



内生晶体非晶合金复合材料变形场演化与剪切带行为

刘兴发^{1,2}, 陈艳^{1,2*}, 戴兰宏^{1,2,3*}

1. 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;

2. 中国科学院大学工程科学学院, 北京 100049;

3. 北京理工大学爆炸科学与技术国家重点实验室, 北京 100081

*联系人, 陈艳, E-mail: chenyan@lnm.imech.ac.cn; 戴兰宏, E-mail: lhdai@lnm.imech.ac.cn

收稿日期: 2019-09-11; 接受日期: 2019-11-21; 网络出版日期: 2020-04-08

国家自然科学基金(编号: 11572324, 11790292)、中国科学院战略性先导科技专项B类(编号: XDB22040303, XDB22040303)、中国科学院前沿科学重点研究计划(编号: QYZDJSSW-JSC011)、北京理工大学爆炸科学与技术国家重点实验室开放课题(编号: KFJJ18-14M)和科学挑战专题基金项目(编号: TZ2016001)资助

摘要 通过数字图像相关方法从实验上观察到内生晶体复合材料在微米尺度应变场的演化与剪切带行为, 并结合有限元, 模拟了非晶合金复合材料的变形, 给出了应力应变场的分布, 分析了两相在变形中的作用. 实验与有限元结果表明, 在宏观弹性段内, 晶体相会优先发生塑性变形, 而后在界面形成应变集中, 逐渐向周围扩展; 随着加载的进行, 材料内部形成变形局部化剪切带. 非晶合金复合材料的塑性变形主要由剪切带贡献, 而晶体相的存在促进了多重剪切带的形成; 复合材料的载荷则主要由连续的非晶基体相承担, 剪切带形成伴随自由体积的快速增加, 导致非晶基体流动应力下降, 复合材料承载能力降低.

关键词 非晶复合材料, 数字图像相关, 塑性变形, 应变场, 剪切带

PACS: 02.70.Dc, 61.43.Dq, 62.20.Fe, 81.70.Fy

1 引言

非晶合金由于没有位错、晶界等广泛存在于传统晶体合金中的缺陷, 具有高强度、高硬度、高断裂韧性与耐磨、耐蚀等优异的性能, 是一类新型的具有巨大应用潜力的高性能工程结构材料^[1-4]. 然而, 室温下非晶合金塑性变形往往形成高度局部化的剪切带, 在拉伸载荷下, 一条或几条主要的剪切带迅速扩展导致

材料发生脆性断裂^[5-7]. 这一行为极大地限制了非晶合金作为结构材料的应用. 为了解决非晶合金脆性破坏的难题, 研究人员提出了许多改善非晶合金塑性变形能力的方法. 其中一种简单且行之有效的方法就是通过合理的成分设计, 经原位析出方式在非晶合金基体中引入晶体相, 形成内生晶体相非晶合金复合材料^[8-11]. 晶体相的引入, 一方面能够阻碍剪切带的扩展, 抑制沿剪切带的快速断裂^[8]; 同时晶体相与非晶基

引用格式: 刘兴发, 陈艳, 戴兰宏. 内生晶体非晶合金复合材料变形场演化与剪切带行为. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2020, 50: 067006
Liu X F, Chen Y, Dai L H. Deformation field evolution and shear banding of an *in-situ* crystal reinforced amorphous alloy composite (in Chinese). Sci Sin-Phys Mech Astron, 2020, 50: 067006, doi: 10.1360/SSPMA-2019-0317

体之间因强度差异造成的应力集中能够促进非晶基体形成多重剪切带^[12,13], 提高非晶材料塑性变形能力. 实验研究表明, 通过优化非晶复合材料的微观组织结构, 如体积分数^[14,15]、形状^[16]、晶粒尺寸^[17,18]、界面强度^[19]等, 可实现非晶合金复合材料力学性能的改善.

近年来, 研究人员通过数值模拟开展了许多非晶合金复合材料的研究工作^[20-26], 并取得了一定的成果. 基于有限元方法, 能够获得复合材料中两相在不同变形过程中各自的应力/应变场信息, 为理解复合材料的变形机制提供了重要的信息^[25]; 同时, 也能够方便地获得晶体相体积分数、大小、屈服强度等微观结构因素对复合材料宏观力学性能的影响, 为材料设计提供了指导^[23]. 然而有限元模拟的有效性依赖于合理的本构模型和正确的几何模型, 目前还缺少相关的验证实验.

数字图像相关方法(Digital Image Correlation, DIC)是一种迅速发展的光力学测量技术, 利用物体表面自然或者人工形成的随机斑点构成表面微观结构和表面光学散斑场, 通过记录这一散斑场在变形过程中所发生的变化来提取变形信息^[27]. Joo等人^[28]利用DIC方法观察到剪切带在不同应变率下具有不同的扩展方式. Wu等人^[29]通过不同初始态非晶合金的DIC结果表明, 样品在宏观屈服前就发生了不均匀变形, 对散斑图像的统计分析揭示了样品的宏观塑性与屈服前应变分布的不均匀性成正相关. 目前尚未有相关文献报道采用DIC方法研究非晶合金复合材料的变形行为. 因此, 本文将通过DIC方法给出非晶合金复合材料变形场及其演化过程, 并结合有限元模拟, 开展非晶合金复合材料变形及剪切带行为的研究.

2 实验材料与方法

实验选取了晶体体积分数约为50%的合金($Zr_{75}Ti_{15}Nb_{10}$)₈₀[$Be_{50}(Cu_{55}Ni_{45})_{50}$]₂₀作为模型材料, 在氩气保护下通过电弧熔炼与铜模冷却法获得 $\Phi 8$ mm的圆棒. 随后对铸态圆棒进行球化处理, 将其封入真空石英管中, 放入升温至920°C的电阻炉内, 进行20 min保温处理后, 取出进行熔体水淬处理, 获得具有球状的内生晶体相非晶合金复合材料. 采用Rigaku SmartLab9型X射线衍射分析仪(XRD, Cu $K\alpha$)对非晶复合材料进行相组成分析. 采用电火花线切割机将非晶复合材料加工成4 mm×4 mm×8 mm的方柱, 对试样侧面进行打磨抛光

处理, 并采用1%浓度的氢氟酸水溶液对样品进行轻微腐蚀, 应用光学显微镜观察其显微组织结构. 图1(a)显示了非晶复合材料的光学金相结构图. 近似球形的晶体相颗粒均匀地分散在非晶基体中, 其直径约为20–30 μm , 体积分数为50%. 插图XRD图谱中BCC相的晶体衍射尖峰叠加于非晶基体的漫散射峰上, 亦证实了非晶复合材料两相组成结构.

采用DIC方法获得非晶复合材料两相各自随施加载荷的变形场, 需要采集物体表面变形前后两幅散斑图像, 并通过图像相关处理算法得到同一像素点的位置来获得该像素点的位移向量. 因此, DIC的空间分辨率取决于所采集图像的散斑密度. 当采用传统人工喷漆的方法, 散斑颗粒尺度接近50 μm , 与内生晶体相的尺度

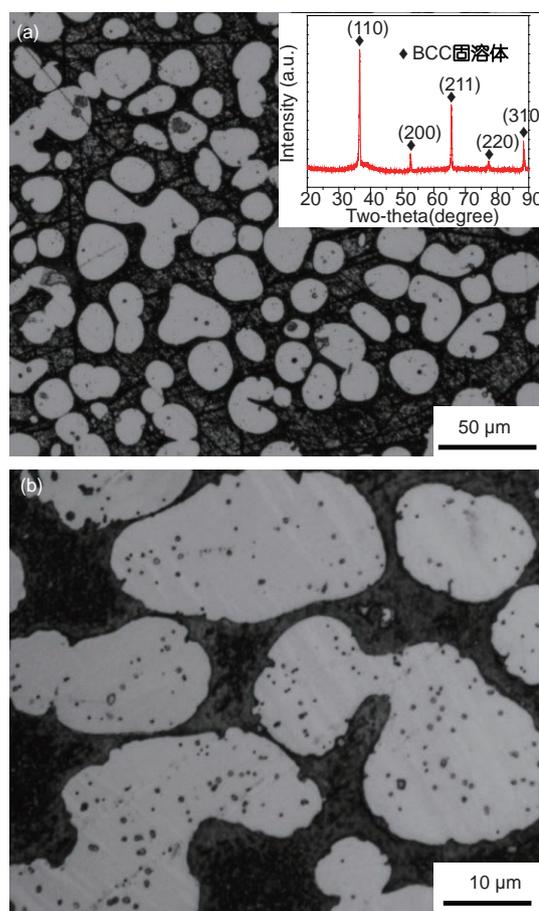


图1 (网络版彩图) (a) ($Zr_{75}Ti_{15}Nb_{10}$)₈₀[$Be_{50}(Cu_{55}Ni_{45})_{50}$]₂₀非晶合金复合材料的金相组织结构图, 插图为XRD衍射图谱; (b) 样品表面经腐蚀后形成的自然散斑场

Figure 1 (Color online) (a) Metallographic structure of amorphous composite ($Zr_{75}Ti_{15}Nb_{10}$)₈₀[$Be_{50}(Cu_{55}Ni_{45})_{50}$]₂₀, with the XRD pattern in the inset; (b) naturally formed random patterns on the specimen surface by slightly etching the material.

相当, 显然无法满足获得晶体与非晶相内部的变形场。这里, 我们采用经氢氟酸水溶液轻微腐蚀的样品表面留下的自然斑点作为散斑, 如图1(b)所示。可以看到, 晶体相与非晶基体相中有足够多的散斑可作为标记进行图像关联分析。随后从经表面轻微腐蚀的方柱中筛选出合适的样品(表面斑点满足DIC分析条件), 采用微米压痕仪在特定区域作上标记, 便于后续记录该区域的散斑场信息。采用Instron 8852万能材料试验机加载样品, 应变率为 $5 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ 。样品被加载至1000 MPa、刚进入宏观塑性区(屈服强度 $\sim 1200 \text{ MPa}$)、总应变约5%、总应变约10%四个阶段, 卸载后采用金相显微镜拍摄选定区域的表面形貌。DIC分析在Vic-2D平台完成。

3 有限元数值模拟

3.1 材料本构关系

3.1.1 非晶合金本构

从微观尺度上看, 非晶合金塑性变形的基本事件是容纳剪切变形的局部原子重排的激活过程。1977年, Spaepen^[30]首次将自由体积概念运用到解释非晶合金的塑性变形上, 并将其作为结构内变量提出了非晶合金塑性本构模型。该模型将基本塑性事件视为应力驱动下, 材料内高自由体积区域附近单个原子跨越能垒产生剪切变形, 同时该过程伴随着自由体积的产生与湮灭之间的竞争。在温度 T 和剪应力 τ 作用下, 宏观塑性应变率可以表示为^[30]

$$\frac{\partial \gamma^p}{\partial t} = 2f \exp\left(-\frac{\alpha v^*}{v_f}\right) \exp\left(-\frac{\Delta G^m}{k_B T}\right) \sinh\left(\frac{\tau \Omega}{2k_B T}\right), \quad (1)$$

其中 f 是原子振动频率, α 是考虑原子叠加的量级为“1”的几何因子, v^* 是临界体积(一般考虑为原子的硬球体积), v_f 是单个原子的平均自由体积, ΔG^m 是原子自由跳跃的能垒, Ω 是原子体积, k_B 是玻尔兹曼常数。

在剪应力的作用下, 原子被挤入到一个比自身体积更小的空隙中, 引起自由体积的增长, 同时原子的重排会导致自由体积的湮灭, 则自由体积的演化方程为^[30]

$$\frac{\partial v_f}{\partial t} = v^* f \exp\left(-\frac{\alpha v^*}{v_f}\right) \exp\left(-\frac{\Delta G^m}{k_B T}\right) \left\{ \frac{2\alpha k_B T}{v_f C_{\text{eff}}} \left[\cosh\left(\frac{\tau \Omega}{2k_B T}\right) - 1 \right] - \frac{1}{n_D} \right\}, \quad (2)$$

其中, n_D 是湮灭体积为 v^* 的自由体积所需的原子跳跃

次数, 通常取为3–10, $C_{\text{eff}} = E/3(1-\nu)$ 为Eshlby模量, E 为杨氏模量, ν 为泊松比。

Huang等人^[31]和Gao^[21]基于自由体积模型, 通过引入第二应力不变量 J_2 , 将这个模型扩展到多轴应力状态。可以看到, 方程(1)与(2)给出了非晶合金塑性事件发生的特征时间尺度 $t^* = f^{-1} \exp(\Delta G^m/k_B T)$, 因此可以用

$$f^{-1} \exp(\Delta G^m/k_B T) (\partial/\partial t) = (\quad)$$

表示某一物理量对时间的导数。

在小变形黏塑性框架下, 应变率可以分解为弹性和塑性分量:

$$\dot{\epsilon}_{ij} = \dot{\epsilon}_{ij}^e + \dot{\epsilon}_{ij}^p, \quad (3)$$

其中弹性分量满足广义Hooke定律:

$$\dot{\epsilon}_{ij}^e = \frac{1+\nu}{E} \left(\dot{\sigma}_{ij} - \frac{\nu}{1+\nu} \dot{\sigma}_{kk} \delta_{ij} \right). \quad (4)$$

依据方程(1), 塑性应变率在多轴应力状态下表示为

$$\dot{\epsilon}_{ij}^p = 2 \exp\left(-\frac{1}{v_f}\right) \sinh\left(\frac{\sigma_e}{\sigma_0}\right) \frac{S_{ij}}{\sigma_e}, \quad (5)$$

其中 $S_{ij} = \sigma_{ij} - \sigma_{kk} \delta_{ij}/3$ 为偏应力张量, $\sigma_e = (3S_{ij}S_{ij}/2)^{1/2}$ 为等效应力, $v_f = v_f/(\alpha v^*)$ 表示约化的自由体积, $\sigma_0 = 2k_B T/\Omega$ 表示参考应力。自由体积的演化方程(2)则可被描述为

$$\dot{v}_f = \frac{1}{\alpha} \exp\left(-\frac{1}{v_f}\right) \left\{ \frac{3(1-\nu)}{E} \frac{\sigma_0}{\beta v_f} \left[\cosh\left(\frac{\sigma_e}{\sigma_0}\right) - 1 \right] - \frac{1}{n_D} \right\}, \quad (6)$$

其中 $\beta = v^*/\Omega \sim 1$ 。

方程(3)–(6)构成了非晶合金的本构关系, 可以通过编写Abaqus用户材料子程序将其嵌入有限元软件, 分析非晶合金的力学行为^[21]。非晶合金本构关系中的相关材料参数列于表1^[26]。

3.1.2 晶体本构关系

BCC晶体相塑性变形的机制是位错运动。随着应变的增加, 晶体中位错密度不断地提高, 位错彼此之间以及与其他缺陷之间的交互作用使位错平均可动性下降, 因此为实现位错进一步运动就需要施加更大的应力, 即材料产生应变硬化。实验的加载条件为

表1 非晶合金复合材料变形有限元模拟涉及的非晶合金材料参数

Table 1 The material parameters of amorphous alloy involved in the finite element simulation of deformation of amorphous alloy composite

参数	E (GPa)	泊松比 ν	初始自由体积	ν_f	α	β	σ_0 (MPa)
数值	96	0.36	0.05	3	0.15	1 ^[26]	100

等温准静态加载, 材料的塑性变形过程可以不考虑温升和应变率效应, 故晶体相采用最为常用的幂律应变硬化本构关系, 即

$$\sigma = \sigma_0 + K \varepsilon_p^n, \quad (7)$$

其中 σ_0 和 K 分别为材料常数, ε_p 为塑性应变, n 为应变硬化指数. 通过对Szuecs等人^[32]单独制备的晶体相材料的应力应变曲线进行拟合, 得到式(7)中的参数以及其他材料参数, 见表2.

3.2 几何模型建立

在采用有限元模拟非晶复合材料的变形时, 需要建立性质近似于真实材料的“代表性体积单元”(Representative Volume Element, RVE). 本文采用具有多颗粒夹杂随机分布特征的非晶合金复合材料二维代表性体积单元, 并假设多晶体与非晶合金基体的界面为理想连接状态, 不发生界面分离. RVE被施加周期性边界条件, 以确保变形场的协调性. 对边界上的节点施加约束条件, 相对边界($L_1 \leftrightarrow L_2, L_3 \leftrightarrow L_4$)上的节点满足位移连续条件:

$$\begin{cases} \bar{U}_{L_2} - \bar{U}_{L_1} = \bar{U}_{A_2} - \bar{U}_{A_0}, \\ \bar{U}_{L_4} - \bar{U}_{L_3} = \bar{U}_{A_1} - \bar{U}_{A_0}. \end{cases} \quad (8)$$

应力连续条件:

$$\begin{cases} \sigma_{L_1} \cdot n_{L_1} = -\sigma_{L_2} \cdot n_{L_2}, \\ \sigma_{L_3} \cdot n_{L_3} = -\sigma_{L_4} \cdot n_{L_4}. \end{cases} \quad (9)$$

依据变形体的虚功原理, 由两个约束条件可以推导得到RVE受到的外部载荷能够由分配到顶点上的集

表2 非晶合金复合材料变形有限元模拟涉及的晶体相材料参数

Table 2 Parameters of crystalline materials involved in the finite element simulation of deformation of amorphous alloy composite

参数	E (GPa)	泊松比 ν	σ_0 (MPa)	K (MPa)	n
数值	63.3	0.4	610	750	0.34

中载荷进行等效, 因此具有周期性边界条件的RVE模型仅需对顶点 A_0, A_1, A_2 施加外部载荷^[33,34]. 这种RVE可以看作是材料块, 通过堆叠形成宏观上近似的真实材料模型, 如图2所示. 该RVE模型边长 $L=800 \mu\text{m}$, 半径 $r=20 \mu\text{m}$, 晶体相体积分数 $f=50\%$, 包含49605个四边形完全积分单元CPE4. 约束顶点 A_0 在 x, y 方向的位移, 约束 A_1 在 y 方向的位移, 约束 A_2 在 x 方向的位移. 在 A_2 施加 y 方向位移载荷, 最大名义应变为10%.

4 结果分析与讨论

4.1 DIC测量变形场

图3给出了不同加载阶段, 非晶合金复合材料表面轴向应变 ε_{yy} 的分布情况. 由于散斑相关采用的图像是试样卸载后的表面形貌图, 因此这里的轴向应变 ε_{yy} 实际上反映的是塑性应变的轴向分量. 当试样加载至

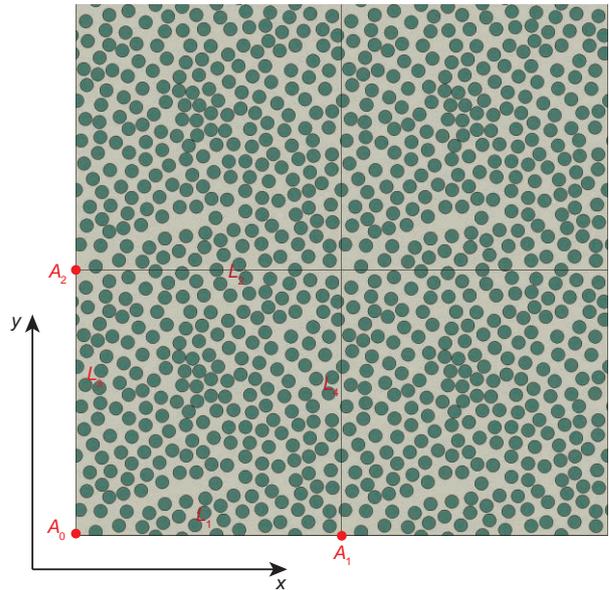


图2 (网络版彩图)具有周期性边界条件的非晶合金复合材料二维RVE几何模型

Figure 2 (Color online) 2D RVE geometric model of the amorphous alloy composite with periodic boundary condition.

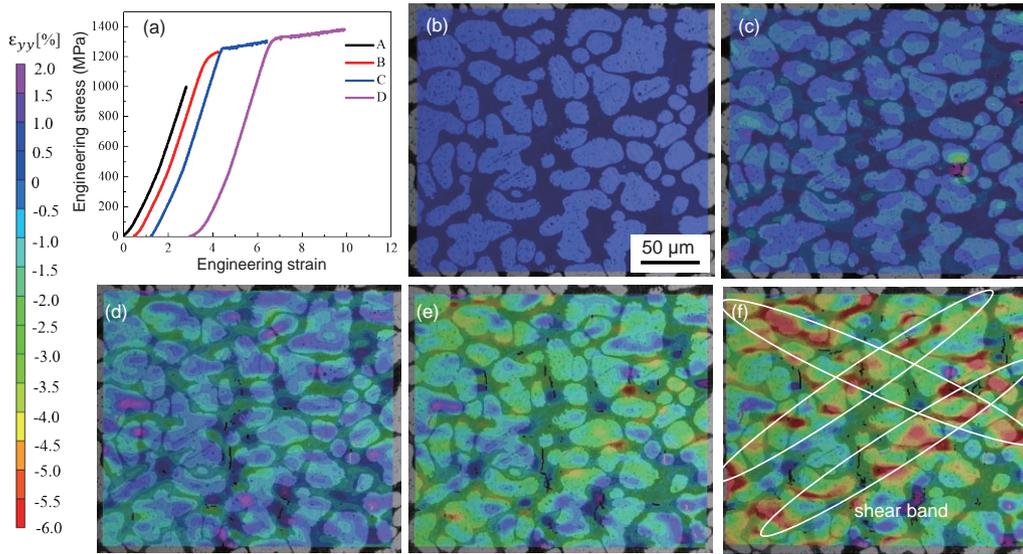


图3 (网络版彩图) 球状晶体增强非晶合金复合材料DIC结果. 不同加载阶段轴向应变分布: (a) 加载至不同变形阶段的应力应变曲线; (b) 未加载时的表面形貌; (c)–(f) 分别对应于图(a)中加载至1, 2, 3, 4阶段时的表面形貌

Figure 3 (Color online) Experimental DIC results of spherical crystal reinforced amorphous alloy composites, showing the plastic strain along y axis. (a) Stress-strain curves of the composite strained to different levels; (b) the surface morphology without loading; (c)–(f) the surface morphology corresponding to each stress-strain curve marked 1, 2, 3, 4 in (a) respectively.

1000 MPa时, 由图3(a)可以看到, 此时非晶复合材料已经发生了塑性变形, 并且应变呈现为不均匀分布; 即使在同一个晶粒内部, 不同位置的变形也不同. 此时的外载已经超过了晶体单轴压缩下的屈服强度 (~600 MPa), 复合材料内部分晶体内位错已经开动. 而BCC晶体具有多重滑移系, 也就可能引起单个晶粒内不同区域应变不同. 随着加载的应力水平超过复合材料宏观屈服点, 应变非均匀性更加显著. 图3(b)中, 应变较大的区域大都分布在晶体与非晶合金基体的界面附近, 在晶体间距较小的区域应变更大. 根据扫描电子显微镜观察剪切带演化的实验结果得知, 应力应变曲线的宏观屈服点对应于非晶合金基体剪切带的萌生^[14], 非晶合金的塑性变形集中在界面处, 这主要由界面处两相存在较大屈服强度差异引起^[35]. 尽管目前采用的DIC技术无法分辨出纳米尺度的剪切带, 但是DIC的结果仍然符合非晶合金复合材料变形的物理图像. 随着复合材料进入稳定塑性流动, 变形由晶体与非晶合金基体界面逐渐向晶体内部扩展, 同时界面处的变形依然要高于其他区域. 相比较BCC晶体, 非晶合金基体的变形量较小, 这与非晶合金具有更高的屈服强度有关. 当试样的宏观塑性应变约为6%时, 如图3(d)所示, 可以明显看出此时材料开始形成变形局部化剪切带.

4.2 有限元模拟结果分析

图4给出了非晶合金复合材料准静态压缩下有限元模拟的应力应变曲线, 同时将颗粒与基体赋予同样的材料属性得到两相各自的力学响应. 对于纯非晶合金, 材料在达到屈服点(最大应力)后, 表现出应变软化

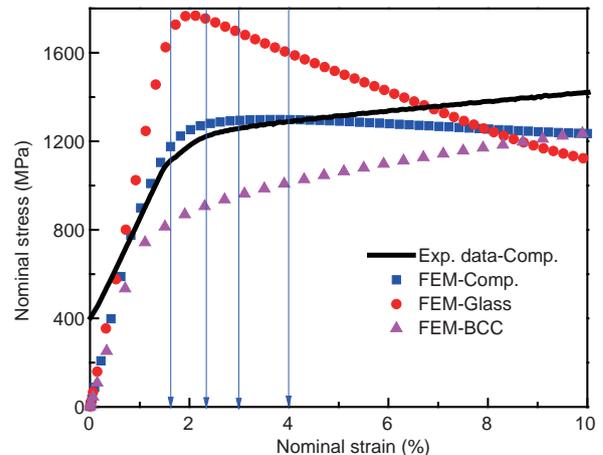


图4 (网络版彩图)有限元模拟的非晶合金复合材料、纯非晶基体相与纯BCC晶体相的应力应变曲线, 以及与复合材料的实验结果比较

Figure 4 (Color online) FEM simulation results of stress-strain curves of composites, pure amorphous matrix and pure BCC phase, and the comparison with experimental result of the composites, respectively.

的特点. 对于蕴含非晶合金基体和晶体相的复合材料, 其应力应变曲线介于纯非晶合金与纯晶体相的响应之间. 在小变形阶段($\epsilon < 4\%$), 晶体相应变强化作用占主导, 此时复合材料表现出应变硬化特征; 随后($\epsilon > 4\%$), 非晶合金的应变软化占主导, 复合材料表现为应变软化. 可以看到, 在小变形阶段, 有限元模拟的宏观材料响应与实验情况吻合较好; 随着变形增大, 有限元结果较实验得到的应力偏低. 在较大变形量时的模拟结果与实验存在不一致, 一方面, 可能自由体积理论不能很好地描述室温下非晶合金的非均匀变形行为^[22]; 另一方面, 也可能与模拟中未考虑端部约束效应有关.

我们首先对有限元模拟结果的应变分布进行了考察, 图5显示了各个变形阶段下塑性应变 ϵ_{yy} 的分布. 结合图4, 可以看到, 在外加应变为1.6%时, 复合材料处于宏观弹性区间, 非晶基体基本看不到塑性变形, 然而此时大多数晶体已经发生塑性变形, 并且单个晶体内的变形并不均匀, 这与纯BCC晶体的响应相符. 当加载应变达到复合材料屈服点, 在少数晶体与非晶合金界面位置, 晶体的塑性变形显著高于外加应变, 非晶基体开始进入塑性变形. 对于其他大多数非晶基体, 塑性变形依然非常有限. 随着进一步加载, 应变集中的区域会向晶体与非晶基体中扩展, 逐渐形成条带状的

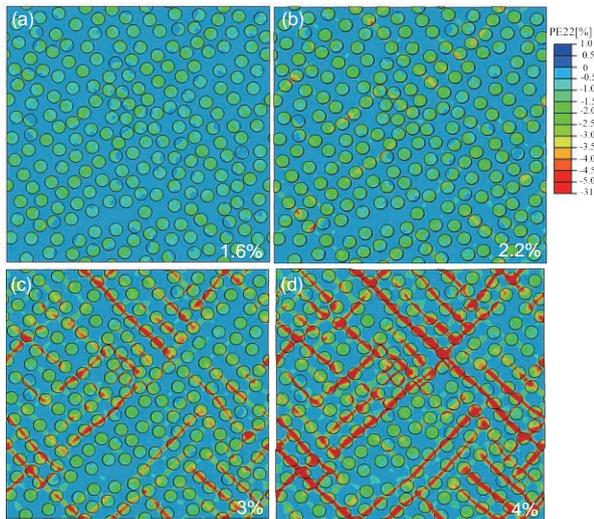


图5 (网络版彩图)非晶合金复合材料在不同应变阶段y方向的塑性累积应变. (a) 外加应变为1.6%; (b) 外加应变为2.2%; (c) 外加应变为3%; (d) 外加应变为4%

Figure 5 (Color online) FEM results of the y axis plastic strain in the amorphous alloy composite at different macroscopic strains. (a) The applied strain is 1.6%; (b) the applied strain is 2.2%; (c) the applied strain is 3%; (d) the applied strain is 4%.

应变集中区域. 当外加应变超过4%时, 材料内已经形成贯穿试样的剪切带, 外加应变主要依赖于剪切带的滑移, 此时剪切带内部最大应变甚至达到31%, 远远高于外加应变. 整体上看, 在小应变下, 有限元模拟的结果与实验测得的材料内部应变场分布非常吻合. 这也验证了有限元模型的有效性. 另一方面, 有限元模拟的结果也显示了晶体相的引入促进了多重剪切带的形成, 使应变在整体上分布更加均匀.

2.1节中非晶合金本构关系描述采用了Mises屈服准则, 因此非晶合金的塑性变形与Mises应力直接相关. 图6显示了有限元模拟各应变阶段复合材料内部Mises应力分布情况. 当外加应变为1.6%, 对比图5(a)可知晶体相进入塑性变形, 非晶合金基体尚未发生塑性变形, 由于非晶合金的屈服强度显著高于晶体相^[35], 非晶合金中的Mises应力(大多数区域为绿色条以上, >1117 MPa)显著高于晶体中的Mises应力(多数为蓝色条以下, <833 MPa). 这表明了非晶合金基体是外载的主要承担者. 同时需注意到的是, Mises应力在非晶合金中分布的不均匀性, 在界面处的应力水平显著高于其他区域(橙色条以上, >1825 MPa), 尤其是那些颗粒间距小的区域; 而在另一些区域, 非晶合金的应力水平甚至低于晶体中的Mises应力. 当加载应变超过复合材

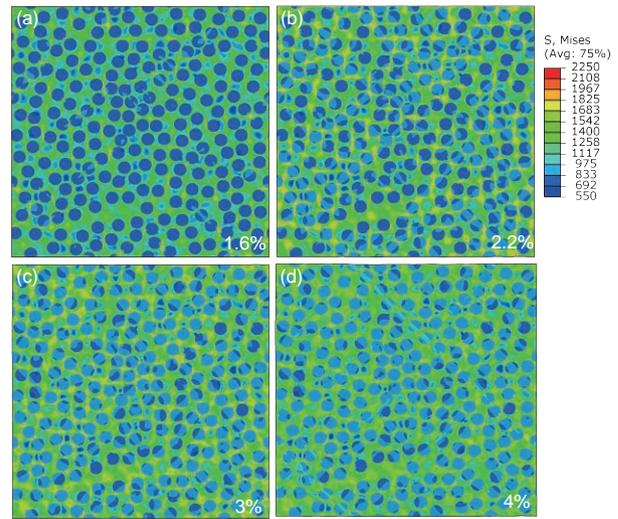


图6 (网络版彩图)非晶合金复合材料在不同应变阶段Mises应力分布. (a) 外加应变为1.6%; (b) 外加应变为2.2%; (c) 外加应变为3%; (d) 外加应变为4%

Figure 6 (Color online) FEM results of the Mises stress distribution in the amorphous alloy composite at different macroscopic strains. (a) The applied strain is 1.6%; (b) the applied strain is 2.2%; (c) the applied strain is 3%; (d) the applied strain is 4%.

料屈服点, 高应力水平区域(橙色条以上)逐渐扩大, 而晶体因应变硬化使内部应力水平也在提高. 对比图5(b), 可以发现非晶合金中最先出现塑性变形的区域是在Mises应力最大的区域, 即两相界面处. 随着应变逐渐增大, 非晶合金中高应力水平区域(橙色条以上)并未扩大, 甚至在外加应变为4%时, 区域反而变小. 尤其是形成了剪切带的区域, 应力水平有所下降. 而晶体相的应力水平仍然保持增加. 这表明非晶合金基体的承载能力减弱.

进一步, 对非晶合金的结构变量自由体积进行了跟踪, 如图7所示. 在外加应变为1.6%时, 非晶合金主要处于弹性变形状态, 自由体积含量基本维持在初始值5%左右. 当加载应变到达复合材料屈服点, 在两相界面处非晶合金基体的自由体积开始升高. 随着外加应变的增加, 自由体积的分布也出现了局部化的特征, 对比图5复合材料内部应变场的演化, 可以看到自由体积的应变集中区域与自由体积的集中区域相同, 表明剪切带内部自由体积随着应变的增加而增长. 最近, Zeng等人^[36]通过“冻结”的切削加载技术与在位监测的声发射技术, 观察到了非晶合金中剪切带自由体积随着变形量的增加而提高的现象. 剪切带内部自由体积的增长会导致黏度下降^[30,37,38], 这是图6中剪切带内的应力水平发生下降的原因, 致使非晶合金引起的应变软化超过了晶体应变硬化作用, 复合材料整体承载能力降低.

5 结论

(1) 采用球状晶体非晶复合材料腐蚀后形成的自然散斑, 利用2D-DIC方法成功得到微米尺度下复合材料内部应变场的分布. 在宏观弹性段内, 晶体相会率先

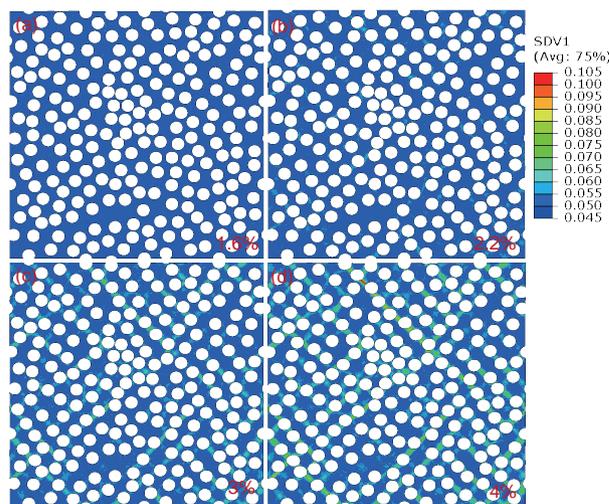


图7 (网络版彩图)非晶合金基体相在不同应变阶段自由体积的分布。(a) 外加应变为1.6%; (b) 外加应变为2.2%; (c) 外加应变为3%; (d) 外加应变为4%

Figure 7 (Color online) FEM results of the free volume distribution in the glass matrix at different macroscopic strains. (a) The applied strain is 1.6%; (b) the applied strain is 2.2%; (c) the applied strain is 3%; (d) the applied strain is 4%.

进入塑性变形; 而后在界面形成应变集中, 逐渐向周围拓展; 随着应变的增加材料内部形成变形局部化的带状区. 有限元模拟的结果与实验结果在小变形情况下相符, 验证了有限元模型模拟小变形情况的可行性. (2) 非晶合金复合材料中晶体相的存在促进了多重剪切带的形成, 复合材料的塑性变形通过众多剪切带的滑移承担; 复合材料的载荷则主要由连续的非晶基体相承担, 当非晶基体形成剪切带后, 会产生应力释放, 使非晶基体流动应力下降. (3) 复合材料中非晶合金自由体积伴随塑性变形的增加而提高, 而后引发应力水平下降.

参考文献

- 1 Wang W H. The nature and properties of amorphous matter (in Chinese). Prog Phys, 2013, 5: 177–351 [汪卫华. 非晶态物质的本质和特性. 物理学进展, 2013, 5: 177–351]
- 2 Schuh C, Hufnagel T, Ramamurty U. Mechanical behavior of amorphous alloys. Acta Mater, 2007, 55: 4067–4109
- 3 Trexler M M, Thadhani N N. Mechanical properties of bulk metallic glasses. Prog Mater Sci, 2010, 55: 759–839
- 4 Wang W H, Dong C, Shek C H. Bulk metallic glasses. Mater Sci Eng-R-Rep, 2004, 44: 45–89
- 5 Dai L H, Bai Y L. Basic mechanical behaviors and mechanics of shear banding in BMGs. Int J Impact Eng, 2008, 35: 704–716
- 6 Greer A L, Cheng Y Q, Ma E. Shear bands in metallic glasses. Mater Sci Eng-R-Rep, 2013, 74: 71–132
- 7 Hufnagel T C, Schuh C A, Falk M L. Deformation of metallic glasses: Recent developments in theory, simulations, and experiments. Acta Mater, 2016, 109: 375–393

- 8 Hays C C, Kim C P, Johnson W L. Microstructure controlled shear band pattern formation and enhanced plasticity of bulk metallic glasses containing *in situ* formed ductile phase dendrite dispersions. *Phys Rev Lett*, 2000, 84: 2901–2904
- 9 Hofmann D C, Suh J Y, Wiest A, et al. Designing metallic glass matrix composites with high toughness and tensile ductility. *Nature*, 2008, 451: 1085–1089
- 10 Qiao J, Jia H, Liaw P K. Metallic glass matrix composites. *Mater Sci Eng-R-Rep*, 2016, 100: 1–69
- 11 Song W, Wu Y, Wang H, et al. Microstructural control via copious nucleation manipulated by *in situ* formed nucleants: Large-sized and ductile metallic glass composites. *Adv Mater*, 2016, 28: 8156–8161
- 12 Hufnagel T C, Ott R T, Almer J. Structural aspects of elastic deformation of a metallic glass. *Phys Rev B*, 2006, 73: 064204
- 13 Huang Y, Khong J C, Connolley T, et al. Understanding the deformation mechanism of individual phases of a ZrTi-based bulk metallic glass matrix composite using *in situ* diffraction and imaging methods. *Appl Phys Lett*, 2014, 104: 031912
- 14 Liu X F, Chen Y, Jiang M Q, et al. Tuning plasticity of *in-situ* dendrite metallic glass composites via the dendrite-volume-fraction-dependent shear banding. *Mater Sci Eng-A*, 2017, 680: 121–129
- 15 Zhang L, Narayan R L, Fu H M, et al. Tuning the microstructure and metastability of β -Ti for simultaneous enhancement of strength and ductility of Ti-based bulk metallic glass composites. *Acta Mater*, 2019, 168: 24–36
- 16 Sun G Y, Chen G, Chen G L. Comparison of microstructures and properties of Zr-based bulk metallic glass composites with dendritic and spherical bcc phase precipitates. *Intermetallics*, 2007, 15: 632–634
- 17 Zhang T, Ye H Y, Shi J Y, et al. Dendrite size dependence of tensile plasticity of *in situ* Ti-based metallic glass matrix composites. *J Alloys Compd*, 2014, 583: 593–597
- 18 Wang J, Bai J, Li L, et al. Dendrite size dependence of mechanical properties of *in-situ* Ti-based bulk metallic glass matrix composites. *Mater Sci Eng-A*, 2017, 704: 77–81
- 19 Zhang L C, Jiang F, Zhang D H, et al. The effect of the second phase on the mechanical properties of a Zr-based amorphous alloy composite (in Chinese). *Sci Sin-Phys Mech Astron*, 2008, 58: 455–464 [张临财, 江峰, 张德红, 等. 第二相对Zr基非晶复合材料力学性能的影响. *中国科学: 物理学 力学 天文学*, 2008, 58: 455–464]
- 20 Li J C, Chen X W, Chen G. Review on the FEM analysis on mechanical behavior of bulk metallic glass (in Chinese). *Chin J Solid Mech*, 2010, 31: 76–84 [李继承, 陈小伟, 陈刚. 块体金属玻璃力学行为有限元模拟研究进展. *固体力学学报*, 2010, 31: 76–84]
- 21 Gao Y F. An implicit finite element method for simulating inhomogeneous deformation and shear bands of amorphous alloys based on the free-volume model. *Model Simul Mater Sci Eng*, 2006, 14: 1329–1345
- 22 Homer E R. Examining the initial stages of shear localization in amorphous metals. *Acta Mater*, 2014, 63: 44–53
- 23 Hardin T J, Homer E R. Microstructural factors of strain delocalization in model metallic glass matrix composites. *Acta Mater*, 2015, 83: 203–215
- 24 Jiang Y, Qiu K. Computational micromechanics analysis of toughening mechanisms of particle-reinforced bulk metallic glass composites. *Mater Des (1980-2015)*, 2015, 65: 410–416
- 25 Qiao J W, Zhang T, Yang F Q, et al. A tensile deformation model for *in-situ* dendrite/metallic glass matrix composites. *Sci Rep*, 2013, 3: 2816
- 26 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
- 27 Wang H W, Kang Y L, Xie H P. Advance in digital speckle correlation method and its application (in Chinese). *Adv Mech*, 2005, 55: 195–203 [王怀文, 亢一澜, 谢和平. 数字散斑相关方法与应用研究进展, *力学进展*, 2005, 55: 195–203]
- 28 Joo S H, Kato H, Gangwar K, et al. Shear banding behavior and fracture mechanisms of $Zr_{55}Al_{10}Ni_5Cu_{30}$ bulk metallic glass in uniaxial compression analyzed using a digital image correlation method. *Intermetallics*, 2013, 32: 21–29
- 29 Wu Y, Bei H, Wang Y L, et al. Deformation-induced spatiotemporal fluctuation, evolution and localization of strain fields in a bulk metallic glass. *Int J Plast*, 2015, 71: 136–145
- 30 Spaepen F. A microscopic mechanism for steady state inhomogeneous flow in metallic glasses. *Acta Metall*, 1977, 25: 407–415
- 31 Huang R, Suo Z, Prevost J H, et al. Inhomogeneous deformation in metallic glasses. *J Mech Phys Solids*, 2002, 50: 1011–1027
- 32 Szuecs F, Kim C P, Johnson W L. Mechanical properties of $Zr_{56.2}Ti_{13.8}Nb_{5.0}Cu_{6.9}Ni_{5.6}Be_{12.5}$ ductile phase reinforced bulk metallic glass composite. *Acta Mater*, 2001, 49: 1507–1513
- 33 Smit R J M, Brekelmans W A M, Meijer H E H. Prediction of the mechanical behavior of nonlinear heterogeneous systems by multi-level finite

- element modeling. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 1998, 155: 181–192
- 34 Li Q, Yang X X. Numerical simulation of the effective elastic properties of carbon reinforced rubber matrix composites under periodic boundary conditions (in Chinese). *J Fuzhou Uni (Nat Sci Ed)*, 2013, 41: 97–103 [李庆, 杨晓翔. 周期性边界条件下炭黑增强橡胶基复合材料有效弹性性能数值模拟. *福州大学学报(自然科学版)*, 2013, 41: 97–103]
- 35 Li H Y, Qiao J W, Wang Z, et al. A semi-empirical model for predicting yielding in metallic glass matrix composites. *Scripta Mater*, 2019, 170: 71–75
- 36 Zeng F, Jiang M Q, Dai L H. Dilatancy induced ductile-brittle transition of shear band in metallic glasses. *Proc R Soc A*, 2018, 474: 20170836
- 37 Steif P S, Spaepen F, Hutchinson J W. Strain localization in amorphous metals. *Acta Metall*, 1982, 30: 447–455
- 38 Jiang M Q, Dai L H. On the origin of shear banding instability in metallic glasses. *J Mech Phys Solids*, 2009, 57: 1267–1292

Deformation field evolution and shear banding of an *in-situ* crystal reinforced amorphous alloy composite

LIU XingFa^{1,2}, CHEN Yan^{1,2*} & DAI LanHong^{1,2,3*}

¹ State Key Laboratory of Nonlinear Mechanics, Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China;

² School of Engineering Science, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China;

³ State Key Laboratory of Explosion Science and Technology, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China

The strain field and shear band behaviors of an *in-situ* crystal reinforced amorphous alloy composite at microscale were experimentally characterized by digital image correlation method. Combined with the finite element analysis, the deformation of the amorphous alloy composite was simulated, and the evolution of stress and strain fields was given out. The role of each phase during the deformation was analysed. The results show that in the macroscopically elastic range, the crystal phase first deformed plastically, then strain concentration formed at the phase interface, and gradually expanded to the surrounding. As the applied strain increased, strain localization occurred inside the material. It is found that, the plastic deformation of the composites is accommodated by shear bands, and the presence of crystal phase in the amorphous alloy composite promotes the formation of multiple shear bands. The load of the composite is mainly sustained by the continuous amorphous matrix, and the shear band forms along with a rapid increase of free volume, which leads to a decrease of flow stress and subsequent a reduced loadbearing capacity of the composite.

amorphous alloy composite, digital image correlation, plastic deformation, deformation field, shear band

PACS: 02.70.Dc, 61.43.Dq, 62.20.Fe, 81.70.Fy

doi: 10.1360/SSPMA-2019-0317