
研究发现固—固相变动力学中的平动—转动耦合效应

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/36789.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！

研究发现固—固相变动力学中的平动—转动耦合效应

。固—固相变是指在外界条件改变时，一种固态物质在两种晶体结构之间发生相变。固—固相变的动力学路径复杂，对最终产物和相变速率均有影响，是材料学、金属学和统计物理等领域的重点。

此前研究常以球形粒子为模型体系，揭示了丰富的固—固相变动力学行为以及多种可能影响动力学路径的因素。然而，由于其单体的旋转不变性，只能研究平动自由度导致的晶格变化；实际材料体系往往由各向异性的粒子组成，在相变过程中平动自由度与转动自由度相互耦合。这种耦合效应对结晶、玻璃化等过程的动力学具有显著影响，从而可预期其对固—固相变的动力学路径同样重要，但未有理论研究关注。因此，选取恰当的理论模型体系来研究固—固相变中平动—转动耦合的动力学机制对实际应用具有指导意义。

近日，中国科学院理论物理研究所科研团队发现，球棍多边形模型展示出丰富的相行为，特别是球棍五边形、六边形和八边形均呈现出从密堆相到旋转晶体相的同构相变。该相变过程中平动仅为简单膨胀，为理解转动及其与平动的耦合对固—固相变动力学的影响提供了理想范本。

团队剖析了球棍多边形体系固—固相变的动力学路径。分子动力学模拟发现取向场中不同的缺陷模式：在升温导致相变的过程中，球棍五边形取向场的缺陷形成模糊的条带与若干散点；球棍六边形取向场的缺陷呈现随机分布状态；球棍八边形取向场的缺陷形成鲜明条带。为厘清背后的机制，团队通过固定质心模拟，研究了相变过程中的动力学路径。固定质心模拟显示，在给定体积和质心位置固定的条件下，体系的转动序参量在体系达到平衡态时的取值，通过与实际动力学轨迹中该序参量的取值比较，可找出动力学过程中具有主导作用的运动模式。球棍五边形的动力学路径由转动主导，球棍六边形的动力学路径由平动扩张主导，球棍八边形平动与转动同步。

团队进一步探讨逆向降温过程发现，五边形和八边形的末态产物既可以是密堆态（基态），又可以是多晶态，而六边形总可以回到密堆态。晶体态的定量分析表明：在从基态升温的过程中，单体对邻居粒子的转动约束越强，粒子越倾向于优先发生平动来弱化这种约束；在从旋转晶体相降温的过程中，更强的转动效应利于粒子预先与邻居粒子对齐取向。在升温过程中，五边形在基态构型中对邻居粒子取向约束最弱，倾向于先转动，六边形对邻居粒子取向约束最强，需要先发生平动，八边形介于二者之间；在从旋转晶体相降温的过程中，六边形对周围粒有适度约束，可在收缩前调整取向，五边形和八边形对周围粒子取向几乎没有约束，无法预先调节取向，可能被困

在多晶态。

团队在前人关于晶格结构转变研究成果的基础上，聚焦各向异性粒子体系中广泛存在的平动—转动耦合对固—固相变动力学的影响。二维球棍多边形的模拟结果显示，不同运动模式主导的路径，特别是偏离准平衡假设的路径，强调了考虑平动—转动的动力学耦合的必要性。

上述研究发展了固—固相变动力学的理论框架，有望在具有类似几何形状的单体以及有修饰位点的胶体球等形成的二维晶体中得到验证，并为相变分子器件设计提供理论指导。

相关研究成果发表在《先进科学》（Advanced Science）上。研究工作得到国家自然科学基金的支持。

[论文链接](#)

形状决定的固—固相变动力学路径

研究团队单位：理论物理研究所

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](http://www.iikx.com)转发