块体非晶合金中变形引起的结构演化

王刚^{①②}, MATTERN Norbert^②, BEDNARČÍ Jozef^③, 夏雷^①, 翟启杰^①, 董远达^①,
ECKERT Jürgen^{②④}

① 上海大学微结构重点实验室, 上海 200444;

② Leibniz-Institute IFW Dresden, Institute for Complex Materials, Dresden, D-01069, Germany;

③ HASYLAB at DESY, Hamburg, D-22603, Germany;

④ TU Dresden, Institute of Materials Science, Dresden, D-01062, Germany

E-mail: g.wang@shu.edu.cn

块体非晶合金虽然具有优越的综合机械性能, 然而室温塑形的缺失极大地限制了它的工程应用前景. 为此, 科学家们关注于非晶合金的变形机制, 以求在理解其变形机制的基础上, 探索提高块体非晶合金塑形的办法. 块体非晶合金在压应力作用下, 呈现出弹-塑性变形行为. 根据目前的研究结果, 非晶相中剪切转变区(shear transition zone, STZ)的形成和开动, 是传递塑性应变的基本形变单元. 剪切转变区的形成与聚集诱发剪切局域化, 进而形成剪切带并导致灾难性的剪切断裂. 在剪切带形成与扩展过程中, 块体非晶合金的塑性应力-应变行为出现锯齿性流变形态. 因此, 近 10 年来, 大量的研究工作关注于块体非晶合金的剪切带的形态、锯齿流变行为和断裂屈服行为等, 并试图通过建立结构与它们之间的关联性, 进而弄清楚块体非晶合金的变形机理. 然而由于非晶合金原子结构的无序性和均匀性, 对其变形过程中的结构观察极其困难. 虽然通过高分辨电子显微镜等手段, 人们已经观察了剪切带内部的结构, 但是依然不足以为揭示块体非晶合金的变形机理提供可靠的结构信息. 为

此, 我们期望通过高能 X-射线衍射方法, 对非晶相结构在应力作用下的结构演化过程进行阐述, 进而与块体非晶合金的弹性变形、屈服行为和塑性变形过程联系, 最终揭示块体非晶合金的强度变化与原子结构演化的规律.

在本研究中, 我们选择 $\text{Cu}_{50}\text{Zr}_{50}$ 二元非晶合金为研究对象. 通过在 Cu-Zr 二元合金中添加 Ti (即 $\text{Cu}_{50}\text{Zr}_{45}\text{Ti}_5$) 改变其塑性和屈服强度. 实验用样品为直径 1 mm、长度 2 mm 的圆棒. 实验在德国汉堡同步辐射中心的 BW5 高能 X-射线线束上进行. 非晶合金样品在小型力学加载台 (Kammrath and Weiss GmbH) 上进行步进加载, 并通过高能 X-射线对其进行原位衍射观察 (图 1(a)). 通过对衍射图片进行解析, 研究了 $\text{Cu}_{50}\text{Zr}_{50}$ 和 $\text{Cu}_{50}\text{Zr}_{45}\text{Ti}_5$ 非晶合金原子结构随载荷 (应变) 的增加而发生的演化过程.

通过上述实验, 我们发现, 结构因子和原子对相关函数中峰位置的相对位移量, 可表征非晶合金在加载方向和自由膨胀方向的应变张量 (图 1(b) 和 (c)). 进一步通过分析对相关函数随应力的演化过程, 我们发现, 即使在

弹性加载范围内, 非晶相的短程有序畴也发生了结构改变, 即 Cu-(Zr,Cu) 和 Zr-Zr 原子键沿加载方向滑动, 而不仅仅是以往我们认为的原子键的弹性伸长或缩短. 原子在近程序畴的滑动导致了第一原子层的弹性应变值约为宏观弹性应变值的一半, 而在其他原子层即中程序畴的弹性应变极限与宏观弹性应变相近 (图 1(d)), 表明除了第一原子层外, 其他原子层的原子键在弹性加载范围内依然呈现为弹性缩短. 在塑性变形阶段, 尽管出现了大量的剪切带, 但是由于剪切带的体积分数依然较少, 剪切带所引起的非晶相结构改变在衍射图像中未能观察到. 卸载后, 第一原子壳层的原子键的滑动返回至未加载状态时的位置. 在加载至屈服点时, 通过计算对相关函数中的各向异性组元, 我们发现, 伴随着第一原子壳层的原子键滑动, 中程有序畴内的原子将发生协同变形, 形成一个协同变形区 (图 1(e)). 这一协同变形区尺寸与剪切转变区尺寸相近, 被认为是引发剪切转变区开动的起源点. 通过 $\text{Cu}_{50}\text{Zr}_{50}$ 和 $\text{Cu}_{50}\text{Zr}_{45}\text{Ti}_5$ 两种非晶合金的对比研究, 我们认为, 大的协同变形区对应于高的屈服强度.

全文见: Wang G, Mattern N, Bednarčí J, et al. Deformation induced structural evolution in bulk metallic glasses. Chin Sci Bull, 2011, 56: 3952–3959, doi: 10.1007/s11434-011-4784-5

图1 $\text{Cu}_{50}\text{Zr}_{50}$ 非晶合金压缩变形原位 X 射线衍射观察结果

(a) $\text{Cu}_{50}\text{Zr}_{50}$ 非晶合金的应力-位移曲线和原位衍射图; (b) $\text{Cu}_{50}\text{Zr}_{50}$ 非晶合金的应变值 $\varepsilon(\sigma, \varphi)$ 与方向和应力的关系曲线; (c) 通过衍射图片计算出的 $\text{Cu}_{50}\text{Zr}_{50}$ 非晶合金应变张量与应力的关系曲线; (d) 不同应力下, $\text{Cu}_{50}\text{Zr}_{50}$ 非晶合金对相关函数中的各向同性组元 $\rho_0(r)$ 和各向异性组元 $\rho_2(r)$; (e) 短程序中局部原子键滑动的示意图和由于原子键滑动所引起的协同变形区示意图