

## 介觀尺度下金屬玻璃之塑性行為模擬

葉智仁<sup>1</sup>, 羅友杰<sup>2</sup>, 黃仲偉<sup>3</sup>, 胡宣德<sup>1</sup>,

<sup>1</sup>國立成功大學土木工程學系

<sup>2</sup>國立交通大學材料工程學系

<sup>3</sup>中原大學土木工程學系

### 摘要

金屬玻璃擁有很多不同的機械性質。在不同的環境條件下會有不同的力學機制，當在高溫或應力較低之條件下，金屬玻璃的變形行為較為均勻。然而在低溫或應力較高的環境下時會產生不均勻的塑性變形。隨著塑性變形生成時的過度集中，塑性變形會進一步累積成剪切帶(shear band)，並產生災難性的破壞。為了瞭解塑性變形以及剪切帶的生成機制，探討微觀的剪力變形是有必要的。因此，本文建立一介觀尺度模型，並結合動態蒙地卡羅法及有限元素法，以利探討金屬玻璃之特性。此方法可以有效地瞭解金屬玻璃在塑性變形產生時其剪力裂縫的生成、應力及應變狀態的分布情形，以及應力-應變曲線的變化情形。

**關鍵字：**金屬玻璃、有限元素法、動態蒙地卡羅法

### ABSTRACT

Metallic glasses (MGs) generally have diverse mechanical properties, such as high strength and poor ductility. The deformation behaviors of MGs, to a large extent, depend on the ambient conditions. For example, the deformation of MGs is homogenous at high temperature and low stress. On the other hand, the deformation of MGs is inhomogeneous at low temperature and high stress. However, the inhomogeneous deformation further causes the shear band which is an accumulation of local plastic deformation. The formation of shear band always leads to a catastrophic failure with the increasing plastic deformation. In order to study the generation of shear band, a multiscale model which considers the microscopic shear transformation in macroscopic deformation is inevitable. In this paper, a mesoscale model combines the finite element method and the Kinetic Monte Carlo method is used to investigate the properties of the metallic glasses. More mechanical properties and deformation behaviors of the MGs can be explored through the proposed model.

**Keywords:** metallic glasses, Kinetic Monte Carlo method, finite element method

## 一、緒論

一般的金屬都是晶體結構，其結構排列成一定的週期性且規則的排列。一般來說，晶體結構可以用排列上的規則性程度來區分，有單晶態及多晶態的區別，除此之外還有一種稱為非晶態。而非晶態金屬，其金屬原子或是合金分子的排列毫無規則性。金屬玻璃(非晶態金屬)，因結構和玻璃的結構排列一樣為非晶態，因此稱作金屬玻璃。

金屬玻璃在機械性質上有很多突出的優點，像是高強度及抗腐蝕等等。然而金屬玻璃在室溫下之延展性極差，當受力產生變形後，容易形成剪切帶(shear band)[1]，一旦剪切帶形成會快速蔓延擴展，並造成災難性的結果。

而剪切帶的形成機制是由塑性變形的產生及不斷累積在局部區域而造成的。因此探討塑性變形的形成過程及機制有助於了解金屬玻璃破壞的機制，本研究將藉由介觀尺度模型(mesoscale modeling)探討剪切帶生成的模式。了解剪切帶的生成有助於改善金屬玻璃在塑性的抵抗能力。

## 二、文獻回顧

分子動力學在微觀的模擬中不但已經被大量使用，也用於金屬玻璃之塑性變型[2]，然而分子動力學仍受限於尺度的影響。剪切帶形成過程中，剪切帶寬度通常介於 10 nm 至 100 nm [3,4]，形成時間大約介於  $10^{-5}$  至  $10^{-3}$  秒 [5]，且分子動力學無法清楚知道剪切帶形成中的過程如而演變。因此對於分子動力學來說，探討剪切帶形成的過程並不合適，然而介觀尺度模型在此可以解決分子動力學在這方面的弱勢。

在連體力學當中，力與變形間的關係常常利用本構方程式(constitutive equation)，在介觀尺度模型中則以 STZ [6](Shear Transformation Zone)為變形的最小單位，STZ 是一個包含幾十至幾百個原子所組成的區塊，大小約為 1 nm 至 2 nm，此方法結合動態蒙地卡羅法(Kinetic Monte Carlo method, KMC)，此法已被用來模擬塑性變形的生成。

近年，Homer、Li 以及 Schuh 等人的團隊，也發展一套 STZ 動力學模擬方法 [7]。他們利用有限元素法來計算塑性變形之應力及應變，並且利用有限元素法中劃分網格

的方式，使劃分 STZ 更為容易，換言之在有限元素模型中，一個 mesh 就是一個 STZ。並可藉由有限元素套裝軟體的優勢來處理二維及三維問題甚至是更複雜的幾何模型以及邊界條件。

## 三、研究方法

### 3.1 模型設置

本文所使用的軟體為有限元素套裝軟體 abaqus 及 matlab。首先在 abaqus 方面需要先建立好相關模型設置，包含模型尺寸，相關材料參數，mesh 方式及邊界條件的設置等等。

本文所探討的介觀尺度模型為一平面正方形(217.6nm×217.6nm)，邊界設置為週期性邊界且 mesh 成 128×128 個元素，每個元素皆為 CPS4R，元素的大小為 1.7 nm × 1.7 nm，符合前述所說之 STZ 大小(1~2nm)。邊界條件設置成週期性邊界(periodic boundary condition)用以模擬材料在有限尺度下，其應力計算有更合理的行為。

### 3.2 活化能

如先前提到，在此介觀尺度模型中，每一個 mesh 就是一個 STZ，而每個 STZ 中各自有 M 個 mode。在每一個 mode 中有各自對應的活化能  $Q^{(M)}$  (activation energy)，計算方式如下。

$$Q^{(M)} = \Delta F_* \exp(-\eta_g) - \frac{1}{2} V_g \sigma_{ij} \epsilon_{ij}^{(M)}$$

在運算方面 matlab 負責活化能的相關計算，利用 matlab 處理矩陣的優勢，採取三維陣列處理每個活化能所對應的 mode。此外本模型加入了應變軟化(strain softening)的影響，在模型上的意義為：當同一個 voxel 經歷多次變形後會變得更容易變形。在能量的觀點來看，也就是自由能會降低，發生塑性變形的機率也會變高。其中  $\eta_g$  用來表示在第 g 步發生應變軟化的參數

相關參數如表一，其中  $v_0$  為 attempt frequency， $K_B$  為波茲曼常數(Boltzmann constant)， $T$  為溫度， $g \rightarrow g+1$  代表其由第 g 個狀態過渡到第 g+1 個狀態。計算完每個步驟所需之活化能( $Q_{g \rightarrow g+1}^{(M)}$ )後，將活化能

$Q_{g \rightarrow g+1}^{(M)}$  帶入下列式子，得到每個步驟所需之躍遷率(activation rate)。

$$k_{g \rightarrow g+1}^{(M)} = v_0 \exp(-Q_{g \rightarrow g+1}^{(M)} / K_B T)$$

### 3.3 Kinetic Monte Carlo method

前一個小節提到躍遷率的計算方法，本小節要介紹動態蒙地卡羅法(KMC)

1. 首先，在進行 KMC 運算時，需先計算出所有 voxel 的躍遷率  $k_i$ ，並求得每個躍遷率所對應的累積函數  $K_i$  (cumulative function)。

$$K_i = \sum_{j=1}^i k_j, i = 1, 2, \dots, N$$

2. 給定一亂數  $u \in [0,1]$ ，並找出滿足下式條件之  $i$  值所對應的 voxel，此 voxel 即為發生變形的位址。

$$K_{i-1} < uK_N \leq K_i$$

3. 時間的計算則為  $t = t + \Delta t$ ， $\Delta t$  算式如下。

$$\Delta t = -\frac{1}{K_N}$$

4. 繼續重複步驟 1，直到系統平均應變達 0.1 時，迴圈將會中止。

### 3.4 運算流程

在此介觀尺度模型當中共有三種事件(events)，分別是無熱塑性(athermal event)，熱塑性(plasticity event)及純彈性(elasticity event)。在每一步事件的觸發會先根據活化能的大小，也就是說在每一個事件觸發前，程式會檢查全部的 voxel 在每一個 mode 中有無任何活化能  $Q$  小於零。如圖一之流程圖，當有任何一個活化能小於零時，無熱塑性會被觸發。在無熱塑性這個事件中，活化能小於零的 voxel 會優先被觸發，也就是被視為瞬間發生，在此事件中並不會計入累積的時間；另外，當此事件被觸發時，至少會有一個 voxel 被觸發，被觸發的個數為活化能  $Q$  小於零之 voxel 數量；被觸發的位置為活化能  $Q$  小於零之 voxel。

然而，在活化能  $Q$  大於零的條件下，有機會發生熱塑性或是純彈性事件。當  $t$  小於  $t'$  時，純彈性事件會被觸發，且在這個事件中沒有任何熱應變被觸發，模型只受彈性均勻拉伸。當  $t$  大於  $t'$  時，當熱塑性被觸發後，模型除了均勻拉伸外還會伴隨著一個 voxel 之熱應變的觸發，此時熱應變觸發的位置是由 KMC 所決定。

一開始進入 KMC 時，模型的平均熱應變為零。隨著無熱塑性被觸發時，活化能小於零的 voxel 會優先參與計算，及熱塑性事件每次被觸發時，每次都會觸發一個 voxel 之熱應變。隨著無熱塑性及熱塑性這兩個事件持續累積並集中(如圖二)，可看出不同 mode 之 Von Mises 應變圖會有不同的結果，透過 Von Mises 應變圖可以瞭解到剪切帶形成的模式，會隨著熱應變累積而越來越多，以及不同 mode 下之剪切帶生成的情形。

而每當任何一個事件被觸發後，會透過 abaqus 計算得到新的應力及應變分布；程式再利用新的應力及應變，計算新的活化能以觸發下一個事件；此步驟會不斷重複，直到金屬玻璃之平均應變達到 0.1。

## 四、結果與討論

從 Von Mises 應變圖(圖二及圖三)可以發現，相同應變之下，mode20 和 mode16 兩者都明顯的剪切帶。然而 mode20 相較 mode16 有較集中的剪切帶，且應變值較高(紅色部分)；然而從 mode12 來看，剪切帶呈現較均勻，熱應變分布的狀況呈現高度分散且剪切帶之寬度較前兩者寬，mode12 之剪切帶並不明顯。從前面三個例子可以清楚知道：隨著 mode 越大，剪切帶的形成會越集中，且剪切帶上的應變會越大，如 mode20。另一方面，mode 越小，所得到的應變分布會較分散，剪切帶的形成的狀況不明顯，如 mode12。

從不同 mode 數可以得到一個結果，應變分佈的狀況和 mode 個數高度相關。另一方面，這裡會探討不同 mode 對應力-應變曲線的影響。雖然此介觀模型的行為都是微觀中的演變，然而應力-應變曲線一開始仍有線性段；在線性段之應力峰值後，會有一應力下降段(stress drop)，其中以 mode20 應力下降段最完明顯，隨後應力趨勢呈現鋸齒狀，但整體起伏比不明顯。另外 mode16 在應力

峰值後也有明顯的應力下降段，但是並沒有 mode20 下降得多。值得一提的是，mode12 在峰值過後，並沒有明顯應力下降段，且隨後之應力趨勢呈現平台狀；從應力應變圖中可以發現，隨著 mode 越大，在應力峰值後會有較大的下降段(stress drop)；隨著 mode 越小，應力下降段越不顯著。

### 五、參考文獻

[1] Chen, H., He, Y., Shiflet, G., Poon, S., 1994. Deformation-induced nanocrystal formation in shear bands of amorphous alloys. *Nature* 367, 541.

[2] Takeuchi, S., Edagawa, K., 2011. Atomistic simulation and modeling of localized shear deformation in metallic glasses. *Prog. Mater. Sci.* 56, 785.

[3] Shimizu, F., Ogata, S., Li, J., 2006. Yield point of metallic glass. *Acta Mater.* 54, 4293–4298.

[4] Shimizu, F., Ogata, S., Li, J., 2007. Theory of shear banding in metallic glasses and molecular dynamics calculations. *Mater. Trans.* 48, 2923–2927.

[5] Neuhauser, H., 1978. Rate of shear band formation in metallic glasses. *Scripta Metall.* 12, 471.

[6] Argon, A., 1979. Plastic deformation in metallic glasses. *Acta Metall.* 27, 47.

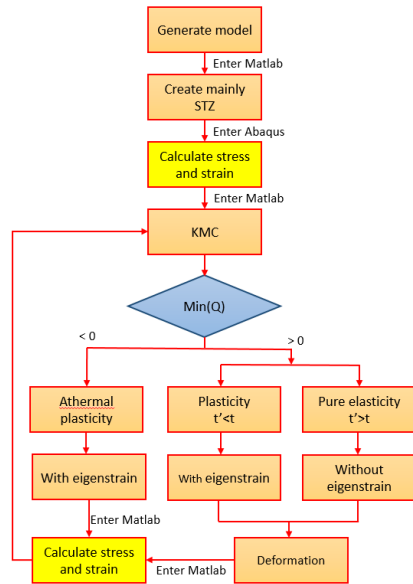
[7] Homer, E., Schuh, C., 2009. Mesoscale modeling of amorphous metals by shear transformation zone dynamics. *Acta Mater.* 57, 2823.

### 六、表格

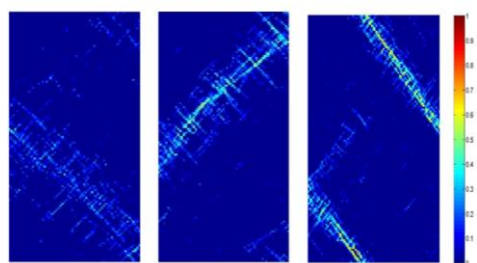
表 1 相關參數

Parameter	Value
E	88.6 GPa
$\nu$	0.371
$\nu_0$	$1 \times 10^{13}$ Hz
F	5 eV
$Q_{act}$	0.37 eV
T	300 k

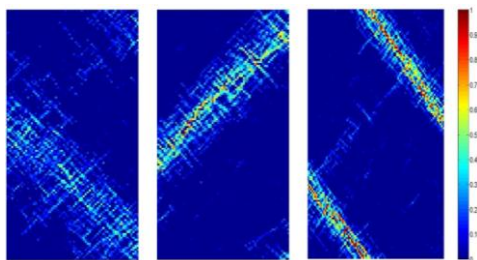
### 七、圖片



圖一 流程圖



圖二 應變為 3.6%之 Von Mises 應變分布圖 (左到右分別為 mode=12,16 及 20)



圖三 應變為 5.4%之 Von Mises 應變分布圖 (左到右分別為 mode=12,16 及 20)