

非晶合金塑性理论研究进展

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)

摘要: 非晶合金是一类兼具玻璃和金属双重特性的新型材料, 具有一系列优异的力学、物理和化学性能, 已经在国防、空天等领域显示出广阔的应用前景。非晶合金内部原子排列长程无序、短程有序, 没有位错、晶界等传统意义上的晶体缺陷。因此, 基于位错、孪生等微观机制的经典塑性理论在描述这类材料的塑性行为时遇到了极大的挑战。目前普遍认为, 非晶合金宏观塑性流动是微观动态“流动事件”时空演化的结果。但是, 对于“流动事件”的认知还很不清楚。主要介绍了目前几种代表性的非晶塑性流动理论: 自由体积理论、剪切转变理论、剪切转变区理论以及协同剪切模型, 并对非晶塑性流动的结构起源以及局部化剪切带机理进行了评述, 最后简要展望了非晶塑性机理发展的几个问题。

关键词: 非晶合金; 塑性流动; 塑性理论; 流动局部化

中图分类号: TG139.8 **文献标识码:** A **文章编号:** 1674-3962(2014)05-0257-08

Advances in Plasticity Theory for Amorphous Alloys

JIANG Minqiang

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

Abstract: Amorphous alloys represent a class of new materials with both glassy structure and atomic bonding, possessing a series of excellent mechanical, physical and chemical properties and thus showing widely potential applications in fields of defense and aerospace projects. Atomic packing is long-range disordered, but short-range ordered in amorphous alloy, without traditional crystalline defects such as dislocations and grain boundaries. Therefore, the classical theory of plasticity based on dislocations and twins poses a great challenge to describe the plasticity of amorphous alloys. It has been well accepted that macroscopic plastic flow of amorphous alloys is a result of the spatiotemporal evolution of microscopic dynamic "flow event", though it is still unclear. In this paper, we briefly review several representative theories for amorphous plasticity including free volume theory, shear transformation theory, shear transformation zone theory and cooperative shear model. In addition, the possible structural origin of amorphous plasticity and our recent advances in understanding the plastic flow localization into shear-bands are reviewed. Finally, we identify a number of important points that deserve further investigation in this field.

Key words: amorphous alloy; plastic flow; plasticity theory; flow localization

1 前言

一般而言, 固体的弹性变形主要取决于内部原子之间的相互作用, 而塑性变形则需要考虑微观结构细节。传统晶态固体的塑性流动可以用基于位错、孪晶等机制的经典塑性理论描述。但是, 非晶合金(也称金属玻璃)

内部原子排列呈现长程无序性, 且不存在位错、晶界等传统意义上的晶体缺陷, 这导致经典塑性理论遇到了前所未有的挑战。这一挑战的最根本原因在于对非晶合金原子结构图像的认知还远不完善^[1-6]。尽管如此, 关于非晶合金的塑性流动, 有一个基本的图像得到了该领域内的广泛认可。那就是塑性流动的元过程是一种在激活能驱动下能够容纳剪切变形的局部原子瞬态重排过程。这一动态结构重排过程通常被称为“流动事件(Flow Event)”。因此, 如何建立这种微观动态“流动事件”与宏观塑性变形之间的联系, 以及捕捉、表征在变形过程中“流动事件”的时空演化, 就成为建立非晶塑性理论的核心问题。

收稿日期: 2014-02-01

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(11372315)

作者简介: 蒋敏强, 男, 1979年生, 博士, 副研究员, Email: mqjiang@imech.ac.cn

DOI: 10.7502/j.issn.1674-3962.2014.05.01

2 非晶塑性理论

2.1 “自由体积”理论

最早在这个方面取得突破的是美国哈佛大学的 Spaepen F 教授。他通过发展描述玻璃和液体扩散流动的经典“自由体积 (Free-Volume)”理论^[7-8], 建立了非晶塑性流动的自由体积理论^[9]。该理论本质上是将“流动事件”看作是在应力驱动下, 单个原子以类似扩散跳跃的方式导致自由体积的产生 (见图 1), 一系列离散的原子跳跃最终引起宏观上的塑性流动。

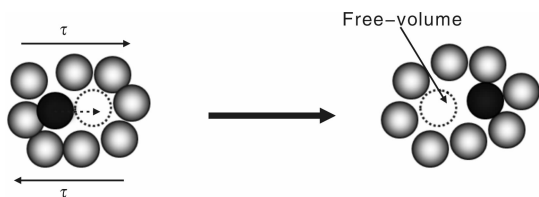


图 1 在切应力作用下单原子跳跃的自由体积模型

Fig. 1 The free-volume model of an individual atomic jump driven by shear stresses

基于这一物理图像, Spaepen 建立了以自由体积为内变量的塑性流动本构模型, 其中宏观塑性应变率 $\dot{\gamma}^p$ 可以表达为公式 (1):

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

式中, 第一项表示原子处在潜在跳跃点的几率 (这与自由体积直接相关), 其余项表示原子发生跳跃的频率 (类似于 Eyring 率因子, 取决于应力、温度和势垒)。在公式 (1) 中, χ 是考虑原子叠加的一个几何因子, v^* 是临界体积 (一般近似为原子的硬球体积), v_f 是每个原子的平均自由体积, f 是原子振动频率 (通常取为 Debye 频率), ΔG^m 是激活能, k_B 是 Boltzmann 常数, T 是温度, τ 是剪应力, Ω 是原子体积。通过考虑应力驱动引起的产生和结构弛豫导致的湮灭两个竞争过程, Spaepen 还推导了自由体积的运动方程, 如公式 (2):

$$\dot{v}_f = v^* f \exp \left(-\frac{\chi v^*}{v_f} \right) \exp \left(-\frac{\Delta G^m}{k_B T} \right) \times \left\{ \frac{2\chi k_B T}{v_f S} \left[\cosh \left(\frac{\tau \Omega}{2k_B T} \right) - 1 \right] - \frac{1}{n_0} \right\} \quad (2)$$

式中, n_0 是湮灭自由体积 v^* 所需的原子跳跃步数, S 是 Eshelby 模量。

从公式 (2) 可以看出, 非晶塑性变形的自由体积理论本质上是将热涨落驱动下原子平衡扩散模型推广到剪应力 (或偏应力) 驱动下的原子非平衡跳跃, 从而导致自由体积的产生。在晶态固体中, 这种类似于扩散的原

子跳跃通常需要压力或者正应力梯度驱动。然而, 在这个模型中, 原子跳跃主要是由剪应力驱动。我们推测, 其物理图像可能起源于非晶合金固有的原子尺度的剪胀效应^[10-12], 即无序原子在受到偏应力作用时将自发的产生一个球应力, 驱动原子扩散跳跃, 从而引起自由体积的产生。自由体积理论提供了一种描述非晶合金塑性流动相对完整且简单实用的模型体系, 并为此后非晶塑性理论的进一步发展指明了方向。自 1977 年建立以来, 自由体积理论得到广泛的应用和诸多实质性的发展。例如, 在自由体积理论框架下, Johnson 发展了一个稳态流动条件下动态自由体积的自洽模型^[13]。最近, 该理论模型还被发展来描述非晶合金的大变形^[14]、热力耦合效应^[15-16], 甚至塑性流动的局部化剪切带过程^[17-19]。

2.2 “剪切转变”理论

受经典皂泡变形模型实验的启发^[20-21], 美国麻省理工学院的 Argon A S 教授提出了“剪切转变 (Shear Transformation, ST)”的概念^[22], 认为参与“流动事件”的原子不是单个, 而是几个到数百个。“流动事件”被描述为包括几个到几百个原子的集团 (Group) 的局部结构重排, 见图 2。在热力耦合作用下, 材料通过一系列的“剪切转变”过程, 容纳局部的塑性剪切变形, 最终以一种类似雪崩 (Avalanche) 自组织的方式导致宏观尺度的塑性流动。在这个理论中, 原子集团的“剪切转变”被认为是非晶合金塑性变形的基本单元或过程。Argon 进一步认为, 这些“剪切转变”过程并不是自由的, 而是被周围没有发生“剪切转变”的弹性介质约束着。因此, “剪切转变”类似于经典的 Eshelby 夹杂, 将在周围弹性介质中产生各项异性的弹性应力场。基于 Eshelby 的等效夹杂理论^[23], 他计算了这种“剪切转变”的激活自由能^[22,24], 如公式 (3):

$$\Delta F_0 = \left[\frac{7-5\nu}{30(1-\nu)} + \frac{2(1+\nu)}{9(1-\nu)} l^2 + \frac{1}{2\gamma_0} \frac{\tau_0}{\mu(T)} \right] \mu(T) \gamma_0^2 \Omega_0 \quad (3)$$

式中, ν 是泊松比, τ_0 是无热剪切应力, $\mu(T)$ 是温度依赖的剪切模量, Ω_0 是 STZ 的特征体积。括号中的第 2 项表征了伴随着“剪切转变”的体胀能, 这里 l 是体胀应变和剪切应变的比值。“剪切转变”的特征剪切应变 γ_0 依赖于材料和状态, 通常在百分之几。将非晶合金的典型参数代入方程 (3), 可以得到单个“剪切转变”的激活能, 通常在 $1 \sim 5 \text{ eV}$ ^[24]。此外, 宏观塑性应变率可以表达为公式 (4):

$$\dot{\gamma}^p = \alpha_0 f \gamma_0 \exp \left(-\frac{\Delta F_0}{k_B T} \right) \sinh \left(\frac{\tau V_a}{k_B T} \right) \quad (4)$$

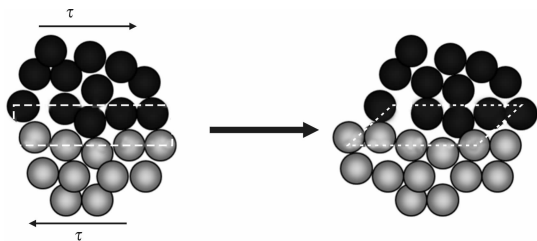


图2 一个“剪切转变”过程的示意图

Fig. 2 Illustration of a “shear transformation” process

式中， $V_{\alpha} = \gamma_0 \Omega_0$ 是 STZ 的激活体积， α_0 是与发生塑性变形的材料体积分数相关的因子。Argon 特别强调^[25-26]，“剪切转变”不是非晶内部的结构缺陷，而是一种描述原子集团结构重排的动态事件或过程。但是，这并不意味着“剪切转变”与材料结构无关。相反，“剪切转变”强烈依赖材料的微观结构，易于在自由体积较高的局部区域优先激活^[25]。事实上，“剪切转变”可以通过上述的 α_0 因子与自由体积关联。例如，Spaepen 就提出^[27]，只有那些高自由体积点才对塑性变形有贡献，如公式(5)：

$$\alpha_0 \propto \exp\left(-\frac{\chi v^*}{\bar{v}_f}\right) \tag{5}$$

这样，在“剪切转变”模型体系下，我们仍然可以引入自由体积这一对非晶合金流动至关重要的物理量。后来，Spaepen 在自由体积模型框架下，通过定义类似“剪切转变”的“流动缺陷(Flow Defect)”概念，将单原子跳跃成功推广到了多原子的重排，也可以获得类似方程(4)的塑性应变率方程。但是，如果在“剪切转变”模型中考虑自由体积，那么必须解决“剪切转变”和自由体积演化的相互作用机制这一关键问题。

自从“剪切转变”理论提出以后，各国科学家都试图通过实验、理论和模拟来捕捉、描述这种独特的应力驱动下的热激活事件。直到最近，Schall 等^[28]才通过一种胶体玻璃的剪切实验，获得了这种“剪切转变”的实验图像。图3给出了胶体玻璃中一个“剪切转变”事件的二维图像。图3中虚线圆圈内的胶体粒子(可比拟于原

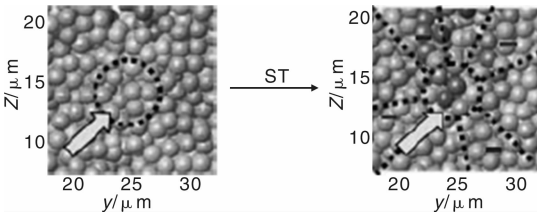


图3 胶体玻璃中观察到的“剪切转变”事件的二维图像

Fig. 3 Two-dimensional images of a “shear transformation” event observed in a colloidal glass

子)通过经历一次“剪切转变”，容纳了 10% 左右的剪切应变，同时导致周围弹性介质中产生了 4 个负应变区域(Eshelby 应变场)。但是，从微观单个“剪切转变”过程到宏观塑性流动的物理图像还不清晰，这也是目前非晶塑性理论的热点之一^[24,26,29-31]。

2.3 “剪切转变区”理论

1998 年，Flak M L 和 Langer J S 基于对非晶合金粘塑性行为的分子动力学模拟，提出了非晶合金塑性的“剪切转变区(Shear Transformation Zone, STZ)”模型^[32]。该理论虽然和 Argon 提出的“剪切转变”模型在名称上仅有一字之差，但却有本质的区别。这主要体现在，“剪切转变区”理论认为在非晶合金中存在一些区域，这些区域能够在自由体积辅助下发生从非弛豫态到弛豫态的一次性剪切转变；而“剪切转变”理论则认为这些区域并不事先存在，“剪切转变”是原子集团经历一系列复杂结构弛豫的瞬时动态结果^[25-26]。两种理论在本质上的差异，导致在理论建模上也存在显著的不同：“剪切转变区”常常被假定为独立的、无相互作用的，因此，可以用平均场方法处理；“剪切转变”由于 Eshelby 弹性场的存在，因此是强烈相互作用的，其演化应该是类似于雪崩的自组织过程^[29]。尽管如此，两种模型还是具有一定的联系，“剪切转变区”实际上正好对应于易发生“剪切转变”的富自由体积区域^[25]。虽然，在目前的文献中，通常混淆这两种理论模型，将它们统称为“剪切转变区”，但是必须意识到两者的本质区别。

在平均场理论框架下，通过假定“剪切转变区”具有二态性，即“未转变态”和“转变态”，Falk 和 Langer 建立了两种状态下“剪切转变区”数密度为内变量的非晶塑性本构模型。塑性应变率可以表述为“剪切转变区”的激活体积乘以净转变率^[32-34]，如公式(6)：

$$\dot{\gamma}^p = V_a [R_+ n_+ - R_- n_-] \tag{6}$$

式中， n_{\pm} 为分别处于“未转变态”(定义为“+”)和“转变态”(定义为“-”)的“剪切转变区”数密度， R_+ 为“剪切转变区”从“+”态到“-”态的转变率， R_- 则正好相反。“剪切转变区”数密度 n_{\pm} 的运动方程可以表达为公式(7)^[32-34]：

$$\dot{n}_{\pm} = R_{\mp} n_{\mp} - R_{\pm} n_{\pm} + (\tau \dot{\gamma}^p) (C_{cr} - C_{ann} n_{\pm}) \tag{7}$$

式中，后边前两项表示“剪切转变区”在应力驱动下的相互转变率，后两项分别表示“剪切转变区”的产生和湮灭。这里“剪切转变区”的产生和湮灭都正比于塑性功率，比例系数分别为 C_{cr} 和 C_{ann} 。通过对“剪切转变区”理论的进一步发展，Falk、Langer 等解决了非晶合金塑性的一系列问题，比如热效应^[34]、局部化^[33]、空洞化^[35]、大尺度塑性颈缩^[36]、韧脆转变^[37]等。从理论

建模的角度看,“剪切转变区”模型可以看作是“剪切转变”理论的一种平均场近似和解耦处理,解决了“剪切转变”在时间上的演化问题。但是,这种近似处理抹掉了“剪切转变”的空间演化图像。

2.4 “协同剪切”模型

为了理解单个“剪切转变”事件如何演化到宏观流动,加州理工学院 Johnson W L 教授和哥廷根大学 Samwer K 教授提出了非晶塑性流动的“协同剪切模型 (Cooperative Shear Model, CSM)”^[38]。他们认为,非晶合金的塑性机理类似于玻璃液体中的弛豫机理^[31]。在弛豫过程中,一般存在两个动力学过程:快的 β 弛豫和慢的 α 弛豫^[39]。这两个过程可以分别比拟于单个“剪切转变”事件和基本塑性事件。图 4 给出了在“势能形貌 (Potential Energy Landscape, PEL)”理论^[40-41] 框架下两者的比拟示意。可以看出,快的 β 弛豫实际上是系统在固有结构 (Inherent Structure, IS) 内子盆地之间的随机跳跃事件。连续的 β 弛豫将使系统从一个能级较高的 IS 跃迁到能级较低的 IS,从而导致慢的 α 弛豫的产生。Johnson 及其合作者进一步通过实验证实,非晶合金变形过程中的弹性约束的“剪切转变”与 β 弛豫密切相关^[31,42]。这些滞弹性的“剪切转变”,通过类似滤渗的方式,导致周围弹性基体的崩塌。这种弹性崩塌引起的屈服事件与慢的 α 弛豫紧密联系。基于 Frenkel 的理论^[43], Johnson 和 Samwer 推导了在外力 τ 作用下,由一系列“剪切转变”事件激发一个塑性事件的激活能^[38],如公式(8):

$$W_{\tau} = 4\bar{R}G_{0r}\gamma_c^2 [(\tau_c - \tau)/\tau_c]^{3/2} \zeta \Omega_0 \quad (8)$$

式中, \bar{R} 是折叠率, G_{0r} 是无应力状态下的剪切模量, γ_c 是临界的剪切应变, τ_c 是临界屈服应力, ζ 是 Eshelby 因子。进一步假定,当这种基本塑性事件的时间尺度与宏观加载尺度相当时,材料发生塑性流动。因此,

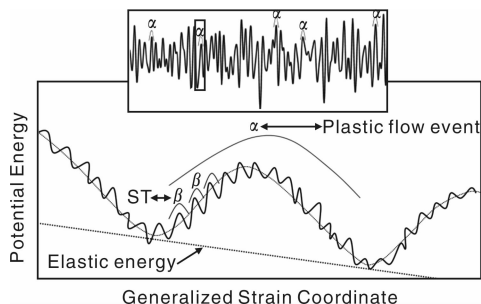


图 4 “剪切转变”和塑性“流动事件”的一维势能形貌示意图, 插图为固有结构间 α 弛豫的势能形貌全景

Fig. 4 Schematic of “shear transformation” events and resulting a plastic irreversible hopping event in a potential energy landscape in the vicinity of a megabasin. Inset: a full-view of potential energy landscape

宏观塑性应变率可以表达为公式(9):

$$\dot{\gamma}^p = \omega_0 \exp \left(-\frac{W_{\tau}}{k_B T} \right) \quad (9)$$

式中, ω_0 是一个尝试频率。

可以看出,“协同剪切”模型给人们呈现了一种可能的从单个“剪切转变”事件演变到宏观塑性流动的物理图像。基于此模型,最近通过分子动力学模拟或者间接实验,“剪切转变”事件的两个关键参数:激活能^[44]与特征尺寸^[45-46]分别被确定。但是,“协同剪切”模型仍然是一种平均场意义上的理论解释,也未能给出“剪切转变”事件的空间演化规律。

3 塑性流动的结构起源

虽然非晶合金塑性的基本过程还很不清楚,但是普遍认为这种基本过程的激活必然有其明确的结构起源。早在 20 世纪 80 年代初,美国田纳西大学 Egami T 教授等就从理论上预测,非晶合金短程有序、长程无序的结构本质将导致材料结构在长程尺度上(大于 1 nm)存在固有的非均匀性,并引起一些力学性质如应力、应变、弹性模量等在纳米尺度的空间非均匀性^[47]。最近,这一预测得到了相关的实验验证^[48-50]。考虑到基本“流动事件”的特征尺寸通常在亚纳米到纳米尺度^[45-46],这种纳米尺度的结构非均匀性可能对非晶合金的塑性流动起着至关重要的作用。近期一些工作显示^[51-52],纳米尺度结构非均匀性显著的一些非晶合金体系能够表现出良好的宏观塑性。事实上,Argon 和 Spaepen 很早就提出“流动事件”易于在自由体积较高的局部区域优先激活^[22,27]。非晶合金的结构可以看作是自由体积较高的“类液体区 (Liquid-Like Region)”分散在自由体积较低的“类固体区 (Solid-Like Region)”而形成的两相结构^[25];前者通常作为潜在的“剪切转变”发生区域,而后者为弹性基体。但是,通过对一种钇基非晶合金进行超声加速晶化, Ichitsubo 等推断出一种截然相反的结构非均匀图像,即非晶合金结构主要由被“类液体区”包围的“类固体区”组成^[53]。最近, Liu 等^[54]和 Yang 等^[55]分别采用精细扫描探针技术分析发现,纳米尺度“类液体区”和“类固体区”的空间分布要复杂得多,结构的液-固性质在空间上满足近似的高斯分布。这意味着,非晶合金局部结构的液体性质和固体性质之间并不存在清晰的界限,而是一种缓慢的过渡。非晶合金结构呈现固体或者液体性质还取决于外部条件和观测手段,这恰恰反映了这类无序材料的粘弹性和流变学特性。

到目前为止,人们对于非晶合金的微观结构,尤其

是在中程有序以及长程无序尺度上^[5-6]的认识还十分有限。这种局限性使得在理解基本“流动事件”上缺乏坚实的材料学基础，这也反过来阻碍了对“流动事件”及其时空演化的深刻理解。

4 塑性流动局部化

在室温下，非晶合金塑性流动的一个显著特征就是极易局部化形成剪切带^[56-58]。尽管非晶塑性起源于结构重排模式的“流动事件”这一点已经得到了普遍认可，但是塑性局部化的起源一直存在广泛的争议^[59]。一般认为，非晶合金中某些不均匀处的粘度降低进而导致塑性变形能力急剧下降是形成局部化剪切带的主要原因。但是，对于这种粘度降低的原因一直以来存在着两种截然不同的观点：自由体积软化^[9,17,60]和绝热软化^[61-62]。

自由体积软化观点认为，非晶塑性流动局部化剪切带是由于一系列“流动事件”导致的局部自由体积聚集，这一过程主要由应力驱动，热不起作用。证明这一观点的最直接的实验证据就是对剪切带内的结构进行观察。Li 等^[63]和 Gu 等^[64]分别对变形后金属玻璃中的剪切带结构进行了高分辨的透射电镜(HRTEM)观察(图 5a)，通过进一步的 Fourier 滤波分析，发现在剪切带内部存在高浓度的纳米尺度孔洞(图 5b)。这些纳米尺度的孔洞与过剩的自由体积区密切相关，表明在剪切带内的确存在自由体积的聚集现象。此外，非晶合金中剪切带的特征厚度通常在 10~20 nm 尺度，远远小于传统绝热剪切带的特征宽度(10~500 μm)^[65-66]。这意味着非晶合金剪切带的形成不可能由热软化单独控制。

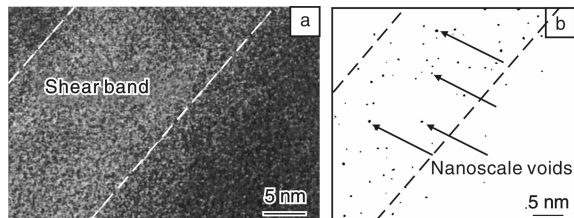


图5 一种 Zr 基非晶合金中的剪切带形貌：(a) 高分辨 TEM 图像，(b) 内部纳米尺度孔洞

Fig. 5 A shear band in a Zr-based metallic glass: (a) high-resolution TEM image and (b) nanoscale voids within it

第二种观点认为，非晶合金中局部粘度的降低，是由于变形能转化为热，引起的绝热温升超过玻璃态转变温度甚至熔点，所导致材料热膨胀软化。非晶合金的剪切带失稳类似于传统晶态合金的绝热剪切带形成^[66]，也是一种绝热软化过程。这种观点的一个间接证据是剪切带诱导的断裂面上所观察到的熔滴和带状结构^[62]。

但是，这种剪切带后期的热现象很难直接证明它的起源就是热软化。证实非晶合金中剪切带是否起源于热的最有效方法是确定剪切带内的温度。然而，由于受到空间和时间分辨率的限制，剪切带内温度的测量和预测结果从小于 0.1 K 到数千 K 都有，存在着很大的不一致性^[61,67-71]。

在自由体积理论框架下，Dai 等通过考虑热效应，揭示出非晶合金中剪切带失稳是自由体积和热耦合软化共同作用的结果^[72]。在剪切带失稳过程中，自由体积的产生和温升互相促进。其中，自由体积起主控作用，热起辅助作用，相比于绝热温升，自由体积的产生要早并且快得多^[18]，见图 6。这种耦合软化机制实际上和非晶塑性基本“流动事件”是一种应力驱动的热激活过程是一致的^[26]。Jiang 和 Dai 进一步对非晶合金的剪切带演化机制进行了研究，建立了一个剪切带演化动力学模型，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^[57]。分析表明，动量耗散与自由体积耗散的竞争平衡决定了剪切带扩展过程的临界耗散能。基于这个临界能，引入了剪切带韧性(Shear-Band Toughness)的概念，表征不同非晶合金体系对剪切带扩展的敏感性。

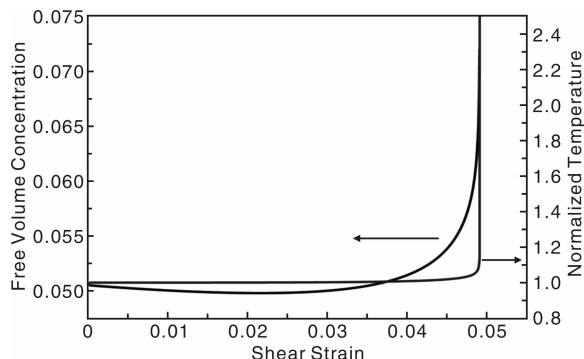


图6 自由体积和温度在剪切局部化过程中的演化

Fig. 6 Evolution of free volume and temperature during shear localization process

基于自由体积软化的主控机制，Jiang 等还对非晶合金剪切带的特征厚度进行了理论预测。剪切带特征厚度 W 可以表达为公式(10)^[73]：

$$W \approx \frac{2\pi d}{3} \left(\xi^* \frac{1}{\gamma_c} \cdot \frac{1+v}{1-v} \right)^{1/2} \quad (10)$$

式中， d 是剪切转变区尺寸， ξ^* 是剪切带内的临界自由体积浓度， γ_c 是剪切屈服应变。公式(10)表明，非晶合金中剪切带的厚度主要取决于微观“剪切转变”过程的特征尺寸以及失稳过程中“剪切转变”激活的自由体积浓度。理论预测(图 7)与实验观测(10~20 nm)具有很好的一致性。从图 7 可以看出，非晶合金剪切带厚度

背后的物理含义是“剪切转变”运动导致的局部拓扑失稳^[73]，而热塑剪切带的特征厚度主要取决于热产生和热扩散的动态平衡^[66]。

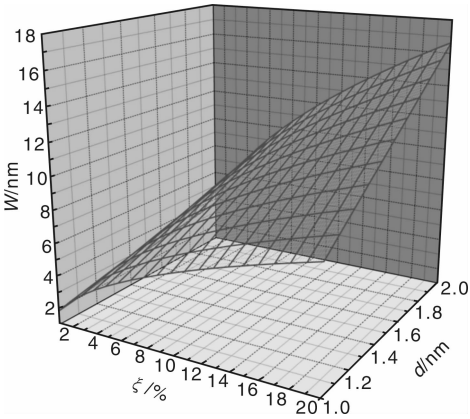


图 7 非晶合金剪切带特征厚度的理论预测
Fig. 7 Prediction of shear-band thickness in metallic glasses

5 结 语

非晶合金的大量涌现极大地挑战了基于位错、孪晶机制的经典塑性理论。这种挑战主要源于人们对于非晶合金微观结构的认识和表征还很不清楚。从目前来看，非晶塑性的研究还处于“盲人摸象”似的探索阶段，大部分还是从现象出发的“自上而下”的研究，未能呈现一个全面清晰的物理图像。非晶塑性机制应该是一个“自下而上”跨尺度的时空演化问题，今后研究需要重点关注以下几个问题：①基本“流动事件”到底是什么；②短中程有序原子团簇、自由体积等微观结构与“流动事件”的内在联系；③“流动事件”在时间和空间尺度的自组织演化规律；④塑性与弹性的耦合作用过程；⑤纳米剪切带失稳的精细图像；⑥剪切带扩展演化动力学；⑦多重剪切带行为。这些研究需要发展和建立新的实验技术、数值模拟方法和理论框架，更需要借鉴其它领域（如非线性力学、统计物理、复杂系统、流体力学等）的相关成果和概念，最终从复杂的“无序”中找出“有序”的规律。

参考文献 References

[1] Bernal J D, Mason J. Co-Ordination of Randomly Packed Shperes [J]. *Nature*, 1960, 188: 910 – 911.
[2] Miracle D B. A Structural Model for Metallic Glasses [J]. *Nature Materials*, 2004, 3: 697 – 702.
[3] Sheng H W, Luo W K, Alamgir F M, *et al.* Atomic Packing and Short-to-Medium Range Order in Metallic Glasses [J]. *Nature*, 2006, 439: 419 – 425.

[4] Zeng Q S, Sheng H W, Ding Y, *et al.* Long-Range Topological Order in Metallic Glass [J]. *Science*, 2011, 332: 1 404 – 1 406.
[5] Ma D, Stoica A D, Wang X L. Power-Law Scaling and Fractal Nature of Medium-Range Order in Metallic Glasses [J]. *Nature Materials*, 2009, 8: 30 – 34.
[6] Liu X J, Xu Y, Hui X, *et al.* Metallic Liquids and Glasses: Atomic Order and Global Packing [J]. *Physical Review Letters*, 2010, 105: 155 501.
[7] Cohen M H, Turnbull D. Molecular Transport in Liquids and Glasses [J]. *The Journal of Chemical Physics*, 1959, 31: 1 164 – 1 169.
[8] Turnbull D, Cohen M H. Free-Volume Model of the Amorphous Phase: Glass Transition [J]. *The Journal of Chemical Physics*, 1961, 34: 120 – 125.
[9] Spaepen F. A Microscopic Mechanism for Steady State Inhomogeneous Flow in Metallic Glasses [J]. *Acta Metallurgica*, 1977, 25: 407 – 415.
[10] Jiang M Q, Dai L H. Intrinsic Correlation between Fragility and Bulk Modulus in Metallic Glasses [J]. *Physical Review B*, 2007, 76: 054 204.
[11] Jiang M Q, Jiang S Y, Dai L H. Inherent Shear-Dilatation Coexistence in Metallic Glass [J]. *Chinese Physics Letters*, 2009, 26: 106 103.
[12] Dyre J C. Colloquium: the Glass Transition and Elastic Models of Glass-Forming Liquids [J]. *Rev Mod Phys*, 2006, 78: 953 – 972.
[13] Johnson W L, Lu J, Demetriou M D. Deformation and Flow in Bulk Metallic Glasses and Deeply Undercooled Glass Forming Liquids-a Self Consistent Dynamic Free Volume Model [J]. *Intermetallics*, 2002, 10: 1 039 – 1 046.
[14] Yang Q, Mota A, Ortiz M. A Finite-Deformation Constitutive Model of Bulk Metallic Glass Plasticity [J]. *Computational Mechanics*, 2006, 37: 194 – 204.
[15] Gao Y F, Yang B, Nieh T G. Thermomechanical Instability Analysis of Inhomogeneous Deformation in Amorphous Alloys [J]. *Acta Materialia*, 2007, 55: 2 319 – 2 327.
[16] Thamburaja P, Ekambaran R. Coupled Thermo-Mechanical Modelling of Bulk-Metallic Glasses: Theory, Finite-Element Simulations and Experimental Verification [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2007, 57: 1 263 – 1 273.
[17] Huang R, Suo Z, Prevost J H, *et al.* Inhomogeneous Deformation in Metallic Glasses [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2002, 50: 1 011 – 1 027.
[18] 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: 1 267 – 1 292.

- [19] Thamburaja P. Length Scale Effects on the Shear Localization Process in Metallic Glasses; a Theoretical and Computational Study [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2011, 59: 1 552 – 1 575.
- [20] Argon A S, Kuo H Y. Plastic Flow in a Disordered Bubble Raft (an Analog of a Metallic Glass) [J]. *Materials Science and Engineering*, 1979, 39: 101 – 109.
- [21] Argon A S, Shi L T. Analysis of Plastic Flow in an Amorphous Soap Bubble Raft by the Use of an Interbubble Potential [J]. *Philos Mag A*, 1982, 46: 275 – 294.
- [22] Argon A S. Plastic Deformation in Metallic Glasses [J]. *Acta Metallurgica*, 1979, 27: 47 – 58.
- [23] Eshelby J D. The Determination of the Elastic Field of an Ellipsoidal Inclusion, and Related Problems [J]. *Proceedings of the Royal Society of London, Series A*, 1957, 241: 376 – 396.
- [24] Schuh C A, Hufnagel T C, Ramamurty U. Mechanical Behavior of Amorphous Alloys [J]. *Acta Materialia*, 2007, 55: 4 067 – 4 109.
- [25] Argon A S, Demkowicz M J. What can Plasticity of Amorphous Silicon Tell Us about Plasticity of Metallic Glasses? [J]. *Metall Mater Trans A*, 2008, 39A: 1 762 – 1 778.
- [26] Argon A S. Strain Avalanches in Plasticity [J]. *Philosophical Magazine*, 2013, 93: 3 795 – 3 808.
- [27] Spaepen F. Defects in Amorphous Metals [M] // Balian R, Kleman M, Poirier J. *Physics of Defects*. Amsterdam: North-Holland Press, 1981: 133 – 174.
- [28] Schall P, Weitz D A, Spaepen F. Structural Rearrangements that Govern Flow in Colloidal Glasses [J]. *Science*, 2007, 318: 1 895 – 1 899.
- [29] Lemaître A, Caroli C. Rate-Dependent Avalanche Size in Athermally Sheared Amorphous Solids [J]. *Physical Review Letters*, 2009, 103: 065 501.
- [30] Chattoraj J, Lemaître A. Elastic Signature of Flow Events in Supercooled Liquids under Shear [J]. *Physical Review Letters*, 2013, 111: 066 001.
- [31] Harmon J S, Demetriou M D, Johnson W L, *et al.* Anelastic to Plastic Transition in Metallic Glass-Forming Liquids [J]. *Physical Review Letters*, 2007, 99: 135 502.
- [32] Falk M L, Langer J S. Dynamics of Viscoplastic Deformation in Amorphous Solids [J]. *Phys Rev E*, 1998, 57: 7 192 – 7 205.
- [33] Langer J S. Microstructural Shear Localization in Plastic Deformation of Amorphous Solids [J]. *Phys Rev E*, 2001, 64: 011 504.
- [34] Falk M L, Langer J S, Pechenik L. Thermal Effects in the Shear-Transformation-Zone Theory of Amorphous Plasticity: Comparisons to Metallic Glass Data [J]. *Phys Rev E*, 2004, 70: 011 507.
- [35] Langer J S, Lobkovsky A E. Rate-and-State Theory of Plastic Deformation Near a Circular Hole [J]. *Phys Rev E*, 1999, 60: 6 978 – 6 983.
- [36] Eastgate L O, Langer J S, Pechenik L. Dynamics of Large-Scale Plastic Deformation and the Necking Instability in Amorphous Solids [J]. *Physical Review Letters*, 2003, 90: 045 506.
- [37] Lobkovsky A E, Langer J S. Dynamic Ductile to Brittle Transition in a One-Dimensional Model of Viscoplasticity [J]. *Phys Rev E*, 1998, 58: 1 568 – 1 576.
- [38] Johnson W L, Samwer K. A Universal Criterion for Plastic Yielding of Metallic Glasses with a $(T/T_g)^{2/3}$ Temperature Dependence [J]. *Physical Review Letters*, 2005, 95: 195 501.
- [39] Johari G P, Goldstein M. Viscous Liquids and the Glass Transition. II. Secondary Relaxations in Glasses of Rigid Molecules [J]. *The Journal of Chemical Physics*, 1970, 53: 2 372 – 2 388.
- [40] Stillinger F H. A Topographic View of Supercooled Liquids and Glass Formation [J]. *Science*, 1995, 267: 1 935 – 1 939.
- [41] Debenedetti P G, Stillinger P H. Supercooled Liquids and the Glass Transition [J]. *Nature*, 2001, 410: 259 – 267.
- [42] Lind M L, Duan G, Johnson W L. Isoconfigurational Elastic Constants and Liquid Fragility of a Bulk Metallic Glass Forming Alloy [J]. *Physical Review Letters*, 2006, 97: 015 501.
- [43] Frenkel J. The Theory of the Elastic Limit and the Solidity of Crystal Bodies [J]. *Z Phys*, 1926, 37: 572 – 609.
- [44] Mayr S G. Activation Energy of Shear Transformation Zones: a Key for Understanding Rheology of Glasses and Liquids [J]. *Physical Review Letters*, 2006, 97: 195 501.
- [45] Zink M, Samwer K, Johnson W L, *et al.* Plastic Deformation of Metallic Glasses; Size of Shear Transformation Zones from Molecular Dynamics Simulations [J]. *Physical Review B*, 2006, 73: 172 203.
- [46] Pan D, Inoue A, Sakurai T, *et al.* Experimental Characterization of Shear Transformation Zones for Plastic Flow of Bulk Metallic Glasses [J]. *PNAS*, 2008, 105: 14 769 – 14 772.
- [47] Srolovitz D, Maeda K, Vitek V, *et al.* Structural Defects in Amorphous Solids Statistical Analysis of a Computer Model [J]. *Philosophical Magazine A*, 1981, 44: 847 – 866.
- [48] Poulsen H F, Wert J A, Honkimaäki V, *et al.* Measuring Strain Distribution in Amorphous Materials [J]. *Nature Materials*, 2005, 4: 33 – 36.
- [49] Wagner H, Bedorf D, Kuchemann S, *et al.* Local Elastic Properties of a Metallic Glass [J]. *Nature Materials*, 2011, 10: 439 – 442.
- [50] Dmowski W, Iwashita T, Chuang C P, *et al.* Elastic Heterogeneity in Metallic Glasses [J]. *Physical Review Letters*, 2010, 105: 205 502.

- [51] Yu H B, Shen X, Wang Z, *et al.* Tensile Plasticity in Metallic Glasses with Pronounced β Relaxations [J]. *Physical Review Letters*, 2012, 108: 015 504.
- [52] Yao K F, Ruan F, Yang Y Q, *et al.* Superductile Bulk Metallic Glass [J]. *Applied Physics Letters*, 2006, 88: 122 106.
- [53] Ichitsubo T, Matsubara E, Yamamoto T, *et al.* Microstructure of Fragile Metallic Glasses Inferred from Ultrasound-Accelerated Crystallization in Pd-Based Metallic Glasses [J]. *Physical Review Letters*, 2005, 95: 245 501.
- [54] Liu Y H, Wang D, Nakajima K, *et al.* Characterization of Nanoscale Mechanical Heterogeneity in a Metallic Glass by Dynamic Force Microscopy [J]. *Physical Review Letters*, 2011, 106: 125 504.
- [55] Yang Y, Zeng J F, Volland A, *et al.* Fractal Growth of the Dense-Packing Phase in Annealed Metallic Glass Imaged by High-Resolution Atomic Force Microscopy [J]. *Acta Materialia*, 2012, 60: 5 260 – 5 272.
- [56] 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 [J]. *Philosophical Magazine*, 2008, 88: 407 – 426.
- [57] Jiang M Q, Dai L H. Shear-Band Toughness of Bulk Metallic Glasses [J]. *Acta Materialia*, 2011, 59: 4 525 – 4 537.
- [58] Chen Y, Jiang M Q, Wei X J, *et al.* Failure Criterion for Metallic Glasses [J]. *Philosophical Magazine*, 2011, 91: 4 536 – 4 554.
- [59] Spaepen F. Must Shear Bands be Hot? [J]. *Nature Materials*, 2006, 5: 7 – 8.
- [60] Steif P S, Spaepen F, Hutchinson J W. Strain Localization in Amorphous Metals [J]. *Acta Metallurgica*, 1982, 30: 447 – 455.
- [61] Leamy H J, Chen H S, Wang T T. Plastic Flow and Fracture of Metallic Glass [J]. *Metallurgical Transactions*, 1972(3): 699 – 708.
- [62] Liu C T, Heatherly L, Easton D S, *et al.* Test Environments and Mechanical Properties of Zr-Base Bulk Amorphous Alloys [J]. *Metall Mater Trans A*, 1998, 29: 1 811 – 1 820.
- [63] Li J, Spaepen F, Hufnagel T C. Nanometre-Scale Defects in Shear Bands in a Metallic Glass [J]. *Philosophical Magazine*, 2002, 82: 2 623 – 2 630.
- [64] Gu X, Livi K J T, Hufnagel T C. Structure of Shear Bands in Zirconium-Based Metallic Glasses Observed by Transmission Electron Microscopy [J]. *Mater Res Soc Symp Proc*, 2003, 754: CC 7. 9. 1 – CC7. 9. 6.
- [65] Dodd B, Bai Y L. Width of Adiabatic Shear Bands [J]. *Materials Science and Technology*, 1985, 1: 38 – 40.
- [66] Bai Y L, Dodd B. *Adiabatic Shear Localization: Occurrence, Theories and Applications* [M]. Oxford: Pergamon Press, 1992.
- [67] Pampillo C A. Flow and Fracture in Amorphous Alloys [J]. *Journal of Materials Science*, 1975, 10: 1 194 – 1 227.
- [68] Wright W J, Schwarz R B, Nix W D. Localized Heating During Serrated Plastic Flow in Bulk Metallic Glasses [J]. *Materials Science and Engineering A*, 2001, 319 – 321: 229 – 232.
- [69] Hufnagel T C, Jiao T, Li Y, *et al.* Deformation and Failure of $Zr_{57}Ti_5Cu_{20}Ni_8Al_{10}$ Bulk Metallic Glass under Quasi-Static and Dynamic Compression [J]. *Journal of Material Research*, 2002, 17: 1 441 – 1 445.
- [70] Yang B, Morrison M L, Liaw P K, *et al.* Dynamic Evolution of Nanoscale Shear Bands in a Bulk-Metallic Glass [J]. *Applied Physics Letters*, 2005, 86: 141 904.
- [71] Lewandowski J J, Greer A L. Temperature Rise at Shear Bands in Metallic Glasses [J]. *Nature Materials*, 2006(5): 15 – 18.
- [72] Dai L H, Yan M, Liu L F, *et al.* Adiabatic Shear Banding Instability in Bulk Metallic Glasses [J]. *Applied Physics Letters*, 2005, 87: 141 916.
- [73] Jiang M Q, Wang W H, Dai L H. Prediction of Shear-Band Thickness in Metallic Glass [J]. *Scripta Materialia*, 2009, 60: 1 004 – 1 007.