
力学所揭示非晶合金剪切带涌现的时空序列与临界行为

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/19152.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

非晶合金（又称金属玻璃）因具有一系列优异性能在空天、国防、能源等领域显示出广阔应用前景。然而，非晶合金极易形成纳米尺度变形局部化剪切带，而剪切带快速扩展诱致的宏观脆性限制了其工程应用。因此，非晶合金剪切带问题成为力学、物理与材料等相关领域共同关注的重要课题。本征上，非晶合金剪切带涌现是一类远离热力学平衡下时空多尺度耦合的非线性过程。空间上，固有的结构不均匀性会引起强烈的变形及动力学行为的梯度效应。时间上，涵盖原子振动、原子团簇协同重排、塑性流动等多个速率过程。上述事件均具有各自的特征时间和空间尺度，他们的关联耦合控制剪切带涌现，使变形高度集中在宽度或厚度为数十纳米的带状区域，并以近声速的模式快速扩展。与原子周期有序排列的晶态合金不同，原子长程拓扑无序堆垛的非晶合金变形内蕴三种高度耦合纠缠的原子尺度运动：剪切、体胀和旋转。这三种局域原子运动的强纠缠是非晶合金剪切带涌现精细物理图像尚未探明的关键瓶颈。

近期，中国科学院力学研究所戴兰宏研究团队在该问题的研究中取得进展。基于连续介质力学理论框架，研究人员提出了同时考虑仿射和非仿射变形信息的两项梯度模型（Two-term gradient model, TTG模型），可以完整描述无序固体介质的局部变形场，突破了目前广泛使用的单纯仿射或非仿射模型的局限。研究人员进一步完成了对剪切、体胀、旋转这三个高度纠缠的局域运动的解耦，并在原子尺度上定义了全新的局部剪切、体胀、旋转运动事件的定量描述符。为表征这三类原子团簇运动，研究提出了剪切主导区（shear dominated zone, SDZ）、体胀主导区（dilatation dominated zone, DDZ）及旋转主导区（rotation dominated zone, RDZ）的概念和定量表征方法，克服了目前流行的剪切转变区（shear transformation zone, STZ）不能表征原子团簇旋转运动和定量描述体胀运动的不足。在此基础上，研究人员利用大规模分子动力学模拟，对非晶合金从均匀变形到局部化剪切带涌现全过程进行精细表征。通过追踪SDZ、DDZ及RDZ原子团簇运动演化时空序列，发现初始宏观均匀变形阶段剪切、体胀及旋转团簇运动事件呈现出类似“军队行动”式的步调协同一致行为，具体表现为SDZ、DDZ及RDZ在空间离散的“类液”软区随机同步激活。基于统计学的极值理论分析，研究人员发现在这个阶段，体胀局域运动事件较剪切和旋转事件的空间分布展现出更明显的非高斯长拖尾特征，表明体胀局域化流动（DDZ）起先导的主控作用。原子团簇通过体胀运动（DDZ）完成局部软化过程，随着变形加剧，这种体胀局域软化进一步激活其邻近硬区的旋转运动，进而逐渐打破了SDZ、DDZ和RDZ三者间同步激活，转变为SDZ、DDZ及RDZ的非均匀间隔分布。增强的RDZ运动又进一步加剧了SDZ和DDZ局域运动，进而诱发硬区团簇的软化。当软化程度达到临界时，硬区壁垒被打破，激活的SDZ、DDZ及RDZ相互贯穿形成剪切带。研究人员进一步基于逾渗理论，对SDZ、DDZ及RDZ原子团簇运动事件从初期均匀变形阶段的随机离散激活到变形局部化剪切带涌现时的群体贯穿演变全过程进行定量分析，发现剪切带涌现属于定向逾渗（directed percolation），并且

呈现出临界幂律标度行为。该工作提出的两项梯度（TTG）模型及三种原子团簇运动单元（SDZ、DDZ及RDZ）新概念为无序固体介质变形定量描述提供了基本工具，所揭示的剪切带涌现过程原子尺度精细图像及临界行为为深入认知非晶合金剪切带提供了新线索。

相关研究成果以Hidden spatiotemporal sequence in transition to shear band in amorphous solids为题，发表在Physical Review Research上。研究工作得到国家自然科学基金重大项目“无序合金的塑性流动与强韧化机理”、基础科学中心项目“非线性力学的多尺度问题”，以及中科院战略性先导科技专项“复杂介质系统前沿与交叉力学”（B类）等的资助。

[论文链接](#)

图2.剪切-体胀事件与旋转事件的关联“破缺”，空间分布从同步激活转变为交替间隔分布

图3.剪切带涌现前出现原子旋转团簇运动（RDZ）显著增强（图中白色气泡代表RDZ，也即原子运动的涡旋结构）

图4.非晶合金剪切带涌现原子尺度演变过程示意图

研究团队单位：力学研究所

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](https://www.iikx.com)转发