

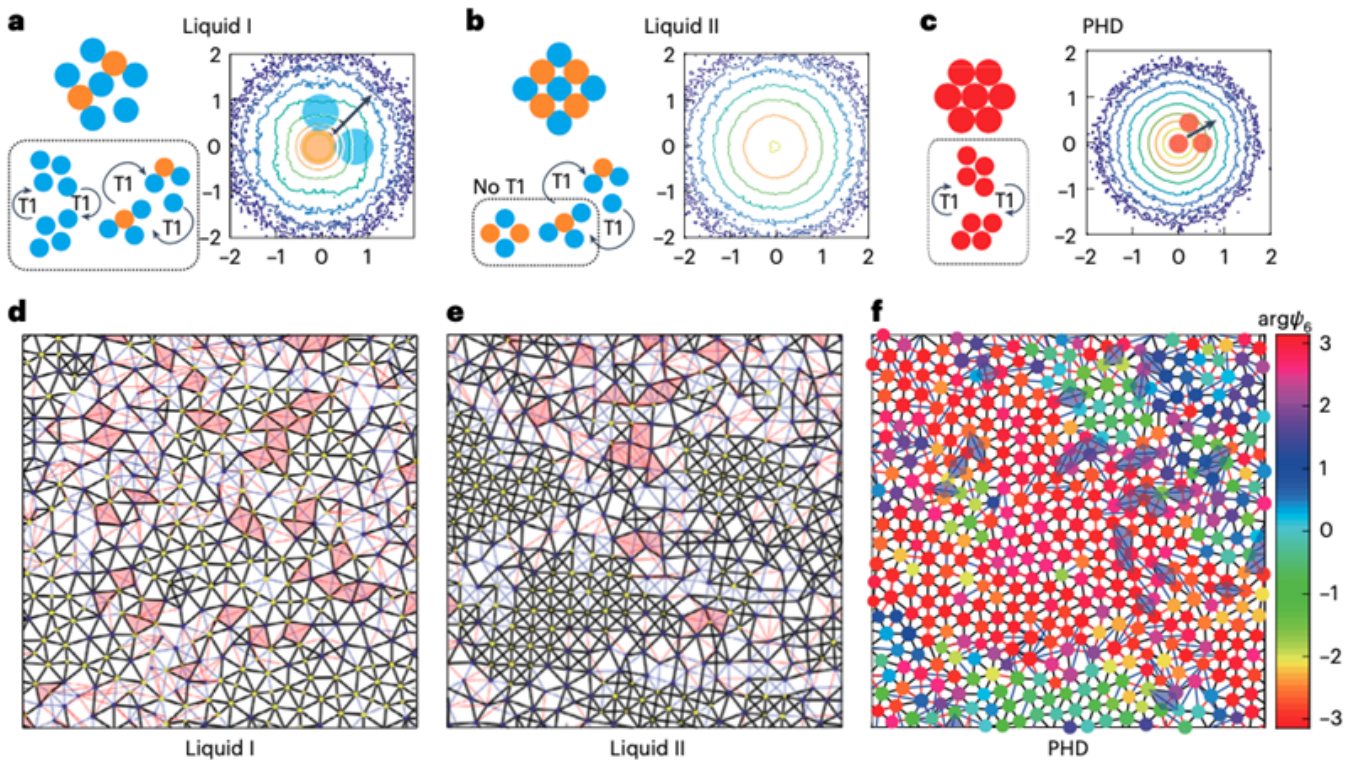
新研究揭示材料液体脆度的物理起源

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/31251.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！

新研究揭示材料液体脆度的物理起源。松山湖材料实验室研究员胡远超团队与日本东京大学Tanaka教授团队合作，利用分子动力学模拟研究揭示了材料液体脆度的物理起源。1月8日，相关成果发表于《自然-材料》（Nature Materials）。



过冷液体的局域弛豫事件的微观过程及其与结构转变机制。研究团队供图

?

当材料在高温融化之后以较快的速率进行冷却时，液体在熔点温度不会发生相变，而会被过冷到更低温度，形成过冷液体。平衡态过冷液体最重要的一个性质是它的结构弛豫时间要远短于晶体形核时间。当结构弛豫时间长于实验观测时间时，液体会进入到非平衡状态从而形成玻璃。这些时间尺度的相对差异决定了材料的玻璃形成能力。

由于材料的化学组分和微观结构的不同，它们在过冷状态下的一些物理性质，如粘度和扩散系数

等，对温度具有不同的依赖关系。有的材料的粘度随着温度降低急剧增加，被称为fragile液体；另外一些材料的粘度与温度之间接近经典的Arrhenius关系，被称为strong液体。

到底什么因素引起材料的脆度的巨大差异是多学科研究领域深刻而又关键的科学问题，在过去30年一直受到广泛的关注。对该材料特性的研究不仅有助于从理论层面揭示玻璃态和玻璃转变的本质，而且对材料加工工艺和材料设计的优化具有重要的指导意义。

为此，研究人员利用分子动力学模拟对该科学问题开展研究。他们通过设计具有不同液体脆度的简单模型体系，对材料的结构、动力学和玻璃形成能力进行系统研究，发现玻璃形成能力与液体脆度之间并不存在必须的因果关系，两者的物理起源有所不同。另外，过冷液体通常呈现出动力学不均匀性，表现为结构和动力学空间关联长度随着过冷度的增加。动力学不均匀性仅仅是伴随着慢动力学出现的副产物，与液体脆度之间也不存在因果关系。

进一步通过微观结构表征和动力学分析发现，过冷液体中的局域弛豫事件与传统的T1事件（T1 event）及其传播密切相关。在无序液体状态下，T1事件可独立发生，对应着唯一弛豫激活能。但是在具有一定结构序的局域结构中，T1事件的发生高度依赖微观结构序的内在性质，它会从无序处出现并向有序处传播。如果一个T1事件可以保持该局域结构本身，它会以协同方式进行传播，辅助有序区域在一定时间尺度内完成结构弛豫，该种液体就会成为fragile液体。T1事件的协同传播会引起弛豫激活能的增加，材料结构缺陷的骤减，导致粘度随着温度降低急剧增大。

然而，如果一个T1事件一定会破坏所处的局域结构，那么它无法以协同方式进行传播，局域弛豫事件必然引起结构序的湮灭和在别处的重生，该种液体就成为strong液体。T1事件总是以相互独立的方式发生，因此不会改变弛豫激活能，促使粘度与温度之间呈现出单一激活能的Arrhenius方式。

该研究揭示了过冷液体结构弛豫的微观机制和液体脆度的物理起源，对深入认识玻璃态和玻璃转变的本质具有重要的指导价值。（来源：中国科学报 朱汉斌）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1038/s41563-024-02068-8>

作者：胡远超等 来源：《自然—材料》

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