

# 非晶塑性变形机理研究新进展

孙保安 汪卫华<sup>†</sup>

(中国科学院物理研究所 北京 100190)

**摘要** 非晶合金的塑性变形机理一直是材料科学和凝聚态物理研究的热点问题之一. 文章简单介绍了近来中国科学院物理研究所在非晶合金塑性机理研究方面的最新进展, 介绍了玻璃转变和塑性变形机制之间的关联性, 以及最新的实验证据, 以及从非平衡态统计力学角度对非晶塑性变形机制的理解, 指出非晶合金的塑性和剪切带的动力学状态密切相关, 发现韧性非晶合金在变形过程中可以演化到自组织临界状态. 这对认识非晶合金的形成本质, 探索具有实际应用价值的非晶合金具有重要意义.

**关键词** 非晶合金, 塑性变形, 玻璃转变, 自组织临界性

## On the plastic deformation mechanism of metallic glasses

SUN Bao-An WANG Wei-Hua<sup>†</sup>

(*Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China*)

**Abstract** The plastic deformation mechanism of metallic glasses (MGs) has aroused much interest in the field of material science and condensed matter physics. This paper presents recent results in the study of the plastic deformation mechanism of MGs, including new experimental evidence for the correlation between glass transitions and plastic deformation, and the understanding of their plastic flow in the context of non-equilibrium statistical mechanics. It is found that the plastic deformation can naturally evolve into a self-organized critical state. This may have important implications for understanding the precise deformation mechanism of MGs.

**Keywords** metallic glasses, plastic deformation, glass transition, self-organized critical state

非晶合金是由金属熔体快速冷却得到的一种新型金属材料<sup>[1,2]</sup>. 由于凝固过程中冷却速度非常快(冷速可达  $10^3$  K/s 以上), 金属熔体来不及结晶形核, 因此在非晶合金中, 原子排列无序, 没有晶体合金中的长程有序. 非晶合金也通常被人们称为“冻结的液体”. 由于非晶合金特殊的结构, 在晶体合金中常见的一些缺陷, 如位错、晶界等, 在非晶合金中并不存在. 我们知道, 在晶体合金承受外力时, 塑性应变往往通过产生位错来承担. 由于使位错滑移的力远远小于原子的结合力, 因此在晶体合金塑性变形时, 外来能量可以很容易通过位错的滑移耗散掉. 但在非晶合金变形时, 并没有很好的能量耗散机制. 一方面, 这使得非晶合金具有很高的强度和优异的弹性性能, 另一方面也使得非晶合金的塑性大大降低, 限制了其在结构材料领域的应用. 非晶合金的室温

变形具有两个典型的特征: 剪切局域化和剪切软化. 所谓剪切局域化, 是指在合金变形时, 几乎所有的应变都高度集中在厚度只有几十个 nm 左右的剪切带内. 同时, 剪切带由于承受极大的应变, 内部温度升高, 并且在剪切力的作用下还会发生膨胀效应, 从而使剪切带迅速扩展, 即所谓的剪切软化. 剪切带的不稳定扩展会形成裂纹, 造成非晶的灾难性断裂. 目前, 虽然人们对剪切带进行了大量的研究, 但对剪切带的形成机理, 内部结构变化过程(尤其是扩展运动过程), 还不是很清楚<sup>[3]</sup>. 同时, 人们研究发现, 尽管剪切带会造成非晶的灾难性断裂, 但有时多重剪切带的产生和相互作用, 如网络状分布的多重剪切带, 可以起到耗散能量、分散应力的作用, 因此可以在一

2010-07-29 收到

<sup>†</sup> 通讯联系人. Email: whw@aphy. iphy. ac. cn

定程度上有利于非晶合金的塑性<sup>[4]</sup>。但多重剪切带之间如何相互作用、扩展,如何影响非晶合金的塑性,都有待进一步研究。

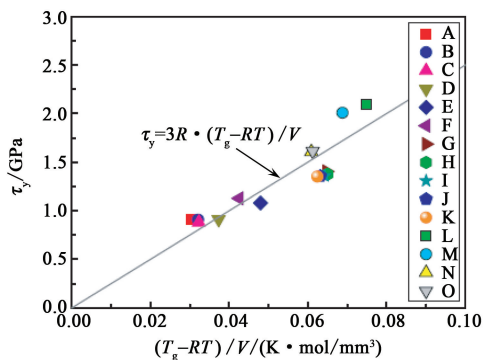


图1 非晶合金中屈服应力  $\tau_y$  和玻璃转变温度  $T_g$  的关系,  $R$  为气体常数,  $RT$  为室温,  $V$  为非晶的摩尔体积<sup>[5]</sup>

前些年,中国科学院物理研究所汪卫华研究组开发出一系列大塑性非晶合金材料,为研究非晶塑性机理这一材料和物理的重要问题提供了很好的模型体系。此后,该研究组一直致力于非晶塑性机理的研究,并在最近取得新的进展。在非晶合金研究中,玻璃转变和形变是两个非常重要的基本科学问题。玻璃转变是研究液体向非晶态固体转变过程中如何流动的一个问题,而形变则是研究在外力作用下非晶的内部结构、性能如何变化的一个问题。这两个问题貌似不相关,实际上,在大多数情况下也是被独立地进行研究的。2009年,该研究组和日本东北大学合作,首先发现非晶合金的塑性形变和玻璃转变密切相关,发现非晶合金室温下的屈服应力和玻璃转变温度之间符合很好的线性关系(见图1),比例常数正比于气体常数,反比于非晶的摩尔体积;并且从热力学的基本定律出发,对屈服应力和玻璃转变温度之间的这种关系给出了很好的解释<sup>[5]</sup>。屈服应力是开始使非晶发生塑性流动的应力,而玻璃转变温度则是使非晶开始向过冷液体转变的温度。这说明,在驱使非晶流动的过程中,应力和温度两者所起的作用是等效的,两者之间只差一个比例常数。此后,在多年研究非晶合金中的玻璃转变、弹性性能和非晶形变的基础上,该研究组进一步考察了玻璃转变和塑性形变的关系。由于非晶态是一种亚稳态,因此在温度升高的过程中,通常会发生弛豫现象,即非晶合金向更低的能量状态的演化。弛豫是一种动力学过程,需要一定的激活能。在非晶向过冷液体转变之前发生的弛豫过程通常称为 $\beta$ 弛豫。通常认为这种弛豫的累积会使非晶态发生向过冷液态质的转变,即玻璃转变。因此, $\beta$ 弛豫对非晶的玻璃转变起

着非常重要的作用。通过对大量非晶合金的实验测量,他们发现非晶合金的塑性形变的基本单元——剪切转变区域(非晶中由几十个或上百个原子组成的较松散的团簇)和 $\beta$ 弛豫在激活能上几乎相等(图2)。这说明,在微观机制上,非晶的形变和玻璃转变有共同的结构起源<sup>[6]</sup>。这些研究工作均表明,非晶形变机理问题和玻璃转变一样,可以统一从流动(flow)的角度进行研究。

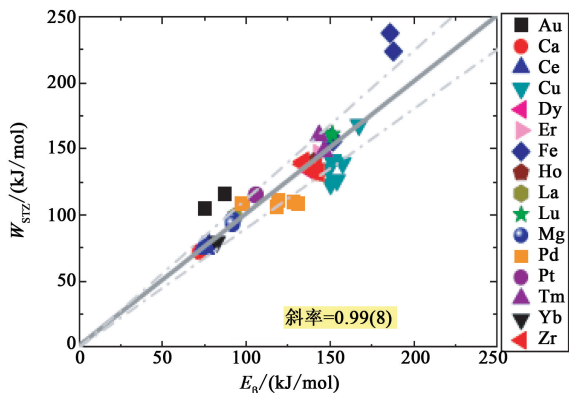


图2 不同非晶合金中 $\beta$ 弛豫激活能和STZ激活能之间的关系<sup>[6]</sup>

前面已经陈述非晶合金的塑性和非均匀流变密切相关。在受限制的加载条件下(如压缩、纳米压痕等),非晶合金的应力—应变曲线上通常会出现锯齿流变现象,一个锯齿通常包括缓慢上升的应力部分和快速下降的部分。目前,通常认为上升的应力部分为弹性的再加载过程,而快速下降的部分代表着剪切带的迅速软化扩展过程,即锯齿流变反映了剪切带的间隙性运动的特征,因此,研究锯齿流变现象可以从时域上来研究剪切带动力学。经典的非晶形变的理论“自由体积理论”<sup>[7]</sup>和“剪切转变区域理论”<sup>[8]</sup>虽然可以用来解释非晶变形的局域化即剪切带的形成,但并不能解释这种锯齿流变现象。另外,虽然人们目前普遍认为锯齿流变现象是剪切带运动在应力—应变曲线上的反映,但一个锯齿到底是对应一条剪切带的扩展还是多条剪切带的同时扩展,这些问题都不是很清楚。

最近,该研究组从流动的角度采用动力学的方法,系统地研究了锯齿流变现象及其与非晶塑性的关联。图3为典型的脆性非晶合金和韧性非晶合金应力—应变曲线上锯齿流变现象的对比。可以看出,它们的锯齿形状明显不同,韧性非晶合金明显比脆性非晶合金的锯齿形状复杂。该研究组采用了动力学中比较常见的时间序列分析及统计方法,对具有不同塑性的非晶合金的锯齿流变进行了研究,发现

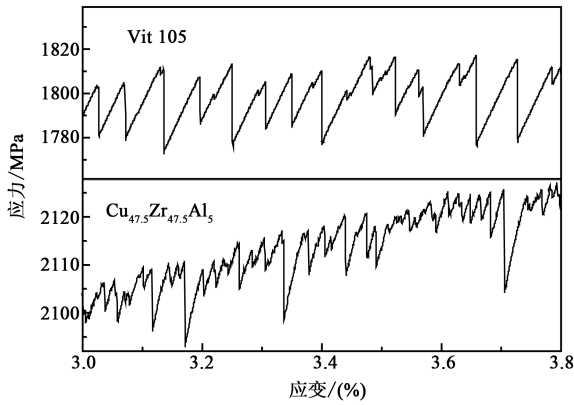


图3 脆性非晶合金(Vit105)和韧性非晶合金  $\text{Cu}_{47.5}\text{Zr}_{47.5}\text{Al}_5$  应力-应变曲线上锯齿流变对比<sup>[10]</sup>

在脆性非晶合金(塑性应变 $<5\%$ )中,剪切带动力学具有混沌行为特点,表现为锯齿大小的分布呈现峰状分布,具有一定的相关作用维数和正的李雅普诺夫指数;而韧性非晶合金(塑性应变 $>10\%$ )在变形过程中剪切带可以演化到自组织临界状态,表现为锯齿在一定范围内呈现幂律(power-law)分布.混沌和自组织临界状态是动力学中两种不同的状态.混沌通常表现为系统行为对初始条件特别敏感,初始条件极微小的差别可以造成系统行为的巨大差异;而自组织临界性通常表现为动力学事件在时间或空间上没有特征的尺度分布(scale-free),内部大量的动力学单元之间的复杂相互作用等.和混沌状态相比,自组织临界性则是一种比较稳定的状态,具有一定的抗外界干扰能力,因为外界的小的扰动可以通过内部动力学单元之间的相互作用来耗散掉.这种动力学状态的出现是非晶合金具有塑性的重要原因之一.目前人们发现,在自然界及物理、生物等领域很多复杂动力学系统中,都存在自组织临界状态<sup>[9]</sup>,如地震、磁畴动力学、材料的断裂等.韧性非晶合金能演化到这种动力学状态,说明其在变形过程中剪切带的运动是非常复杂的,必须考虑多重剪切带之间的相互作用.因此他们提出了一个多重剪切带的动力学模型,在这个模型中考虑了剪切带之间的相互作用项.随后通过对这个模型的理论分析及数值计算,结果表明大量剪切带在相互作用下可以自然地演化到自组织临界状态,计算所得到的锯齿分布幂指数和实验得出的结果基本一致(见图4).研究结果表明,在韧性非晶合金中,单个锯齿并不对应一条剪切带的传播或扩展,而是多个剪切带之间协同运动的结果.这对人们认识非晶合金的塑性变

形机理,控制剪切带的形成和发展,提高非晶合金的塑性具有重要意义.另一方面,他们的结果表明,多重剪切带相互作用的模型与描述地壳运动的力学模型在形式上有相似性,因此,韧性非晶合金或许可以作为模拟地壳动力学及地震机制的一个模型体系.该工作发表在近期的 Phys. Rev. Lett 上<sup>[10]</sup>.

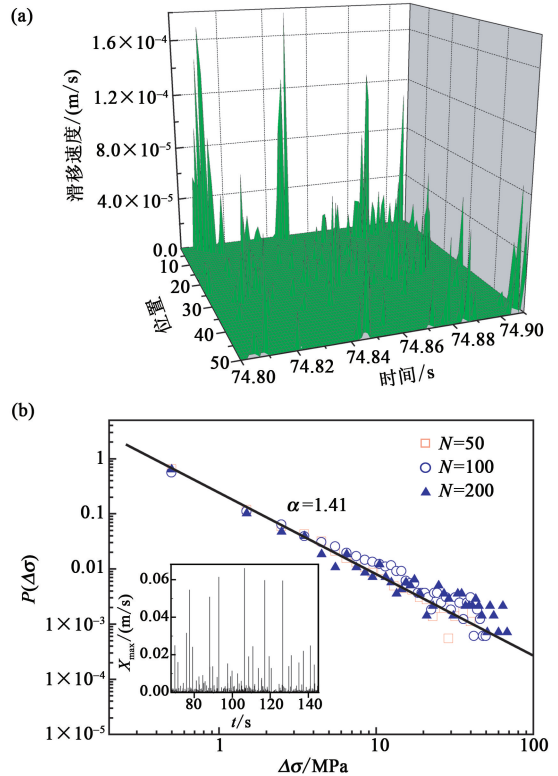


图4 (a) 理论数值计算的剪切带滑移速度在空间和时间上的分布,可以看到具有各种不同大小的剪切带协同运动;(b) 由多重剪切带模型数值分析计算得出的锯齿大小的概率分布函数  $P(\Delta\sigma)$ ,能很好地满足  $P(\Delta\sigma) = \Delta\sigma^{-\alpha}$  (其中  $\alpha = 1.41$ ),图中  $N$  为模拟的系统大小<sup>[10]</sup>. 插图为剪切带最大的滑移速度  $X_{\max}$  与加载时间  $t$  的关系

### 参考文献

- [1] Wang W H. Prog. Mater. Sci., 2007, 52: 540
- [2] Greer A L. Science, 1995, 267: 1947
- [3] Schuh C A, Hufnagel T C, Ramamurty U. Acta Mater., 2007, 55: 4067
- [4] Das J *et al.* Phys. Rev. Lett., 2005, 94: 205501
- [5] Liu Y H, Liu C T, Wang W H *et al.* Phys. Rev. Lett., 2009, 103: 065504
- [6] Yu H B, Wang W H, Bai H Y *et al.* Phys. Rev. B, 2010, 81: 220201
- [7] Spaepen F. Acta Metall., 1977, 25: 407
- [8] Argon A S. Acta Metall., 1979, 27: 47
- [9] Jensen J S. Self-organized Criticality. Cambridge: Cambridge Univ. Press, 1998
- [10] Sun B A, Yu H B, Jiao W *et al.* Phys. Rev. Lett., 2010, 105: 035501