

非晶力学流变的自组织临界行为

孙保安 王利峰 邵建华

Self-organized critical behavior in plastic flow of amorphous solids

Sun Bao-An Wang Li-Feng Shao Jian-Hua

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 66, 178103 (2017) DOI: 10.7498/aps.66.178103

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.66.178103>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2017/V66/I17>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

非晶合金的离子辐照效应

[Ion irradiation of metallic glasses](#)

物理学报.2017, 66(17): 178101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.66.178101>

非晶纤维的制备和力学行为

[Fabrications and mechanical behaviors of amorphous fibers](#)

物理学报.2017, 66(17): 178102 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.66.176103>

$\text{Cu}_{45}\text{Zr}_{55-x}\text{Al}_x$ ($x=3, 7, 12$) 块体非晶合金的第一性原理分子动力学模拟研究

[Study of \$\text{Cu}_{45}\text{Zr}_{55-x}\text{Al}_x\$ \(\$x=3, 7, 12\$ \) bulk metallic glasses by ab-initio molecular dynamics simulation](#)

物理学报.2014, 63(11): 118101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.118101>

通过 AC-HVAF 方法制备铁基非晶合金涂层的结构分析

[Structured analysis of iron-based amorphous alloy coating deposited by AC-HVAF spray](#)

物理学报.2014, 63(7): 078101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.078101>

金属玻璃的断裂机理与其断裂韧度的关系

[Correlation between fracture mechanism and fracture toughness in metallic glasses](#)

物理学报.2014, 63(5): 058101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.058101>

专辑: 非晶物理研究进展

非晶力学流变的自组织临界行为*

孙保安[†] 王利峰 邵建华

(南京理工大学格莱特纳米科技研究所, 南京 210094)

(2017年5月26日收到; 2017年6月24日收到修改稿)

非晶材料是由液体快冷冻结而成的结构无序的亚稳态固体. 在受力条件下, 非晶材料表现出独特和复杂的流变行为, 具有跨尺度的高度时空不均匀特征, 并在一定条件下表现出自组织临界行为, 和自然界以及物理系统中许多复杂体系的动力学行为相似. 本文结合作者近年来在非晶合金流变行为方面的研究成果, 对非晶材料流变的研究进展和物理机制的认识进行介绍, 包括非晶材料流变的跨尺度特征、表征和微观结构机制, 以及近年来发现的非晶力学流变的自组织临界行为、物理机制等. 最后, 对非晶材料流变行为研究中亟需解决的问题进行了总结和展望.

关键词: 非晶材料, 流变, 自组织临界性, 混沌**PACS:** 81.05.Kf, 62.20.F-, 05.65.+b, 05.45.-a**DOI:** 10.7498/aps.66.178103

1 引言

非晶态材料又称玻璃, 是具有无序原子结构的一大类固体材料的统称. 玻璃材料十分普遍, 迄今为止已发现氧化物、高分子、金属以及软物质等几乎所有已知键型的物质都可以形成玻璃态. 和晶体材料相比, 玻璃表现出独特和优异的物理性能, 在人类社会和文明进步中有着非常重要的作用. 在很长一段历史时期, 人们使用的非晶材料主要以氧化物玻璃为主. 18世纪, 正是由于优质透明的氧化玻璃制成的望远镜、显微镜、棱镜和各种玻璃试管等科学器件的广泛使用, 极大地促进了物理、化学和生物学的发展, 在现代科学史的发展上具有重要地位^[1]. 至今, 氧化物玻璃仍然是建筑和装饰中最广泛应用的材料之一. 但氧化物玻璃在变形时通常会在弹性区脆性断裂, 因此长期以来非晶材料的力学流变或者塑性变形行为的研究并不受重视. 非晶合金, 又称金属玻璃, 是20世纪60年代初问世的一种新型非晶材料^[2]. 由于结合了无序原子结构和金属键的特性, 非晶合金具有很多优异的力学性能, 如

高强度、大弹性、耐磨耐蚀以及一定程度的塑性变形能力, 在精密机械、航空航天、军事武器等很多高技术领域具有广泛的应用前景^[3-5]. 非晶合金的出现, 极大地激发了人们对非晶材料流变行为及其相关物理机制的研究兴趣, 特别是近二十多年来发现的具有迥异力学性能的块体非晶合金^[6]为研究非晶材料流变机制相关的物理问题提供了很好的模型材料体系.

非晶固体通常是由液体冻结而成, 其流变可定义为在外加能量下(力或温度)非晶发生的从固体到液体状态的不可逆转变. 在力的作用下, 非晶流变表现为非晶固体的滞弹性流变和塑性流变等现象; 而在温度作用下, 非晶流变表现为弛豫和玻璃转变现象^[1]. 两种流变现象在微观结构的起源是相同的, 其区别仅在于发生的空间和时间尺度上的不同. 本文重点对非晶的力学流变行为进行阐述. 随着非晶合金的出现, 近几十年针对非晶的流变行为和物理机制已有大量的实验和理论工作. 一般来说, 非晶合金的力学流变表现为表现出高度复杂的时空不均匀性^[7]. 在空间上, 非晶合金的流变无论是在微观原子尺度还是宏观尺度都表现出变形局域

* 国家自然科学基金(批准号: 51671121, 51601002, 51520105001)和中央高校基本科研业务费(批准号: 30917015107)资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: baoansun@njjust.edu.cn

化特征;而在时间上,非晶的流变呈现出间歇性的运动行为,即锯齿流变现象.这些独特的力学流变行为表明非晶材料具有和晶体完全不同的变形机制.此外,在一定条件下,非晶流变可以表现出远离平衡态的复杂动力学系统的一些特征,如自组织临界行为和混沌特征等^[8].这和自然界中一些典型的灾变现象(地震、雪崩和山体滑坡等)以及物理体系中一些复杂系统的动力学行为(润滑、磨擦、磁畴运动等)非常相似^[9].因此,对非晶材料的流变行为和机制的研究不仅是非晶态材料和物理学的一个基本问题,对自然灾害的预防以及其他广义无序体系的运动也有重要意义.本文结合作者多年来在非晶合金力学流变行为方面的研究结果,对非晶力学流变行为和物理机制展开综述,重点介绍其流变的不均匀跨尺度特征和机制,非晶流变的自组织临界行为的表现、机制及与宏观行为和性质的关联,最后对非晶材料流变行为亟需解决的问题和未来的研究方向进行展望.

2 非晶力学流变的唯象特征

2.1 非晶塑性流变的空间局域化

大量的实验证据已经表明,非晶合金的塑性流变行为和温度和应力密切相关,一般可用所谓的“变形地图”(deformation map)来表示^[7,10],如图1所示.在温度接近于或者大于玻璃转变温度(T_g)时,非晶合金的塑性流变通常表现为均匀的黏滞性流变,即材料的每一部分均参与整体的塑性变形,此时驱动流变所需的应力值很低;而当温度在远低于 T_g 点时(如室温),非晶合金的塑性流变表现出高度的空间局域化特征,即材料的大部分塑性变形都集中在厚度只有10—50 nm的剪切带内^[11,12],而此时驱动非晶流变所需的应力非常高,通常可达约 $E/50$ (E 为杨氏模量).在不同变形条件下典型的剪切带形貌和特征如图2所示.在没有约束的拉伸条件下,剪切带一旦形成便迅速扩展失稳,这使非晶合金的宏观拉伸塑性基本为零.而在受限制的加载(如压缩、弯曲)条件下,由于正应力对剪切带扩展的限制作用,一些非晶合金可以表现出一定的塑性,这种情况下可观察到一条或者多条剪切带.剪切带厚度虽然只有几十纳米,但其内部应变量可以高达 $10^3\%$ — $10^4\%$ ^[7],在剪切带之外几乎没有塑性流变发生.在室温时,剪切带是大部分非晶合金(纳米尺度的非晶合金除外)变形的普遍

特征.非晶合金得很多宏观变形行为如屈服、塑性和断裂都和剪切带过程密切相关.因此,对剪切带过程的研究成为理解非晶合金塑性流变机制以及改善非晶合金的室温塑性变形能力的关键问题之一.针对剪切带的厚度、形成和扩展以及内部性质演化等方面目前都有大量的实验和模拟工作.

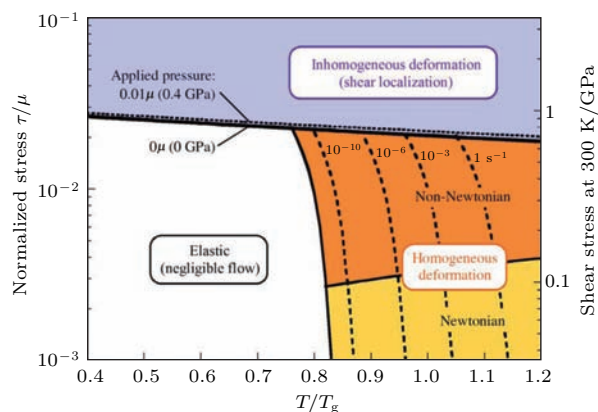


图1 非晶合金随应力和温度变化的变形地图^[7]

Fig. 1. Deformation map of metallic glasses with stress and temperature^[7].

非晶合金的剪切局域化的形成与应变软化密切相关,而应变软化导致应变更局域化,两者相互影响最终导致剪切带的失稳.关于应变软化的起源目前主要有两种机制.第一种机制认为应变软化是剪切膨胀的结果,即在剪切应力下材料的体积会发生膨胀,从而使其自由体积增加,强度降低.这种观点已被大量的实验结果证实^[12],并得到大部分研究者的认同.目前很多关于非晶合金的变形模型中^[12,13]均只考虑了剪切膨胀效应,可对剪切局域化过程给出解释.此外,这种剪胀效应在土壤岩石、颗粒物质等广义无序材料的变形中也非常常见,可看作是非晶材料剪切流变的共性.另外一种观点认为应变软化是由于材料变形局域绝热升温的结果.但目前关于剪切带内的温度升高程度仍有较大争议,从实验测得的温度升高可从0.1 K到1000 K不等.Lewandowski和Greer^[14]通过非晶合金表面镀锡熔化的方法,发现剪切带内的温度升高可高达 10^3 K量级;而Wright等^[15]采用高分辨的应变片测量得到剪切带速度,并结合传热模型估算剪切带的最高温升为65 K,远未达到玻璃转变温度点;此外,采用远红外测温的方法得到剪切带的温度为 $1-10^2$ K量级^[16,17].测得的温度差异较大的主要原因在于剪切带高度的时空局域化过程.

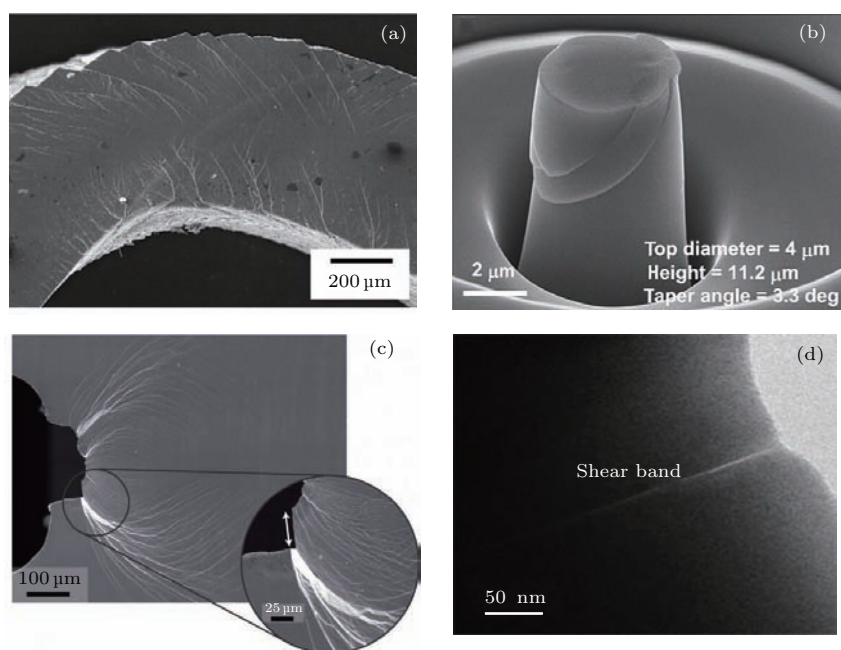


图2 非晶合金在不同加载模式下的剪切带形貌 (a) 弯曲 [7]; (b) 微米压缩 [18]; (c) 拉伸开槽口前端 [19]; (d) 单个剪切带透射电镜图像 [11]

Fig. 2. Shear band morphologies in different loading conditions: (a) Bending [7]; (b) micro-compression [18]; (c) the ahead of a notch under tension [19]; (d) TEM image of a shear band [11].

目前很多学者倾向认为温度升高很可能是剪切带形成的后效而不是主因. 但也有一些学者 [20] 开始在非晶的变形模型中同时考虑温度和剪切膨胀对剪切局域化的影响, 计算发现温度确实对剪切带在形成过程中起了非常重要的作用. 关于这方面仍需要大量的理论和实验研究工作.

2.2 非晶的滞弹性和黏弹性流变

在低于屈服应力的弹性区范围内, 非晶固体还会发生滞弹性或者黏弹性流变现象. 这种现象和非晶固体的非平衡特性密切相关. 与非晶的塑性流变行为不同, 这种滞弹性或者黏弹性流变在宏观尺度上较为均匀, 一般不产生剪切带. 典型的滞弹性流变发生于对非晶合金在弹性区进行动态压缩加载和卸载时, 表现为应力-应变曲线的滞回环现象 [18]. 但应力完全卸载时, 非晶的应变可以完全回复. 研究发现, 当加载和卸载速度高于一定值后, 应力-应变滞回环才会出现, 并且加载速度越快, 滞回环的面积越大. 类似的滞弹性流变现象在纳米压痕快速加载卸载时也可以观察到. 而黏弹性流变则发生在对非晶合金在弹性区进行长时间应力保载时(蠕变), 如图 3 所示 [21,22]. 此时, 非晶合金的总应变量

包括弹性部分 ϵ_E , 滞弹性流变部分 ϵ_A 和黏弹性流变部分 ϵ_V . ϵ_A 和 ϵ_V 随应力保持时间增加而逐渐增大并且最终达到一个饱和的状态. 当应力完全卸载后, 弹性部分 ϵ_E , 滞弹性流变部分 ϵ_A 完全消失, 只有黏弹性部分 ϵ_V 保留. 与塑性变形相比, 在室温的黏弹性变形量通常比较小, 经过长时间变形后 ϵ_V 约为 $(5-10) \times 10^{-4}$. 经过仔细研究发现, 非晶在黏弹性变形后其密度、弹性模量都有所降低, 说明在流变过程中非晶发生了不可逆的结构变化. 从本质上讲, 非晶的滞弹性和黏弹性流变均起源于其局域原子排列松散区域或者类液区的不可逆变形. 因此, 在微观尺度, 非晶合金的滞弹性或者黏弹性流变行为仍然是不均匀的. 通过合理的黏弹性模型并对滞弹性或黏弹性的应力-应变/时间曲线拟合, 可以提取出关于非晶合金类液区的一些本征信息. 采用 Kelvin 黏弹性模型对应力-应变滞回环拟合, Ye 等 [18] 发现非晶合金类液区的黏度约为 10^8 Pa·s 数量级, 和过冷液相区黏度接近. 通过改进的三参数黏弹性模型, 则可以进一步提取类液区的黏度和模量、激活能和体积分等特征 [23]. 关于这方面的研究已成为当前非晶合金的一个研究热点.

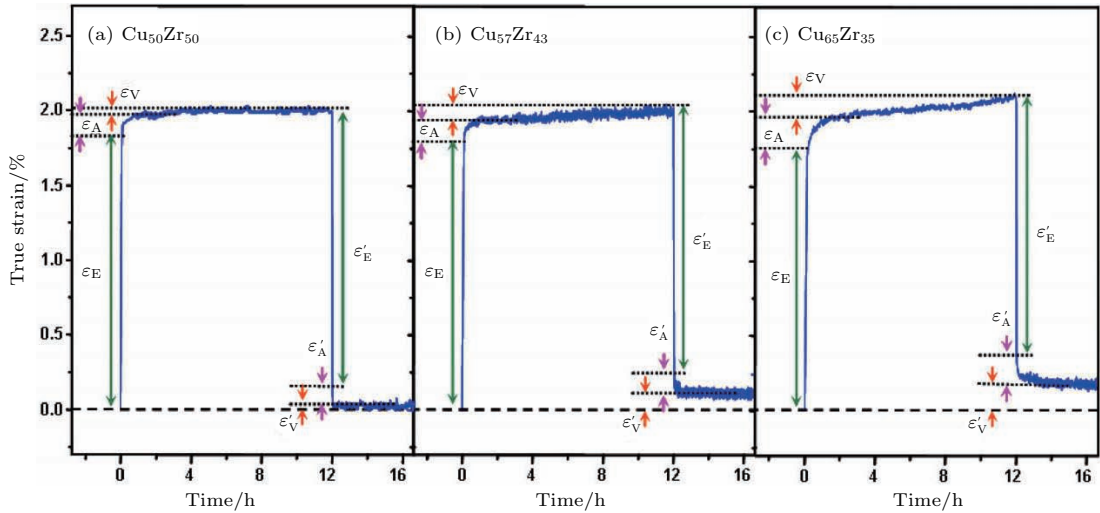


图3 一种CuZr非晶合金在屈服强度约90%保压时的滞弹性和黏弹性流变 [21]

Fig. 3. The inelastic and viscoelastic deformation under a constant load of 90% yielding strength for a CuZr metallic glass [21].

2.3 非晶的锯齿流变行为

除了形成空间高度不均匀的剪切带以外, 非晶合金塑性流变还具有时间上的不连续特征, 表现为应力-应变曲线上的锯齿流变行为 [24-27]. 这种锯齿流变行为通常出现在受限制的加载条件下 (如压缩或者纳米压痕等), 和晶体中的PLC (Portevin-Le Chatelier) 效应类似, 如图4所示. 典型的锯齿包括一个缓慢的应力上升部分和快速的应力降部分 [27]. 应力上升部分为弹性加载的过程, 在这个过程中不发生塑性变形; 而应力降对应不连续的塑性流变事件, 持续事件很短, 通常在毫秒量级. 应力

升和应力降循环交替出现, 直到最后材料的断裂. 因此, 锯齿流变行为反映了非晶材料的间歇性流变的特点.

研究发现, 锯齿流变强烈依赖于非晶合金变形时温度和应变速率 [24, 28]. 随着温度的降低或者应变速率的增加, 锯齿流变行为会逐渐减弱. 在某个临界温度或者应变速率时, 锯齿流变行为完全消失从而发生锯齿向非锯齿流变的转变. 在某个特定温度 T , 锯齿消失的临界应变速率 $\dot{\epsilon}_c$ 遵循 Arrhenius 公式 $\dot{\epsilon}_c = A \exp[-Q/(k_B T)]$, 其中 A 为前置常数, Q 为激活能, 对典型的 Zr 基非晶合金, Q 约为 0.4 eV [28]. 该公式说明锯齿流变具有典型的动力学

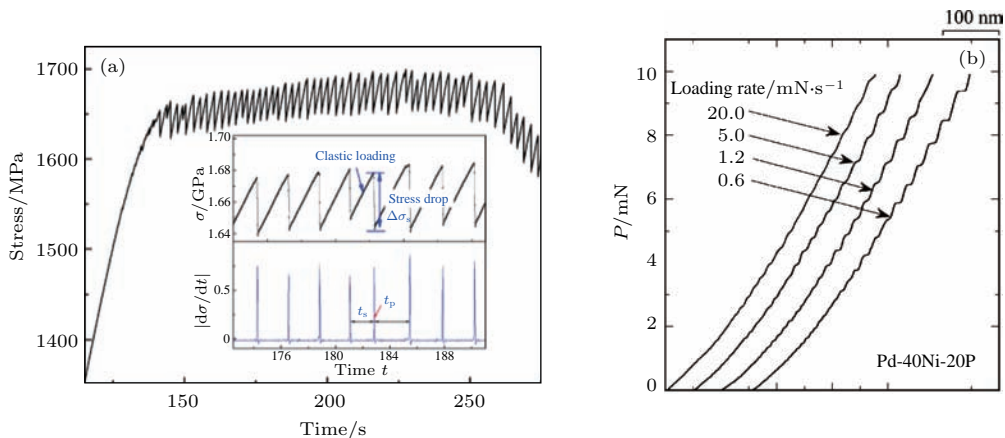


图4 非晶合金的锯齿流变行为 (a) Zr基非晶合金在单轴压缩实验中的锯齿流变行为; (b) Pd基非晶合金在纳米压痕中的锯齿流变行为 [24]

Fig. 4. Serrated flow behavior of metallic glasses under mechanical tests: (a) Serrated flow curve of a Zr-based metallic glass under uniaxial compression; (b) serrated flow in the nanoindentation of a Pd-based metallic glass [24].

特征. 此外, 我们最近的实验研究发现, 锯齿流变还和样品的成分和模量、样品的形状和大小以及测试仪器的刚度等各种内在和外在因素密切相关^[25,27,29]. 当改变这些因素时, 锯齿的平均应力降幅度、等待时间等特征都会发生明显的改变.

关于锯齿流变行为的起源是现有的非晶合金微观变形理论无法解释的. 但普遍认为锯齿流变行为与剪切带的形成和扩展密切相关^[30]. 在具体的与剪切带的联系上, 主要有两种观点. 一种观点认为锯齿是剪切带间歇式滑移的结果. 由于剪切带的滑移, 将会造成整个体系的部分弹性能释放, 从而造成快速的应力降. 这种观点已经在非晶合金的压缩试验中得到了证实. 很多非晶合金在压缩变形中通常只形成一条贯穿整个样品的主剪切带. Song等^[26]采用高速摄像机原位观察到了压缩过程主剪切带间歇滑移形成的表面台阶和应力-应变曲线上的锯齿有一一对应的关系. 而在剪切带滑移后, 可以在样品的断面留下规则的滑移条纹. 该实验有力地证实了锯齿流变是剪切带间歇性滑移的结果. 利用应力锯齿和剪切带间歇性滑移特征的对应关系, 可以间接地研究剪切带的运动过程. 目前, 国际上进行了很多这方面的工作. 如通过准确测量应力锯齿降的持续时间和剪切带在锯齿降过程中的滑移距离, 可以计算剪切带滑移过程中的平均速度, 并进而估算剪切带运动过程中的温度升高和黏度等特征^[15,26]. 另外一种观点认为, 一个锯齿对应着一条剪切带的形成和扩展的全过程, 而应力曲线上循环出现的锯齿是由于多条剪切带不断形成的结果. 这种观点在非晶合金的纳米压痕过程中比较普遍, 因为纳米压痕中压头下方材料所受应力比较复杂, 通常形成复杂的多条剪切带. Schuh和Nieh^[24]曾用这种观点来解释纳米压痕中的应力锯齿在一定的加载速率下消失的现象, 认为单个剪切带的产生受动力学条件的限制, 会存在一个临界的最大产生速率. 当外加应变速率超过该临界速率时, 多条剪切带就会同时产生, 产生较为均匀的塑性变形从而导致锯齿消失. 除了在非晶合金的宏观塑性变形中可观察到锯齿流变以外, 在非晶合金变形的分子动力学模拟中也可以观察到锯齿流变现象^[31]. 这种情况下非晶的变形不会产生剪切带, 锯齿流变行为和非晶原子尺度变形单元之间由于相互作用而引起的“雪崩式”(avalanches)塑性流变事件密切相关.

3 非晶合金的力学流变机制和理论

非晶合金表现出的跨尺度不均匀时空流变现象起源于其独特的微观结构变形机制. 和晶体材料不同, 非晶合金的原子结构不存在位错等晶体缺陷. 但由于非晶合金中的原子仍然具有金属键特性, 在应力作用下, 金属键的打开和结合相对于共价键和离子键较为容易. 因此, 非晶合金的剪切变形可以通过原子的运动来容纳. 大量的实验和计算机模拟结果表明, 非晶合金的变形起源于局域松散原子团簇的不可逆重排. 与晶体合金中的低能量缺陷结构不同, 非晶合金的局域原子重排通常需要较高的能量和应力, 这也是非晶合金具有很高强度的根本原因. 迄今为止, 已有很多关于非晶合金微观流变或者变形的理论模型提出. 在这些模型中, 最常用的两个模型是自由体积 (free volume) 模型和剪切转变区 (shear transformation zone, STZ) 模型. 现予以简单介绍.

自由体积变形模型是 Spaepen^[10] 在 1977 年在自由体积概念的基础上发展起来的. 该模型认为非晶合金的塑性变形可以通过单个原子的跃迁来实现, 如图 5(a) 所示. 其跃迁的速率和周围自由体积的分布密切相关, 自由体积越大, 原子跃迁的速率越快. 原子跃迁是一个热激活的过程, 在无应力作用下, 原子跃迁的概率在各个方向上相等, 激活能垒均为 ΔG^m ; 但在外加切应力 τ 下, 原子跃迁激活的能垒在应力方向会降低 $\tau\Omega/2$ (Ω 为原子的体积), 而在应力的反方向增加 $\tau\Omega/2$ (图 5(c) 所示). 这样, 非晶合金的应变速率可以表达为

$$\dot{\gamma} = 2f \exp\left(-\frac{\alpha v^*}{v_f}\right) \sinh\left(\frac{\tau\Omega}{2kT}\right) \times \exp\left(-\frac{\Delta G^m}{kT}\right), \quad (1)$$

其中, f 为德拜频率; α 为几何因子, 数值在 0.5—1 之间; v^* 为原子发生跃迁的临界自由体积, 和原子体积大小相当; v_f 为样品的平均自由体积; k 为玻尔兹曼常数; T 为温度. 在变形过程中, 原子若移动或者跃迁, 必须推开周围原子的限制产生自由体积, 与此同时, 自由体积也通过扩散或者耗散过程而减小. 最终, 自由体积演化的动态方程为

$$\dot{v}_f = f \exp\left(-\frac{\Delta G^m}{kT}\right) \exp\left(-\frac{\alpha v^*}{v_f}\right)$$

$$\times \left\{ \frac{2kT}{S} \frac{\alpha v^*}{v_f} \left[\cosh \left(\frac{\tau \Omega}{2kT} \right) - 1 \right] - \frac{v^*}{n_D} \right\}, \quad (2)$$

其中 S 与原子推开周围原子的限制而产生的弹性畸变能联系, 可表达为 $S = (2/3)G(1 + \nu)/(1 - \nu)$; G 和 ν 分别为剪切模量和泊松比; n_D 为使临界自由体积 v^* 完全耗散所需的扩散步数. 自由体积演化和应变速率演化相互作用, 从而导致非晶合金各种不同的宏观力学流变行为. 虽然在实际变形中, 单个原子的跃迁对宏观剪切变形贡献很小, 并且自由体积的绝对值很难测量, 但自由体积模型提供了一个描述非晶塑性变形的相对完整且简单实用的理论体系, 因此得到了广泛应用.

剪切转变区模型最早由 Argon 根据肥皂泡筏的剪切实验和计算机模拟结果提出 [13]. 值得指出的是, Argon 在最初提出该模型时称之为剪切转变模型 (ST), 后由 Falk 和 Langer 进一步对该模型进行了补充, 提出了剪切转变区 (STZ) 模型. 该模型认为非晶合金的变形不是来源于单个原子的跃迁, 而是几个原子组成的团簇在非晶原子壳中的协同运动. 这些发生协同剪切变形的原子团簇定义为 STZ 即剪切变形区, 如图 5 (b) 所示. 同时, 这些原子团簇的协同运动也是一个热激活的过程, 并且转变的

概率仍然和团簇的自由体积密切相关. 该模型中非晶合金的宏观应变速率可表达为

$$\dot{\gamma} = \alpha_0 \nu_0 \gamma_0 \exp \left[- \frac{\Delta F(\tau)}{kT} \right], \quad (3)$$

其中 ν_0 为频率因子, 约等于德拜频率; γ_0 为一个 STZ 的特征剪切应变变量; α_0 取决于材料的自由体积含量的一个因子, $\alpha_0 \propto \exp(-\xi v^*/v_f)$; $\Delta F(\tau)$ 是 STZ 在应力 τ 时的激活能, 可表示为 τ 的函数. 在应力比较小时, $\Delta F(\tau)$ 可表达为 τ 的线性函数 $\Delta F(\tau) = \Delta F_0 - \tau V$, 其中 ΔF_0 为无应力的激活能, 约为 1—5 eV 或者 20—120 kT_g ; V 为激活体积 $V = \gamma_0 \Omega$, Ω 为 STZ 的体积; 而在应力 τ 比较高时, 由于 STZ 的激活体积也与 τ 相关, ΔF 并不能表示成 τ 的线性函数. Argon 认为 STZ 的平面剪切和剪切位错环的形核比较类似, 并据此给出 $\Delta F \approx C_s \tau_0 \Omega_0 (1 - \tau/\tau_0)^2$, 其中 $C_s \approx 4.6$ 为常数, τ_0 为等热时 STZ 的临界应力 [7,13]. 最近, Johnson 和 Samwer [32] 从非晶合金的势能图谱理论和 STZ 剪切失稳的标度分析理论得出了 ΔF 的严格表达式 $\Delta F = \phi_0 \zeta \Omega (1 - \tau/\tau_0)^{3/2}$, 其中 ϕ_0 为 STZ 势能能量密度. 应用此理论统一解释了各种非晶合金的屈服强度随温度变化的 $(T/T_g)^{2/3}$ 规律.

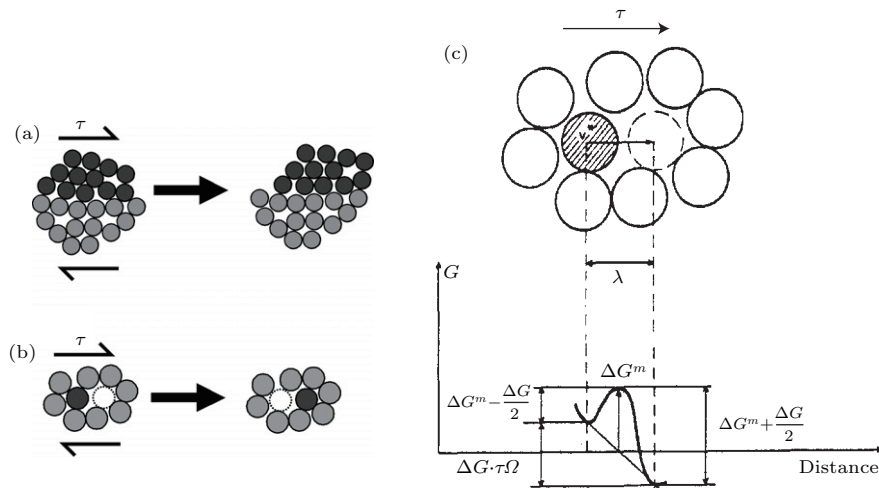


图 5 非晶合金微观变形模型示意图 [7] (a) 自由体积模型; (b) 剪切转变区模型; (c) 沿应力方向的激活能变化图 [10]
 Fig. 5. Schematics of atomic deformation mechanism for metallic glasses [7]: (a) Free volume model; (b) shear transformation zone model; (c) the activation energy variation along the shear stress direction [10].

上述 STZ 理论仍然建立在缺陷的热激活理论基础上, 所以不能解释绝热状态下 (比如 0 K) 非晶合金的流变行为. 此外, 这些理论简单的以自由体积作为控制变形过程的惟一内部状态参量, 也不能解释一些复杂的非晶流变行为特征. 考虑到这些问

题, Falk 和 Langer [33,34] 在大量分子动力学模拟结果分析的基础上, 进一步发展了 STZ 理论. 他们认为 STZ 存在两种不同的状态, 在应力作用下, STZ 可以在两种不同的状态下进行切换, 而这种切换并不需要借助于热扰动来实现. 此时非晶的宏观应

变速率由处于两种不同状态下的STZ的数量差决定. 此时, 控制变形的内部状态参量为STZ在两种不同状态下的数量密度 n_+ 和 n_- , STZ的总数量密度 n_{tot} . Langer 进一步提出了有效无序温度 T_{eff} 的概念 [34], T_{eff} 由STZ的数量总密度 n_{tot} 在非晶中的涨落决定, 两者之间符合热力学的玻尔兹曼分布. 该理论统一了由热和力导致的局域STZ的激活, 因此可对非晶合金从0 K到接近玻璃转变点 T_g 的高温时的各种力学流变行为进行解释.

值得注意的是, STZ不是非晶材料的结构缺陷, 只是塑性流变的基本载体单元. 这和晶体中的位错不一样, 位错既是晶体塑性流变的载体, 也是静态的结构缺陷, 而STZ只能通过运动来定义, 不是静态的结构缺陷, 因此并不能从变形前某时刻非晶固体的原子图像上找到STZ [1]. 近年来, 随着一些先进表征技术的出现, 越来越多的实验证据表明非晶的结构中存在纳米尺度的不均匀性, 即有些区域表现出液体的性质, 而有些区域表现出固体的性质. 在此基础上, 汪卫华等 [35] 提出了非晶合金的本征结构缺陷——流动单元 (flow units) 的概念. 认为非晶中的类液区可看成流动单元, 弥散分布在理想非晶组成的弹性基体上. 流动单元可被表征, 并且在一定温度和应力下可被激活, 导致非晶的宏观塑性流变和弛豫现象. 这为理解非晶合金的流变提供了一种全新而简单的物理图像.

从自由体积理论和剪切转变区理论出发, 可以很容易地对非晶合金宏观力学流变行为做出解释. 如非晶合金的滞弹性和黏弹性流变行为可以认为是由STZ在低应力下的局域激活而导致的, 这些STZ较为均匀地弥散分布在非晶基体里, 因而滞弹性和黏弹性行为宏观上比较均匀. 剪切带的形成可以看成是由非晶合金变形在空间演化的一种动力学不均匀性. 对两种理论的分析均表明, 在高应力状态下, 非晶合金的应变速率在空间的一些扰动将在自由体积或者有效无序温度等内部状态参量的演化下逐渐放大, 并最终演化成稳定的剪切带 [36], 如图6所示. 因此, 非晶合金流变空间局域化的根本原因在于内部状态参量的演化 (如自由体积或者有效无序温度的增加) 造成的应变软化, 和自由体积或者STZ理论的具体形式无关.

自由体积理论和STZ理论均预测剪切带在形成以后会以一个稳定的应变速率来运动, 因此不能解释剪切带的间隙性运动即锯齿流变行为. 最近, 我们提出了非晶合金压缩过程中剪切带的滞滑

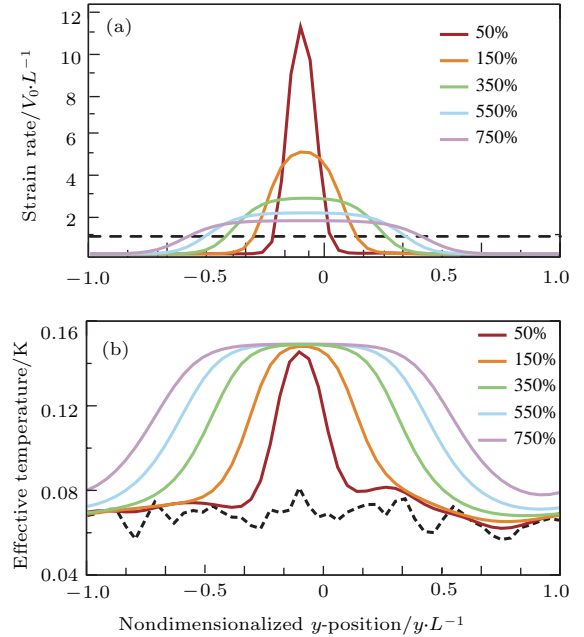


图6 由STZ理论数值计算的剪切空间局域化过程 (a) 应变速率空间分布演化; (b) 有效无序温度空间分布的演化 [36]

Fig. 6. The process of shear localization from numerical calculations of STZ theory: (a) The evolution of the spatial distribution of the strain rate; (b) the evolution of the spatial distribution of the effective disorder temperature [36].

运动模型 [27], 用以解释锯齿流变行为. 该模型不仅考虑剪切带内部的本构变形行为, 还考虑测试仪器弹性变形对剪切带运动行为的影响, 如图7所示. 变形中非晶样品和测试仪器可以看成是一个弹性系统, 其刚度分别 κ_S 和 κ_M . 变形过程中弹性能存储在非晶样品和测试仪器组成的系统中. 一旦到达屈服点, 剪切带开始形成并滑移, 造成整个系统的弹性能的释放, 导致加载应力的快速下降. 在恒定的加载速率 v_0 下, 剪切带滑移运动方程为

$$k(v_0 t - x_s) - \sigma_b(v, \theta) = m\ddot{x}_s, \quad (4)$$

x_s 为剪切带在 t 时刻的垂直滑移距离; k 为系统单位面积的弹性常数, 可表示为 $k = E/[L(1 + S)]$, 其中 E 和 L 分别为样品的弹性模量和高度, $S = \kappa_S/\kappa_M$; m 为系统的有效质量; $\sigma_b(v, \theta)$ 为剪切带运动的垂直抵抗应力, 一般为剪切带滑移速度 $v(v = \dot{x}_s)$ 和内部状态参量 θ 的函数; $\sigma_b(v, \theta)$ 实际上代表了非晶材料流变的本构关系, 因此可以用STZ理论来描述, 这里采用了Johnson提出的STZ理论表达式 [32]. 进一步, 采用有效无序温度作为剪切带运动演化的内部状态参量, 并可以写出其演化的动态方程. 这样就得到了描述单个剪切带运动的完整的方程组.

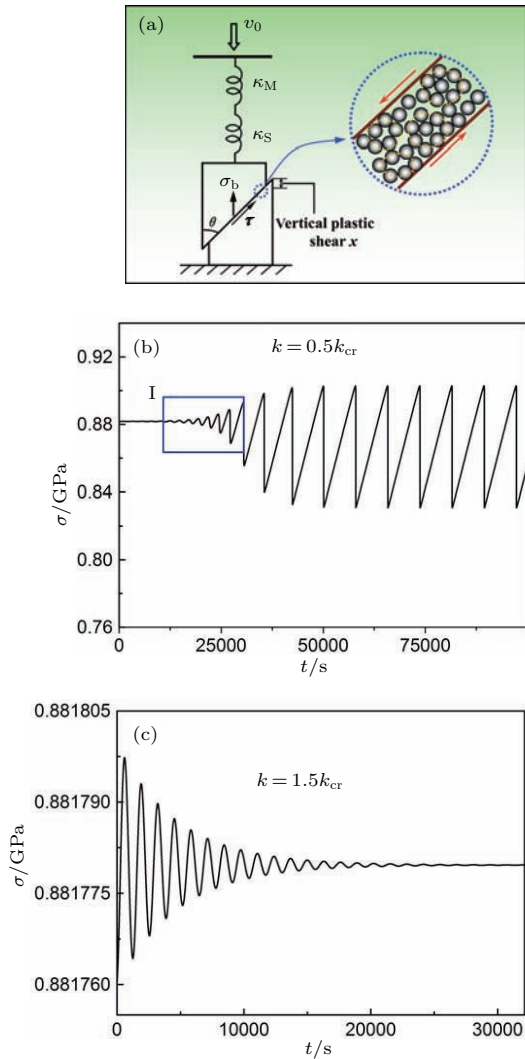


图7 (a) 压缩过程中单个剪切带的滞滑运动模型示意图; (b) $k < k_{cr}$ 时数值计算的应力锯齿-时间曲线; (c) $k > k_{cr}$ 时数值计算的应力-时间光滑曲线 [27]
 Fig. 7. (a) The stick-slip model for single shear band motion in compression of metallic glass; (b) the serrated stress-time curve numerically calculated at $k < k_{cr}$; (c) the smooth stress-time curve numerically calculated at $k > k_{cr}$ [27].

对方程组的理论分析和数值计算发现, 锯齿流变实际起源于剪切带在运动过程中的一种本征动力学不稳定性, 即剪切带运动有一个稳态解, 但在一定条件下, 这种稳态解是动力学不稳定的, 施加在该稳态解上的一些扰动会逐渐增大并最终发展成稳定的锯齿. 控制这种不稳定性出现的关键理论参数为 k_{cr} , 称为临界刚度, 可以表示为变形温度和加载速率的函数

$$k_{cr} = \alpha \sigma_{b0} (k_B T / W_0)^{2/3} \ln(v_c / v_0) / C_0, \quad (5)$$

其中, α , C_0 为常数, σ_{b0} 和 v_c 均为剪切带的特征强度和速度, 具体含义可参考文献 [27], W_0 为 STZ

在 0 K 的激活能. 当 $k < k_{cr}$ 时, 剪切带的稳态运动不稳定, 滑移过程中微小的扰动随着时间而逐渐增大, 最终发展成为稳定的锯齿; 在应力锯齿的上升部分, 剪切带的滑移处于停滞 ($v \ll v_0$), 而在锯齿的下降阶段, 剪切带快速滑移 ($v \gg v_0$); 当 $k > k_{cr}$ 时, 锯齿流变不会出现, 剪切带以外加载速度 v_0 稳态滑动; $k = k_{cr}$ 对应锯齿流变向非锯齿流变转变的临界点. 在锯齿出现的范围内, 锯齿的大小和 k/k_{cr} 的比值密切相关, k/k_{cr} 越接近于 1, 应力锯齿幅度越小. 该理论结果可以统一地解释各种内在和外因因素对锯齿流变行为的影响. 从 (5) 式可以看出, 当变形温度降低或者应变速率增加时, k_{cr} 的值逐渐减小, 而 k 不变, 因此应力锯齿幅度逐渐减小, 当 k_{cr} 降到 k 值以下时, 锯齿完全消失, 非晶发生锯齿向非锯齿流变的转变. 这些理论预测和实验观察完全一致. 通过 $k = k_{cr}$, 还可以得到锯齿消失的临界应变速率符合 Arrhenius 公式 $\dot{\epsilon}_{cr} = \dot{\epsilon}_c \exp[-Q/(k_B T)]$, 这也和实验得到的拟合公式完全符合. 样品模量、大小和加载仪器刚度对锯齿流变的影响可以通过 k 值的变化来反映. 如当提高样品的模量时, k 值增大, k/k_{cr} 增大并接近于 1, 因此锯齿逐渐减弱并最终消失; 同样, 当逐渐增加样品的直径 (长径比保持不变) 或者测试仪器的刚度时, 也会取得同样的效果. 这些理论预测已经被最近的实验结果很好地证实. 这些都说明锯齿流变是剪切带滑移过程中的一种本征的动力学不稳定性. 进一步的理论分析表明, k_{cr} 和非晶合金流动强度的应变速率敏感系数相联系, $k_{cr} \sim -(\partial \sigma_b / \partial v)|_{v=v_0}$. 因此, 锯齿流变出现的必要条件 ($k_{cr} > 0$) 为非晶流动的负应变速率敏感系数.

从 (5) 式可以看出, 实验中测得的应力为 $\sigma = k(v_0 t - x_s)$, 经过对时间微分变换可以得到剪切带的瞬时滑移速度 $v_s = v_0 - (d\sigma/dt)/k$. 因此, 如果采用高采样频率的载荷传感器准确地捕捉到锯齿下降部分的应力随时间的变化 $\sigma(t)$, 就可以进行微分求得 $d\sigma/dt$, 从而利用上述公式计算得到剪切带在锯齿下降过程中的瞬时速度变化. 采用上述方法, 对非晶合金从屈服到最后断裂发生之前的主剪切带的瞬时速度变化进行了追踪, 并提取出剪切带失稳的临界最大速度. 通过对各种不同条件下 90 个非晶合金样品的测量, 发现剪切带失稳的临界速度趋于一个常数 (约为 $1.5 \times 10^{-4} \text{ ms}^{-1}$) [37]. 该实验说明剪切带的失稳过程受一个临界应变速

率的控制, 印证了 Furukawa 和 Tanaka^[38] 提出的剪切带失稳的液体不稳定性理论, 这也从侧面说明了非晶合金的剪切带流变过程是一种由应力引起的玻璃转变现象.

4 非晶流变的自组织临界性

4.1 复杂系统的自组织临界性

自组织临界性 (self-organized criticality, SOC) 是 20 世纪 80 年代由物理学家 Bak 等^[39] 提出的描述复杂非平衡态系统时空演化的重要理论和概念. 20 世纪下半叶以来, 人们开始注意研究自然界、物理、生物以及社会科学中的一些复杂系统和现象, 如地震和森林火灾等灾难事件的发生、电子器件的噪声、心率的涨落、DNA 序列、股票价格变化、高速公路车流的变化等. 大量的观察数据和研究发现, 这些现象表面看似复杂和随机, 并且具有截然不同的内在的物理机制, 但在动力学行为演化上却表现出相似的简单规律^[40]. 如对同一地区长时期发生的地震来看, 大地震并不常见, 而小震时有发生. 就河流的水系来说, 主流并不多, 而支流分岔较多. 地震的震级和其发生概率、河流的大小和数量之间均符合幂律分布. 类似的规律在电子器件的电流噪声中也有发现, 表现为其功率谱 $S(f)$ 和频率 f 的反比关系 $S(f) \sim 1/f$, 即所谓的“闪烁噪声”效应. 此外, 在城市的大小排名和人口数量关系、股票价格的变化等社会学现象中也普遍观察到幂律规律. 幂定律意味着对于所观察的量没有一个特征尺度, 各种大小的量都可以出现. 很明显, 幂律分布和系统的内部物理细节和机制没有什么关系, 反映的是复杂系统的一种普遍规律. 那么是什么导致自然界中千差万别的现象能够产生如此简单而和谐的规律? 已有的平衡系统理论、耗散结构理论、混沌理论均不能给出圆满的回答. 耗散结构解决了远离非平衡态系统的形成和出现条件、环境和一般动力学问题, 却不能回答系统演化的模式问题. 自组织临界性是迄今为止惟一可以解释复杂性如何产生的一般机制的理论概念. 该理论认为, 当系统满足以下的基本条件: 1) 系统受到外加的缓慢的驱动力, 2) 系统内部存在大量互相作用的单元, 3) 系统内部可发生比外界驱动力快很多的动力学弛豫事件时, 该系统可以自发地演化到自组织临界状态^[39,40]. 所谓的临界性, 指系统的动力学行为在时间上和空间上均不表现出特征的尺度, 即符合

幂律分布. 时间上的幂律分布即闪烁噪声效应; 而空间上的幂律分布表现为分形的几何结构. 此外, 这种状态是持续的临界稳定状态, 即状态的出现不依赖于内部单元相互作用的具体细节, 也不依赖于系统的初始和边界条件.

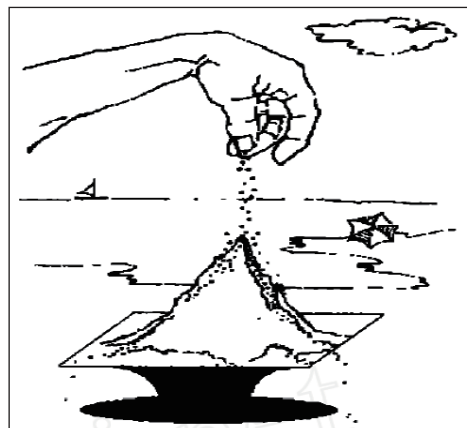


图 8 自组织临界性形成的沙堆模型^[40]

Fig. 8. The sand model for self-organized criticality^[40].

下面以经典的沙堆模型来描述自组织临界态的形成^[40]. 如图 8 所示, 设想在一个平台上任意加沙子来形成一个沙堆, 每次加一粒, 那么随着沙堆的升高, 沙堆的斜度逐渐增大. 但沙堆的斜度不能无限增大, 当达到一定斜度后, 沙堆的斜度就不再变化. 此时, 系统便演化到了一个临界状态, 到达这个临界状态之后, 每加一粒沙子都会引起沙堆的“雪崩”事件. 而这些事件在时间或空间上没有特征的尺度, 除了受沙堆本身大小的限制以外, 任何大小的沙粒“雪崩”都可能发生, 它们满足幂律分布. 沙堆之间的沙粒虽然只有短程的局域相互作用, 却可以引起系统内部的长程相互作用关联. 此时的沙堆便处于自组织临界状态. 该状态的出现不依赖于沙粒之间具体的相互作用参数. 在干沙堆和湿沙堆的实验可以观察到类似的结果. 因此, 自组织临界状态是复杂系统相空间演化的一个强动力学吸引子. 自组织临界状态和混沌状态不同. 混沌状态虽然也经常在一些复杂动力学系统中观察到, 但其出现并不要求系统内部有大量相互作用的单元. 如经典的混沌体系-洛伦兹模型只含 3 个状态变量. 此外, 混沌系统对初始条件非常敏感, 一个小的初始不确定性会随着时间出现指数性增长, 从而得到完全不同的结果. 而对自组织临界性的模拟表明, 系统初始状态不确定的增长遵循幂定律而不是指数定律. 深入的理论研究表明, 自组织临界性

在动力学上处于混沌的边缘, 在此处系统从非真正静止在某一个状态中, 也没有动荡到导致解体, 因此是复杂系统能够自发地调整和存活. 正是由于自组织临界状态, 系统具有最大的活力和运行效率.

自组织临界性的概念提出以后, 迅速得到科学界的承认并在各个学科领域得到广泛应用. 近年来, 采用自组织临界性的理论方法来理解材料和凝聚态物理中的一些复杂问题引起了人们的关注, 如材料的变形、断裂和磁畴的运动等. 在材料的塑性变形领域, 以前普遍认为晶体中位错的滑移是连续的, 但最近大量的研究表明, 大量的位错在相互作用下, 其运动并不连续, 而是表现为一系列的“雪崩”(avalanche)事件, 呈现出自组织临界性, 这使人们开始重新审视建立在连续介质力学基础上的塑性变形理论^[41]. 从对晶体中的PLC效应(晶体中的锯齿流变现象, 源于位错和溶质原子的相互作用)的研究也发现了丰富的动力学行为, 如随着温度和应变速率的变化, Cu-10%Al合金的锯齿动力学行为可以发生从混沌状态到自组织临界性的转变^[42]. 与之类似, 通过对块状金属玻璃Cu₅₀Zr₄₅Ti₅进行研究, 随着应变速率的增加, 也发生了从混沌状态到自组织临界性的转变^[43]. 锯齿动力学行为是自组织临界体系中的又一范例^[44]. 此外, 在一些材料(如氢化的金属Nb)的断裂中也发现了自组织临界行为^[45], 表现为断裂过程释放的弹性能量波的分布的幂律分布. 这预示着断裂过程中大量微裂纹之间复杂的相互作用. 由于这些现象和地震发生在动力学上的相似性以及可控性, 很多学者提出可以将材料的变形和断裂过程作为模拟地震发生的模型实验体系.

4.2 非晶合金流变的自组织临界性

非晶合金的力学流变形为涉及到微观原子尺度变形单元之间以及剪切带之间的相互作用, 并具有间隙性的塑性流变锯齿崩塌事件, 是典型的复杂动力学体系. 2010年, 本文作者从复杂动力学演化的角度对非晶合金的宏观锯齿流变行为展开了研究^[8]. 选取8种具有不同成分和塑性的块体非晶合金样品进行压缩实验, 得到应力-应变/时间曲线. 通过锯齿的放大图对比可以看出, 韧性较大的非晶合金(塑性应变 ϵ_p 在10%以上)和韧性较小或较脆的非晶合金($\epsilon_p < 5\%$)的锯齿特征明显不同, 韧性非晶合金明显比脆性合金的锯齿形状复杂. 进一步对这些合金的锯齿应力降幅的统计分析发现, 4种

脆性非晶合金的锯齿柱状分布图呈现出峰状或者高斯分布, 说明这些合金的锯齿有一个特征尺度大小; 而4种韧性非晶合金的锯齿柱状分布图呈现出单调下降的趋势, 其概率密度分布函数 $D(s)$ 很好地符合幂律分布(见图9):

$$D(s) \sim s^{-\alpha}, \quad (6)$$

其中 s 为约化的应力锯齿降幅, α 为幂指数. 对4种韧性非晶合金拟合的 α 值在1.3—1.5之间. 从下文4.3节对锯齿的理论分析可以看出, 应力锯齿降幅和锯齿事件中剪切带的滑移距离成正比, 因此锯齿应力降幅可以反映出锯齿流变事件的大小. 考虑到所有压缩试验都在准静态加载速率下进行, 可以认为韧性非晶合金的锯齿流变行为处于自组织临界状态. 对另外4种锯齿大小符合高斯分布的脆性非晶合金进一步进行时间序列分析发现, 它们的锯齿动力学表现出混沌的特征, 表现为正的李雅谱诺夫谱和一定范围内恒定的相关作用维数^[46]. 该结果从动力学角度给出了非晶合金的锯齿流变和宏观塑性的关联: 即非晶合金的塑性来源于本征的复杂的自组织临界行为. 这也为理解和设计非晶合金的宏观塑性提供了依据.

当非晶合金样品的尺度较小或者在弹性应力范围内, 非晶合金的流变不形成剪切带, 但同样涉及到局域变形单元的激活以及它们之间的相互作用. Maloney和Lemaitre^[31]采用分子动力学模拟的手段研究了非晶固体材料在准静态极限下的绝热剪切行为, 发现这种情况下非晶变形时将在不同本征能量状态之间切换, 表现为势能随应变增加出现的一系列不连续的能量锯齿. 而每一次能量切换都对对应着原子尺度的塑性流变事件, 这些事件可以看成是基本流变单元STZs自组织而成. 塑性流变事件的平均参与原子数目与系统的大小有很好的标度关系, 因此预示着自组织临界状态的形成. 最近, Krispeneit等^[47]研究了一种PdCuSi非晶合金在低弹性应力下的蠕变行为, 发现在蠕变曲线上出现很多不连续的位移台阶. 通过对台阶等待时间 Δt 的统计分析, 发现随着蠕变时间的增加, Δt 的出现可以有两种不同的幂律分布, 分别具有不同的幂指数. 他们将这种非晶滞弹性流变过程中幂律分布的转变归结为三维尺度上STZs的自组织行为向二维剪切带形成的自组织行为的转变. 该结果也首次从实验上给出了由非晶合金基本变形单元相互作用而形成自组织临界性的证据.

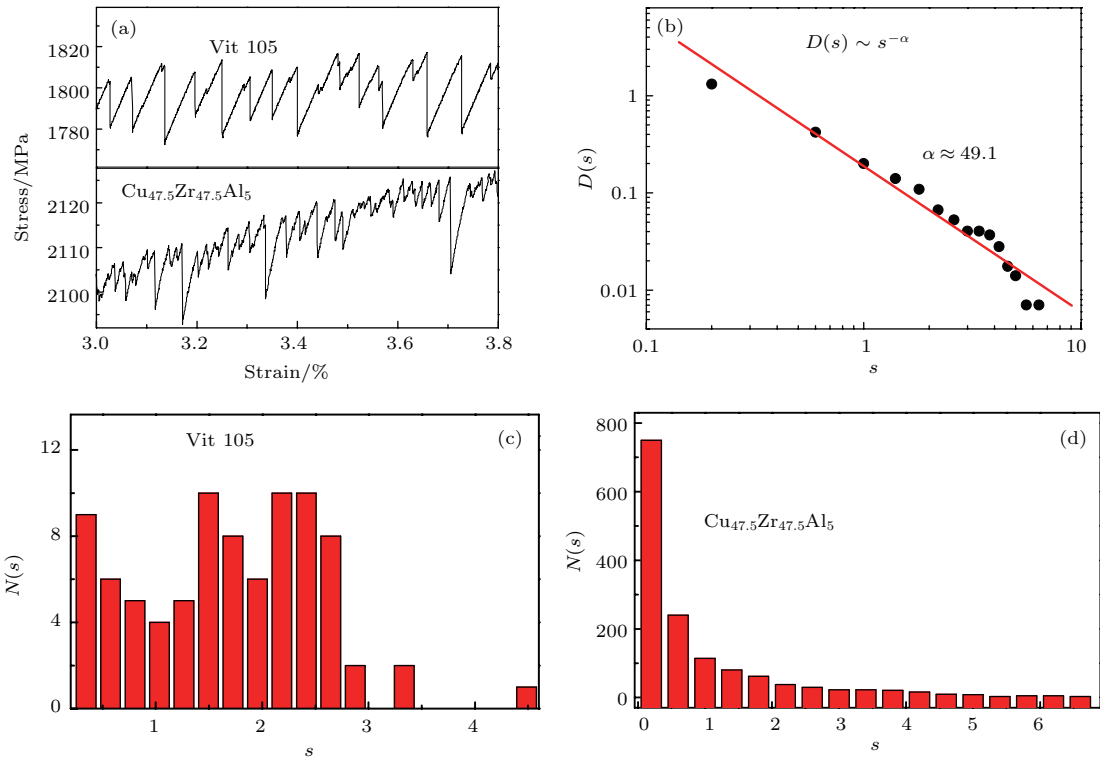


图9 (a) 典型脆性非晶合金和韧性非晶合金的锯齿行为对比; (b) 韧性非晶合金 $\text{Cu}_{47.5}\text{Zr}_{47.5}\text{Al}_5$ 的锯齿大小概率密度分布函数; (c) 脆性非晶合金 Vit105的锯齿大小柱状分布图; (d) 韧性非晶合金 $\text{Cu}_{47.5}\text{Zr}_{47.5}\text{Al}_5$ 的锯齿大小柱状分布图 [8]
 Fig. 9. (a) The comparison of stress serration for brittle and ductile metallic glasses; (b) the probability density distribution function for ductile $\text{Cu}_{47.5}\text{Zr}_{47.5}\text{Al}_5$ metallic glass; (c), (d) the histogram distribution of serration sizes for ductile $\text{Cu}_{47.5}\text{Zr}_{47.5}\text{Al}_5$ metallic glass and brittle Vit105 metallic glass, respectively [8].

非晶流变的自组织临界性还表现为变形区域在空间上呈现出自相似的分形结构. 分形是以非整数维形式充填空间的形态特征, 通常可以用相关作用维数在一定空间范围内表现的标度不变性来表征. 对变形后样品的形貌观察发现, 脆性非晶合金在变形时以形成单个主剪切带为主, 而韧性非晶合金变形后则出现多重剪切带. 在大变形量时, 多重剪切带之间相互交叉、切割, 可以形成复杂的形貌图案. 最近通过数盒子和统计空隙分布函数等常用几何分析方法 [47], 发现多重剪切带形成的图案具有典型的分形结构特点, 如图 10 (a) 所示. 剪切带之间相互嵌套, 形成在不同尺度出现的胞状结构, 分形维数在 1.5—1.6 之间. 这种剪切带的分形特征和应力锯齿大小的幂律分布相对应. 此外, 变形时产生的分形结构还可以延伸到非晶的微观原子尺度. 图 10 (b) 为分子动力学模拟非晶合金变形后原子发生非仿射 (non-affine) 或不可逆变形的区域 [48]. 对这些变形区域的几何分析发现, 这些区域在一定变形量后相互贯通, 可以形成三维尺度上的分形结构, 分形维数在 2.5—2.6 之间. 这些结果从

空间上佐证了非晶合金流变复杂的自组织临界行为, 并说明了在非晶合金流变看似复杂流变行为的背后具有某种内在的规律和有序性.

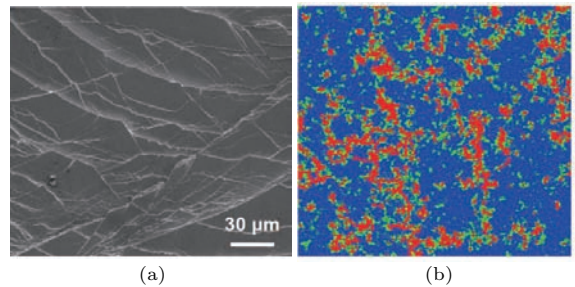


图 10 (a) 非晶宏观塑性变形后多重剪切带形成的分形图案 [47]; (b) 计算机模拟原子尺度变形区域形成的分形图案 [48]
 Fig. 10. (a) The fractal shear band pattern after several plastic deformation in metallic glass [47]; (b) the fractal pattern formed by atomic-scale plastic flow region in molecular dynamic simulation [48].

4.3 非晶流变自组织临界性的物理机制

非晶流变的自组织临界性的出现应该和其内部大量变形单元的相互作用密切相关. 在非晶合金

的宏观塑性流变过程中, 剪切带可以看作是变形的主要载体和单元. 韧性非晶合金自组织临界状态的出现表明剪切带之间的相互作用对其塑性变形起了非常重要的作用, 必须在其变形模型中予以考虑. 一条剪切带的滑移必然会引起非晶内部应力的重新分布, 从而对其他剪切带的运动行为产生影响. 但由于剪切带产生的随机性和“二维”特性, 从理论分析上直接求解剪切带之间的相互作用非常困难. 为研究剪切带相互作用对其运动扩展行为的影响, 我们曾提出了一个简单的多重剪切带滞滑运动模型^[8]. 在该模型中, 每个剪切带都可以发生滞滑运动, 但受到临近的剪切带滑移的制约和影响, 即只考虑剪切带之间短程弹性相互作用. 描述多个剪切带运动的方程组可写为

$$k(v_0 t - x_i) + k_c(x_{i+1} + x_{i-1} - 2x_i) - \sigma_f(\dot{x}_i) = m\ddot{x}_i \quad (i = 1, 2, 3, \dots, N), \quad (7)$$

其中左边第一项代表加载应力, 第二项代表临近剪切带之间的相互作用力, N 为剪切带的数目. 对方程组的数值解发现, 不同剪切带之间由于相互作用其运动滑移在时间和空间上存在协同性, 并可以组织成一系列具有不同大小的间歇性出现塑性流变事件, 如图 11 所示. 对这些事件进行统计分析发现, 这些锯齿事件出现的概率符合标准的幂律分布, 幂指数为 1.42, 和实验得到的幂指数相当. 从 (7) 式和图 11 还可以看出, 剪切带自组织形成的这些标度不变的流变事件和地震的发生无论是在运动物理方程还是表现形式上都具有相似性, 因此韧性非晶合金的塑性流变可以作为模拟地震发生的一个理想的实验体系. 除了理论分析以外, 我们还采用多个非晶样品同时压缩的方法, 从实验角度直接考虑剪切带之间的相互作用对锯齿动力学行为的影响. 在同时压缩时, 每个样品都会形成一条主剪切带, 而剪切带之间的弹性相互作用则通过施载的测试仪器来相互传递, 因此很容易量化. 发现在引入剪切带相互作用后, 实验得到的应力锯齿曲线变得复杂, 锯齿的统计分析结果和理论数值计算结果符合得非常好. 这说明剪切带之间的相互作用确实对韧性非晶合金的自组织临界状态的形成具有重要的作用.

在微观原子尺度, 非晶合金复杂的自组织流变行为来源于基本变形单元-STZs之间的长程弹性相互作用. 由于周围弹性基体的限制, 单个STZ的剪切变形将会在周围基体产生长程的弹性力场,

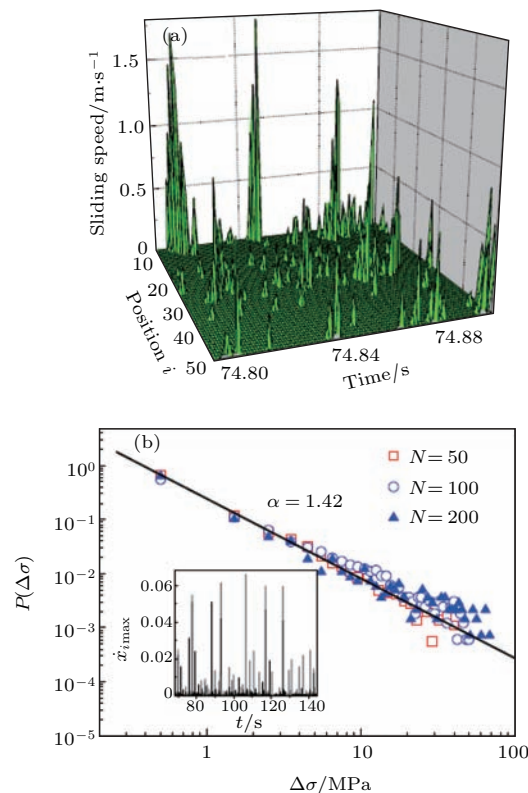


图 11 (a) 数值计算的多重剪切带在空间和时间上自组织形成的塑性流变事件; (b) 不同剪切带数目时流变事件造成的锯齿应力降的概率分布^[8]

Fig. 11. (a) The plastic flow events formed by the multiple shear bands by numerical calculations; (b) the probability distribution of stress drop due to the plastic flow events^[8].

因此可以影响其他STZs的运动. 从Eshelby理论出发可以很容易得到单个STZ的纯剪切变形在周围基体引起的应力场, 一般为四极矩的应力场和应变场(即应力和应变). 但大量STZs存在时, 它们之间相互作用引起的弹性应力场和弹性势能会非常复杂, 并强烈依赖于STZ的密度和空间分布. 目前关于STZs之间的相互作用对非晶变形行为机制的影响有很多理论和模拟研究. Maloney和Lemaitre^[49]通过准静态极限下非晶合金剪切变形的分子动力学模拟, 首次直观地给出单个STZ附近的四极矩应变场的空间分布以及这些四极矩应变场耦合形成的图案, 如图 12 所示. 最近, Dasgupta等^[50]从Eshelby理论出发, 理论计算了STZs之间由于相互作用而引起的总的弹性势能, 发现只有当这些STZs沿剪切应力方向排列时, 对应着体系弹性势能的最低点. 该结果说明剪切带的形成是由于STZs之间由于长程弹性相互作用力相互耦合的结果. 由于弹性力场的复杂性, STZs之间的相互作用如何影响非晶流变的自组织临界行为的形成和

演化的具体机制目前仍然需要大量的研究. 我们曾提出了一种考虑STZs的随机相互作用模型, 用以定量分析大量STZs自组织行为的演化. 和前面的理论分析弹性力场不同, 该模型主要将STZs之间的相互作用看成是叠加在平均力场的随机应力噪声. 这样可以通过计算体系的Fokker-Planck公式, 来得到STZs的密度在空间的概率分布. 应用该模型, 我们可以解释各种不同非晶合金断裂表面的韧窝的分形特征和形成机制. 这些韧窝一般可以看作断裂时裂纹尖端塑性变形区的STZs的集合体.

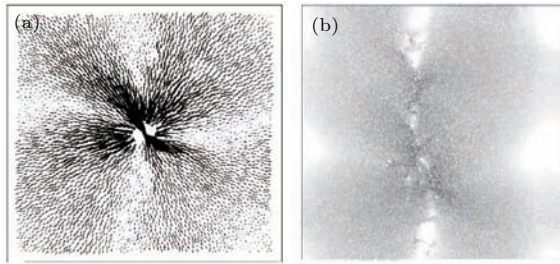


图12 (a) 单个STZ剪切在周围基体引起的四极矩应变场; (b) STZs形成的四极矩应力场耦合形成的图案^[49]

Fig. 12. (a) The quadruple strain field caused by the shear of a single STZ; (b) the pattern formed by coupling of the quadruple strain fields of STZs^[49].

5 总结与展望

综上所述, 在外加应力下, 非晶合金流变可以表现出跨尺度的高度时空不均匀特征. 在宏观尺度, 非晶合金流变表现为空间局域化的剪切带和间歇性的锯齿流变行为, 锯齿流变行为起源于剪切带的滞滑运动, 是剪切带在运动过程中一种本征的动力学不稳定性; 在微观原子尺度, 非晶合金的流变来自于局域松散原子团簇的不可逆变形, 这些局域变形区域之间由于长程相互作用也会自组织形成一系列不连续的塑性流变事件. 非晶合金这些独特的变形机制使它们具有优异和独特的力学性能. 在一定条件下, 非晶合金的流变可以表现出复杂的自组织临界行为, 和自然界很多复杂的动力学系统行为相似. 非晶流变的自组织临界性起源于不同尺度的变形承载单元的相互作用.

过去几十年虽然在非晶合金流变的理论和实验研究上取得了很多进展, 但仍有以下问题需要研究: 1) 非晶合金锯齿流变过程中剪切带的动态性质如速度、温度如何演化以及失稳的问题, 该问题对理解非晶合金的塑性和断裂非常重要; 2) 如何在现有的STZs的理论中考虑加入STZs之间的相互力

学作用, 进而从理论上解决STZs自组织耦合成剪切带的问题; 3) 如何在微观结构图像上理解非晶合金在三维尺度较为均匀的滞弹性变形向二维尺度上不均匀剪切带转变问题; 4) 各种因素对非晶合金自组织临界行为影响的具体机制以及自组织临界行为向混沌行为转变的问题. 这些问题的解决将不仅有助于建立统一的非晶流变的跨尺度理论, 对高性能非晶合金材料的设计和开发也有重要的指导意义.

感谢中国科学院物理研究所汪卫华研究员及香港城市大学刘锦川 (Liu, Chain-Tsuan) 教授、杨勇教授的讨论.

参考文献

- [1] Wang W H 2013 *Prog. Phys.* **33** 177 (in Chinese) [汪卫华 2013 物理学进展 **33** 177]
- [2] Klement W, Willens R, Duwez P 1960 *Nature* **187** 869
- [3] Wang W H, Dong C, Shek C H 2004 *Mater. Sci. Eng. R* **44** 55
- [4] Greer A L 1995 *Science* **267** 1947
- [5] Ma Y F, Tang B Z, Xia L, Ding D 2016 *Chin. Phys. Lett.* **33** 126101
- [6] Inoue A 2000 *Acta Mater.* **48** 279
- [7] Schuh C A, Hufnagel T C, Ramamurty U 2007 *Acta Mater.* **55** 4067
- [8] Sun B A, Yu H B, Zhao D Q, Bai H Y, Wang W H 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 035501
- [9] Sun B A 2010 *Ph. D. Dissertation* (Beijing: Chinese Academy of Science) (in Chinese) [孙保安 2010 博士学位论文 (北京: 中国科学院)]
- [10] Spaepen F 1977 *Acta Metall.* **25** 407
- [11] Chen M W, Inoue A, Zhang W, Sakurai T 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 245502
- [12] Greer A L, Cheng Y Q, Ma E 2013 *Mater. Sci. Eng. R* **74** 71
- [13] Argon A S 1979 *Acta Mater.* **27** 47
- [14] Lewandowski J J, Greer A L 2005 *Nat. Mater.* **5** 18
- [15] Wright W J, Samal M W, Hufnagel, LeBlanc M M, Florando J N 2011 *Acta Mater.* **57** 4639
- [16] Bruck H A, Rosakis A J, Johnson W L 1996 *J. Mater. Res.* **11** 503
- [17] Jiang W H, Liao H H, Liu F X, Choo H, Liaw P K 2008 *Metall. Mater. Trans A* **39** 1822
- [18] Ye J C, Lu J, Liu C T, Yang Y 2010 *Nat. Mater.* **9** 619
- [19] Demetriou M D, Launey M E, Garrett G, Schramm J P, Hoffmann D C, Johnson W L, Ritchie R O 2011 *Nat. Mater.* **10** 123
- [20] Jiang M Q, Lan H D 2009 *J. Mech. Phys. Solids* **57** 1267
- [21] Park K W, Lee C M, Wakeda M, Shibutani Y, Falk M L, Lee J C 2008 *Acta Mater.* **56** 5440

- [22] Lu Z, Jiao W, Wang W H, Bai H Y 2014 *Phys. Rev. Lett.* **113** 045501
- [23] Huo L S, Zeng J F, Wang W H, Liu C T, Yang Y 2013 *Acta Mater.* **61** 4329
- [24] Schuh C A, Nieh T G 2003 *Acta Mater.* **51** 87
- [25] Wang Z, Qiao J W, Tian H, Sun B A, Wang B C, Xu B S, Chen M W 2015 *Appl. Phys. Lett.* **107** 201902
- [26] Song S X, Bei H, Wadsworth J, Nieh T G 2008 *Intermetallics* **16** 813
- [27] Sun B A, Pauly S, Hu J, Wang W H, Kuhn U, Eckert J 2013 *Phys. Rev. Lett.* **110** 225501
- [28] Dubach A, Torre F H D, Löffler J F 2009 *Acta Mater.* **57** 881
- [29] Hu J, Sun B A, Yang Y, Liu C T, Pauly S, Weng Y X, Eckert J 2015 *Intermetallics* **66** 31
- [30] Qiao J W, Zhang Y, Liaw P K 2010 *Intermetallics* **18** 2057
- [31] Maloney C, Lemaitre A 2004 *Phys. Rev. Lett.* **93** 016001
- [32] Johnson W L, Samwer K 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 195501
- [33] Falk M L, Langer J S 1997 *Phys. Rev. E* **57** 7192
- [34] Langer J S 2004 *Phys. Rev. E* **70** 041502
- [35] Wang W H, Yang Y, Nieh T G, Liu C T 2015 *Intermetallics* **67** 81
- [36] Manning M L, Langer J S, Carlson J M 2007 *Phys. Rev. E* **76** 056106
- [37] Sun B A, Yang Y, Wang W H, Liu C T 2016 *Sci. Rep.* **6** 21388
- [38] Furukawa A, Tanaka H 2009 *Nat. Mater.* **8** 601
- [39] Bak P, Tang C, Wiesenfeld K 1987 *Phys. Rev. Lett.* **59** 381
- [40] Bak P 1996 *How Nature Works: The Science of Self-Organized Criticality* (New York: Copernicus Press) p10
- [41] Sammonds 2005 *Nat. Mater.* **4** 425
- [42] Ananthakrishna G, Noronha J, Fressengeas C, Kubin L P 1999 *Phys. Rev. E* **60** 5455
- [43] Ren J L, Chen C, Wang G, Mattern N, Eckert J 2011 *AIP Adv.* **1** 032158
- [44] Wang G, Chan K C, Xia L, Yu P, Shen J, Wang W H 2009 *Acta Mater.* **57** 6146
- [45] Cannelli C, Cantelli R, Cordero F 1993 *Phys. Rev. Lett.* **70** 3923
- [46] Sarmah R, Ananthakrishna G, Sun B A, Wang W H 2011 *Acta Mater.* **59** 4482
- [47] Sun B A, Wang W H 2011 *Appl. Phys. Lett.* **98** 201902
- [48] Peng H L, Li M Z, Sun B A, Wang W H 2012 *J. Appl. Phys.* **112** 023516
- [49] Maloney C, Lemaitre A 2004 *Phys. Rev. E* **74** 016118
- [50] Dasgupta R, George H, Hentschel E, Procaccia I 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 255502

SPECIAL ISSUE — Progress in research of amorphous physics

Self-organized critical behavior in plastic flow of amorphous solids*

Sun Bao-An[†] Wang Li-Feng Shao Jian-Hua*(Herbert Gleiter Institute For Nanoscience, Nanjing University of Science and Technology, Nanjing 210094, China)*

(Received 26 May 2017; revised manuscript received 24 June 2017)

Abstract

Amorphous solids are metastable materials formed by the rapid quenching of liquid melts. Under mechanical stress, amorphous solid displays unique and complex plastic flow behavior, which is both spatially and temporally inhomogeneous on different length scales. In some cases, the plastic flow behavior of amorphous solid can evolve into the self-organized critical state, which is similar to many complex phenomena in nature and physics such as earthquakes, snow avalanches, motions of magnetic walls, etc. In this paper, we briefly review the recent research progress of the plastic flows of amorphous solids, with an emphasis on the plastic flow of metallic glass which has been one of our research foci in past few years. The review begins with an introduction of the inhomogeneous flow behaviors on different scales, from the macroscopical-scale spatially inhomogeneous shear bands, temporally intermittent serrated flow to the atomic-scale localized viscoelastic behavior in metallic glass. The microscopical deformation theories including free volume model and shear transformation zone model, and recent efforts to elucidate macroscopical flow behaviors with these theories, are also presented. Finally, recent progress of the self-organized critical (SOC) behaviors of the plastic flow of metallic glass are reviewed, with an emphasis on its experimental characterizations and the underlying physics. The emergence of SOC in the plastic flow is closely related to the interactions between plastic flow carriers, and based on this point, the relation between the SOC behavior and the plasticity of metallic glass is elucidated. The implications of plastic flow of metallic glass for understanding the occurrence of earthquakes are also discussed. The review is also concluded with some perspectives and unsolved issues for the plastic flow of amorphous solids.

Keywords: amorphous solids, plastic flow, self-organized criticality, chaos**PACS:** 81.05.Kf, 62.20.F-, 05.65.+b, 05.45.-a**DOI:** [10.7498/aps.66.178103](https://doi.org/10.7498/aps.66.178103)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 51671121, 51601002, 51520105001) and the Fundamental Research Funds for the Central Universities of China (Grant No. 30917015107).

[†] Corresponding author. E-mail: baoansun@njust.edu.cn