这类材料的失效过程中起着重要的影响. 此时 β 的作用逐渐显著, α 和 β 共同控制材料的失效强度. 随着 α 的进一步增大, 拉压强度差趋于恒定, 仅依赖于 β 和 $\bar{\sigma}_0$ 的大小. 此时, 剪胀效应发挥主导作用, 对应于陶瓷、岩石等更加脆性的固体. 由此, 恰好说明了为什么通常单参数足以描述晶态材料的失效行为而对非晶合金则需要更多的控制参数.

2.3 塑脆控制参数之间的关联

综上所述, 非晶合金塑脆性的控制参数主要分为两类, 一类是从弹性模量出发, 通过体积剪切模量比或泊松比来描述材料的塑性能力; 另一类是从材料的固有强度出发, 如剪切正断强度比 α 和拉压强度差异因子 β , 来对非晶合金的塑脆性进行表征. 实际上, 材料的弹性模量与理论强度之间具有内在关联. 对于晶体类固体, 通常认为材料的理论强度是材

料杨氏模量的 $1/10-1/5$. 而对于非晶合金, 其拉伸和剪切理论强度一般分别约为杨氏模量的 $1/10$ 和剪切模量的 $1/5$ ^[3]. 因此, 剪切正断强度比反映了剪切模量与拉伸弹性模量之间的竞争, 它与体积剪切模量比可以相互转化. 较小的 α 值对应于较小的 μ/B 值或较大的泊松比, 从而反映较好的材料塑性. 当材料的拉压强度或塑性差异较小时, 这些单一的控制参数可以很好的描述材料的塑性能力. 而当材料的拉压不对称性比较显著时, 此时需要考虑 β 因子, 它描述了固有强度或弹性模量在拉压条件下的差异. β 值的增大将导致材料更容易发生拉伸正断, 从而加剧拉压塑性的差异. 通常, 当理想剪切强度远小于正断强度时 ($\alpha \rightarrow 0$), 剪应力主控材料的失效过程; 反之, 正应力或静水应力将在材料的破坏过程中发挥主导作用.

3 结论

近百年来, 研究者们针对晶态材料的变形断裂及塑脆转变开展了大量的研究, 并取得了重要的认识. 从裂纹的起裂扩展, 晶体的位错滑移, 及材料强度的竞争等出发发展了一系列材料塑脆转变理论. 继而, 基于这些经典的理论, 研究者们提出了针对非晶合金塑脆转变的控制参数: (1) 剪切体积模量比或泊松比与非晶合金的韧脆转变密切相关, μ/B 越小或泊松比 ν 越大, 材料塑性越好; 同时, 存在临界的 μ/B 和 ν , 对应韧脆转变. 该临界 μ/B 和 ν 的大小与剪切模量扰动相关; (2) 剪切正断强度比可以有效表征材料的塑脆断裂模式的转变, α 越小, 材料越趋于塑性的断裂模式; 当 α 达到某一临界值时, 材料发生理想脆性破坏. 材料塑脆转变的临界值与 S-D 因子密切相关. 当 S-D 因子为 0, 即忽略材料的拉压不对称性时, $\alpha = \sqrt{1/2}$. 当材料拉压不对称性较显著, 即 S-D 因子的作用不可忽略时, 临界转变条件为 $\alpha = \sqrt{(1-\beta)/2}$. β 越大, 材料拉伸条件下越倾向于脆性破坏, 同时拉压塑性差异越显著. 以上两类参数本质上均描述了材料抵抗剪切(或形状变形)和抵抗断裂(或体积变形)两种能力的竞争.

参考文献

- 1 Christensen R. Exploration of ductile, brittle failure characteristics through a two-parameter yield/failure criterion. Mater Sci Eng A, 2005,

394: 417–424

- 2 Johnson W L. Bulk glass-forming metallic alloys: Science and technology. *MRS Bull*, 1999, 24: 4–56
- 3 Wang W H. The elastic properties, elastic models and elastic perspectives of metallic glasses. *Prog Mater Sci*, 2012, 57: 487–656
- 4 Greer A L, Ma E. Bulk metallic glasses: At the cutting edge of metals research. *MRS Bull*, 2007, 32: 611–619
- 5 Yao K F, Chen N. Pd-Si binary bulk metallic glass. *Sci China Ser G-Phys Mech Astron*, 2008, 51(4): 414–420
- 6 Jing Q, Zhang B, Zhang J, et al. Electrochemical corrosion and oxidation resistances of $Zr_{60}Ni_{21}Al_{19}$ bulk amorphous alloys. *Sci China-Phys Mech Astron*, 2010, 53: 2223–2226
- 7 Hui X D, Xu Z Y, Wu Y, et al. Magnetocaloric effect in Er-Al-Co bulk metallic glasses. *Chin Sci Bull*, 2011, 56(36): 3978–3983
- 8 Spaepen F. Homogeneous flow of metallic glasses: A free volume perspective. *Scripta Mater*, 2006, 54: 363–367
- 9 Dai L H, Yang M, Liu L F, et al. Adiabatic shear banding instability in bulk metallic glasses. *Appl Phys Lett*, 2005, 87: 141916
- 10 Schuh C, Hufnagel T, Ramamurty U. Mechanical behavior of amorphous alloys. *Acta Mater*, 2007, 55: 4067–4109
- 11 Chen M W. Mechanical behavior of metallic glasses: Microscopic understanding of strength and ductility. *Annu Rev Mater Res*, 2008, 38: 445–469
- 12 Dai L H, Bai Y L. Basic mechanical behaviors and mechanics of shear banding in BMGs. *Int J Impact Eng*, 2008, 35: 704–716
- 13 Trexler M M, Thadhani N N. Mechanical properties of bulk metallic glasses. *Prog Mater Sci*, 2010, 55: 759–839
- 14 Chen Y, Jiang M Q, Wei Y J, et al. Failure criterion for metallic glasses. *Phil Mag*, 2011, 91: 4536–4554
- 15 Huang X, Ling Z, Zhang H S, et al. How does spallation microdamage nucleate in bulk amorphous alloys under shock loading? *J Appl Phys*, 2011, 110: 103519
- 16 Chen Y, Jiang M Q, Dai L H. How does the initial free volume distribution affect shear band formation in metallic glass? *Sci China-Phys Mech Astron*, 2011, 54: 1488–1494
- 17 Jiang M Q, Ling Z, Meng J X, et al. Energy dissipation in fracture of bulk metallic glasses via inherent competition between local softening and quasi-cleavage. *Phil Mag*, 2008, 88: 407–426
- 18 Jiang M Q, Dai L H. Shear-band toughness of bulk metallic glasses. *Acta Mater*, 2011, 59: 4525–4537
- 19 Yuan C C, Xiang J F, Xi X K, et al. NMR signature of evolution of ductile-to-brittle transition in bulk metallic glasses. *Phys Rev Lett*, 2011, 107: 236403
- 20 Jang D, Greer J R. Transition from a strong-yet-brittle to a stronger-and-ductile state by size reduction of metallic glasses. *Nat Mater*, 2010, 9: 215–219
- 21 Jiang F, Jiang M Q, Wang H F, et al. Shear transformation zone volume determining ductile-brittle transition of bulk metallic glasses. *Acta Mater*, 2011, 59: 2057–2068
- 22 Zhang Z F, He G, Eckert J, et al. Fracture mechanisms in bulk metallic glassy materials. *Phys Rev Lett*, 2003, 91: 045505
- 23 Zhang Z F, Eckert J. Unified tensile fracture criterion. *Phys Rev Lett*, 2005, 94: 094301
- 24 Gao H L, Shen Y, Xu J. Weibull analysis of fracture strength for $Zr_{55}Ti_2Co_{28}Al_{15}$ bulk metallic glass: Tension-compression asymmetry and porosity effect. *J Mater Res*, 2011, 26: 2087–2097
- 25 Flores K M, Dauskardt R H. Mean stress effects on flow localization and failure in a bulk metallic glass. *Acta Mater*, 2001, 49: 2527–2537
- 26 Ott R T, Sansoz F, Jiao T, et al. Yield criteria and strain-rate behavior of $Zr_{57.4}Cu_{16.4}Ni_{8.2}Ta_8Al_{10}$ metallic-glass-matrix composites. *Metall Mater Trans A*, 2006, 37: 3251–3257
- 27 Hsueh C H, Bei H, Liu C T, et al. Shear fracture of bulk metallic glasses with controlled applied normal stresses. *Scripta Mater*, 2008, 59: 111–114
- 28 Keryvin V, Prasad K E, Gueguen Y, et al. Temperature dependence of mechanical properties and pressure sensitivity in metallic glasses below glass transition. *Phil Mag*, 2008, 88: 1773–1790
- 29 Stoica M, Eckert J, Roth S, et al. Mechanical behavior of FeCrMoGaPCB bulk metallic glass. *Intermetallics*, 2005, 13: 764–769
- 30 Miracle D B, Egami T, Flores K M, et al. Structural aspects of metallic glasses. *MRS Bull*, 2007, 32: 6
- 31 Egami T. Understanding the properties and structure of metallic glasses at the atomic level. *J Minerals Metals Mater*, 2010, 62: 70–75
- 32 Cheng Y Q, Ma E. Atomic-level structure and structure-property relationship in metallic glasses. *Prog Mater Sci*, 2011, 56: 379–473
- 33 Miracle D. The efficient cluster packing model—An atomic structural model for metallic glasses. *Acta Mater*, 2006, 54: 4317–4336
- 34 Miracle D B. A structural model for metallic glasses. *Nat Mater*, 2004, 3: 697–702
- 35 Sheng H, Cheng Y, Lee P, et al. Atomic packing in multicomponent aluminum-based metallic glasses. *Acta Mater*, 2008, 56: 6264–6272
- 36 Sheng H W, Luo W K, Alamgir F M, et al. Atomic packing and short-to-medium range order in metallic glasses. *Nature*, 2006, 439:

- 419–425
- 37 Egami T. Atomic level stresses. *Prog Mater Sci*, 2011, 56: 637–653
- 38 Zhu A W, Shiflet G J, Poon S J. Atomic bond deficiency as a structural defect in amorphous metals: Relevance to glass transitions. *Acta Mater*, 2008, 56: 593–601
- 39 Griffith A A. The phenomena of rupture and flow in solids. *Phil Trans R Soc Lond A*, 1921, 221: 163–198
- 40 Orowan E. Fracture and strength of solids. *Reports on Progress in Physics*, 1948. XII: 185–232
- 41 Irwin G R. Analysis of stresses and strains near the end of a crack traversing a plate. *J Appl Mech*, 1957, 24: 361–364
- 42 Wells A A. Unstable crack propagation in metals, cleavage and fracture. In: *The Crack Propagation Symposium*, Cranfield, 1961. 210–230
- 43 Rice J R. A path-independent integral and the approximate analysis of strain concentration by notches and cracks. *J Appl Mech*, 1968, 35: 379–386
- 44 Pugh S F. Relations between the elastic moduli and the plastic properties of polycrystalline pure metals. *Phil Mag*, 1954, 45: 823–843
- 45 Jiang M Q, Dai L H. Short-range-order effects on intrinsic plasticity of metallic glasses. *Phil Mag Lett*, 2010, 90: 269–277
- 46 Rice J R, Thomson R. Ductile versus brittle behaviour of crystals. *Phil Mag*, 1974, 29: 73–97
- 47 Kelly A, Tyson W R, Cottrell A H. Ductile and brittle crystals. *Phil Mag*, 1967, 15: 567–586
- 48 Lawn B R, Marshall D B. Hardness, toughness, and brittleness: An indentation analysis. *J Amer Ceram Soc*, 1979, 62: 347–350
- 49 Lawn B R, Jensen T, Arora A. Brittleness as an indentation size effect. *J Mater Sci Lett*, 1976, 11: 573–575
- 50 Gao H. Materials become insensitive to flaws at nanoscale: Lessons from nature. *Proc National Acad Sci*, 2003, 100: 5597–5600
- 51 Chen H S, Krause J T, Coleman E. Elastic constants, Hardness and their implications to flow properties of metallic glasses. *J Non-Crystalline Solids*, 1975, 18: 157–171
- 52 Lewandowski J J, Wang W H, Greer A L. Intrinsic plasticity or brittleness of metallic glasses. *Phil Mag Lett*, 2005, 85: 77–87
- 53 Schroers J, Johnson W L. Ductile bulk metallic glass. *Phys Rev Lett*, 2004, 93: 255506
- 54 Greaves G N, Greer A L, Lakes R S, et al. Poisson's ratio and modern materials. *Nat Mater*, 2011, 10: 823–837
- 55 Yao K F, Ruan F, Yang Y Q, et al. Superductile bulk metallic glass. *Appl Phys Lett*, 2006, 88: 122106
- 56 Liu Y H, Wang G, Wang R J, et al. Super plastic bulk metallic glasses at room temperature. *Science*, 2007, 315: 1385–1388
- 57 Gu X J, McDermott A G, Poon S J, et al. Critical Poisson's ratio for plasticity in Fe-Mo-C-B-Ln bulk amorphous steel. *Appl Phys Lett*, 2006, 89: 239902
- 58 Poon S J, Zhu A, Shiflet G J. Poisson's ratio and intrinsic plasticity of metallic glasses. *Appl Phys Lett*, 2008, 92: 261902
- 59 Inoue A. Stabilization of metallic supercooled liquid and bulk amorphous alloys. *Acta Mater*, 2000, 48: 279–306
- 60 Zhang Z F, Eckert J, Schultz L. Difference in compressive and tensile fracture mechanisms of $Zr_{50}Cu_{20}Al_{10}Ni_8Ti_3$ bulk metallic glass. *Acta Mater*, 2003, 51: 1167–1179
- 61 Davis L A, Kavesh S. Deformation and fracture of an amorphous metallic alloy at high pressure. *J Mater Sci*, 1975, 10: 453–459
- 62 Inoue A, Zhang W, Zhang T, et al. High-strength cu-based bulk glassy alloys in Cu-Zr-Ti and Cu-Hf-Ti ternary systems. *Acta Mater*, 2001, 49: 2645–2652
- 63 Lee M. Effect of a controlled volume fraction of dendritic phases on tensile and compressive ductility in La-based metallic glass matrix composites. *Acta Mater*, 2004, 52: 4121–4131

Inherent parameters governing ductile-brittle transition in metallic glasses

CHEN Yan & DAI LanHong*

State Key Laboratory of Nonlinear Mechanics, Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China

The ductile-brittle transition and its mechanism are the hot research topics in the field of material and mechanics. In recent hundred years, the critical conditions for cracking and the governing parameters on ductility have developed for crystalline solids. Metallic glasses (MGs) as an emerging class of structural materials in recent years, show a broad potential applications due to their excellent mechanical properties. However, the low plasticity caused by highly strain localization greatly restrains them from engineering application. Therefore, to clarify the plastic behavior and the ductile-brittle transition in MGs becomes significant. Based on the classical theories, researchers have developed some important conditions to predict the plasticity in MGs, by taking their inherent properties into account. These theories usually include single or two governing parameters. In this paper, a brief review is carried out on these previous work, and further the underlying correlations between these governing parameters and the physics behind the ductile-brittle transition are revealed.

ductile-brittle transition, strength-differential effect, metallic glasses, fracture, shear band

PACS: 61.43.Dq, 61.43.Bn, 62.20.Fe, 81.05.Kf

doi: 10.1360/132012-296