网站地图 (http://www.imech.cas.cn/serv/wzdt/) |

联系我们 (http://www.imech.cas.cn/serv/lxfs/201212/t20121205_3698646.html) |

所[illegible] (http://www.imech.cas.cn/serv/szxx/) | 所内网 (https://ioa.imech.ac.cn) |

[illegible]ttps://mail.[illegible]net.cn/) | English (http://english.imech.cas.cn/) |

中国科学院 (http://www.cas.cn/)
(http://www.imech.cas.cn/)

中国科学院力学研究所
Institute of Mechanics,Chinese Academy of Sciences

Search

当前位置：首页 (../../../../)>>科学传播 (../../../)>>力学园地 (../../)>>前沿动态 (../)

【前沿动态】揭秘非晶合金剪切带的涌现过程

2023-04-20 14:27

【放大 缩小】

编者按：力学研究所非线性力学国家重点实验室的戴兰宏研究团队近期在非晶合金剪切带的研究上取得重要进展。他们构建了完整的剪切带涌现物理图像，可以展示剪切、体胀和旋转等原子运动的演变过程。本刊特此予以介绍，以飨读者。

揭秘非晶合金剪切带的涌现过程

杨增宇

非晶态物质广泛存在于自然界中，很多常见的材料，如沙石、沥青、橡胶、石蜡、胶体等等，都是非晶态物质。事实上，原子（或分子）排列无序的非晶态才是自然界的主旋律。大地土壤、河海流水、星云尘埃本质上也可以看作是无序排列的非晶态物质。相反，具有原子周期排列特征的晶态物质只不过是自然界众多物质中的特例。

非晶态材料家族成员丰富、种类繁多，其中的玻璃是人们日常生活中随处可见的一种非晶固体。玻璃材料在人类文明的发展中扮演了至关重要的作用。公元前3000年左右，古巴比伦人发明了玻璃，因为人们在美索不达米亚和古埃及的遗迹里发现了类似玻璃的制品。据推测，可能是他们在制陶中，无意将天然碱石与石英混合焙烧得到的，那时的玻璃几乎全部带色，而且不很透明。随着时间的推移，玻璃的制作越来越精湛，并成为了古代的一种稀罕奢侈品。中国人在制作瓷器方面堪称世界第一流，但玻璃制品虽然早在西周时期就有涉猎，但一直不是强

项，并被称为“琉璃”。因此许多玻璃制品都是通过丝绸之路千里万里过来的。这折射出不同文明间碰撞的火花。当然，近年来中国出土的玻璃实物越来越多，并可证实是本土制造的。图1展示了一些精美的古代玻璃制品，它们来自东西方的不同国家。

图1 精美的古代玻璃制品展示（图片来源：清华艺博）

a.项链（美索不达米亚北部，公元前16-前13世纪）；b.人首形珠饰（腓尼基或迦太基，公元前6-前5世纪）；c.单柄瓶（东地中海地区，公元前6-前4世纪）；d.花瓣纹装饰碗（东地中海地区，公元前5-前4世纪）；e.眼纹玻璃珠（湖北荆州,公元前475-前221年）；f.琉璃剑首，（湖南长沙，公元前475-前221年）；g.蓝色弦纹玻璃杯（广西贵港,公元前202- 公元8年）；h.玻璃瓶（山西大同,公元386-534年）

在历史的长河中，玻璃的制作技术不断发展。公元十二世纪，商品玻璃开始问世，并成为一种工业原料。时至今日，人们在日常生活中也离不开玻璃材料。图2生动形象地表明了伴随人一生的四大杯具均与非晶态玻璃材料有关。

图2 伴随人一生的四大杯具（图片来源：参考文献[1]）

非晶合金，又称金属玻璃，是玻璃家族的新成员和重要组成部分。顾名思义，它是由金属（或者合金）制成的，而普通玻璃的原料则是石英砂等一类氧化物。一般而言，大多数合金熔液在冷却时会通过形核长大的方式形成原子排列规则有序的晶体结构。这里的“形核”是指结晶过程中的孕育期，具体地说，就是当液相冷却达到结晶温度后，液相内部便开始出现许多有序排列的小原子团（称之为“晶胚”），当晶胚达到某个临界尺寸时，就成为可以稳定存在并自发长大的晶核。人们把这一过程称为形核。但是，通过快速凝固等技术可以抑制一些熔融合金内原子的结晶行为，保留下液体的无序排列原子结构特征，形成非晶合金。非晶合金作为一种新型的无序合金材料，兼具金属、玻璃、固体以及液体的特性，表现出了许多独特且优异的力学、物理、化学等性能。例如，金属玻璃具有极高的硬度、强度、断裂韧性以及优异的耐磨性、抗腐蚀性和软磁性等特点。这些优点使得金属玻璃在国防、信息、航空航天以及现代医疗等多个高新技术领域发挥着重要的作用，展现出了巨大的应用前景。然而，由于非晶合金内部的不规则原子结构，它们在外力作用下往往表现出变形的高度不均匀性。尤其是在低温、高应变率等条件下，非晶合金的塑性变形往往高度集中在纳米尺度的剪切带中。作为裂纹发生的前兆，剪切带的形成和快速发展往往会诱导材料发生宏观脆性断裂。这导致了推进非晶合金广泛工程应用的最大瓶颈——缺乏室温下的拉伸塑性。因此，澄清非晶合金中剪切带的涌现机制，是非晶领域最受关注的一个核心科学问题。

关于剪切带，《力学园地》曾发布过陈艳文章“剪切带的奥秘”[2]。简单地说，剪切带就是介质中剪切变形高度集中的局域化区域。从本质上讲，剪切带本身是一类塑性变形失稳现象。所谓的“塑性变形”和人们熟知的“弹性变形”不同，是一种不可自行恢复的永久性变形，或者说，卸除外力载荷后工程材料及构件仍保留着的残余变形。

现有研究表明[3-5]，非晶合金剪切带的涌现过程耦合了原子尺度剪切、体胀和旋转等基本变形单元之间纷繁复杂的交互、纠缠过程。这三种局域原子运动的相互纠缠，使得对剪切带涌现过程的精细物理图像的认识仍然是固体力学、凝聚态物理以及材料科学领域悬而未决的问题之一。

近期，中科院力学所戴兰宏研究团队在该问题的研究上取得重要进展。他们构建了完整的剪切带涌现物理图像，如图3所示，其中展示了剪切、体胀和旋转等原子运动的演变过程。首先，非晶合金的无序结构导致了硬区和软区的不均匀分布（这里“硬区”指的是原子排列相对紧密的区域，这些区域具有较强的抵抗变形能力；与之形成对比，“软区”则指的是原子排列相对松散的区域，这些区域在外载作用下会率先承担变形）。所以，当受到外部载荷激励时软区便会优先激活，并通过体胀运动承担局部塑性变形。这些区域进一步容纳剪切和旋转事件，形成塑性事件的胚胎。随着变形进一步加剧，这些在软区形成的塑性事件的胚胎诱导相邻的硬区的旋转行为，从而导致旋转和剪切-体胀区在空间上的交替分布，如图3中步骤2（step 2）对应的图像所示。这种剧烈的旋转运动反过来加剧硬区的软化。当软化程度达到临界时，塑性事件相互贯穿，逾渗形成剪切带。

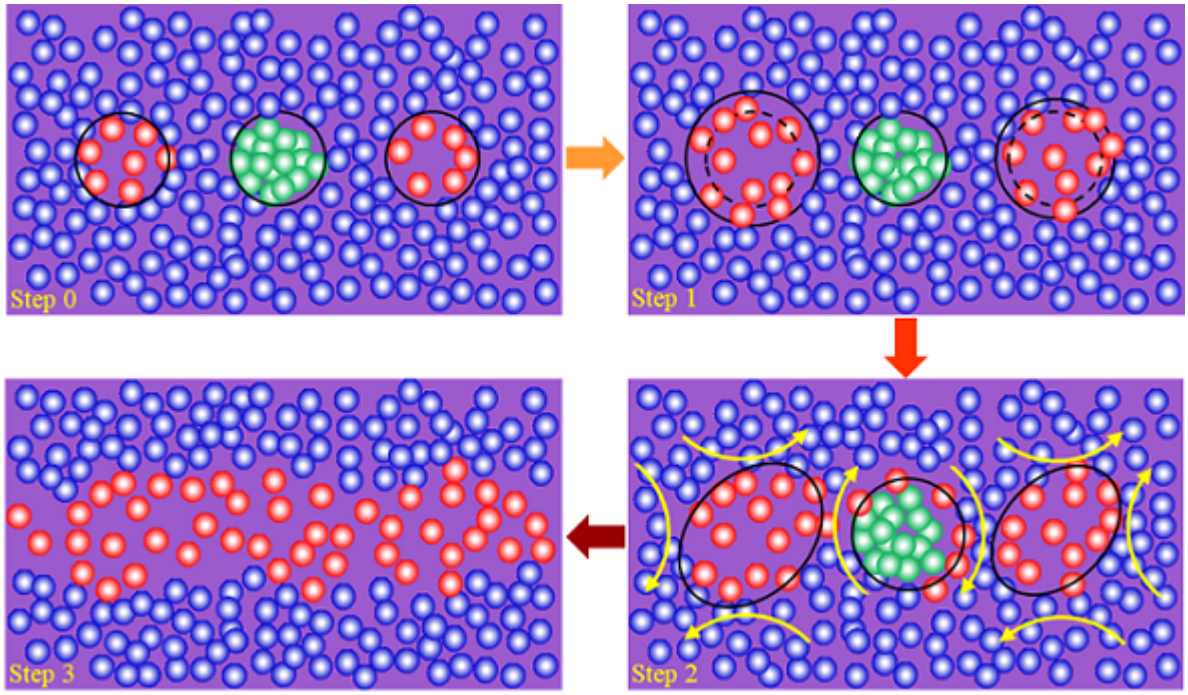

图3 非晶合金剪切带涌现原子尺度演变过程示意图。图中红色圆圈表示排列疏松的原子（软区），绿色圆圈表示排列紧密的原子（硬区），蓝色圆圈表示基体中的原子。步骤2（Step2）中黄色箭头标识原子团簇的位移方向。（图片来源：作者绘制）

为了在原子尺度上定义全新的局部剪切、体胀、旋转事件并给予定量的描述，戴兰宏研究团队提出了一个综合考虑完整仿射和非仿射变形信息的两项梯度模型（Two-term gradient model, TTG模型）。其中“仿射变形”是物体形变的一种特定形式，这时物体内部的体元或微观结构的形变和物体外形的变化是相似的，它可以理解为用于描述变形前后构型之间位置映射的线性形式。而非仿射变形则是完整位移场扣除仿射变形后剩下的部分，即除去线性部分的更高阶的映射形式。相较于传统的纯仿射或非仿射模型，这种前所未有的组合形式可以完整地描述局部变形场。基于TTG模型，团队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事件的解耦，并在原子尺度上定义了全新的局部剪切、体胀、旋转事件的定量描述符。与目前广泛使用的剪切转变区相比，这里的塑性行为可以被表述为更精确的剪切主导区（shear dominated zone, SDZ）、体胀主导区（dilatation dominated zone, DDZ）以及旋转主导区（rotation dominated zone，RDZ）的时空演化过程。如

图4所示，这三个区域与对应的局部化事件在空间上高度重合。这表明定义的定量描述符和三个主导区可以准确地标识局部化剪切、体胀、旋转事件。图4中的参数ξ_R，ξ_D以及ξ_S分别表示用于定量刻画旋转、体胀、剪切事件的物理量，随着ξ_R，ξ_D以及ξ_S值的增大，对应的旋转、体胀、剪切运动变得越剧烈。

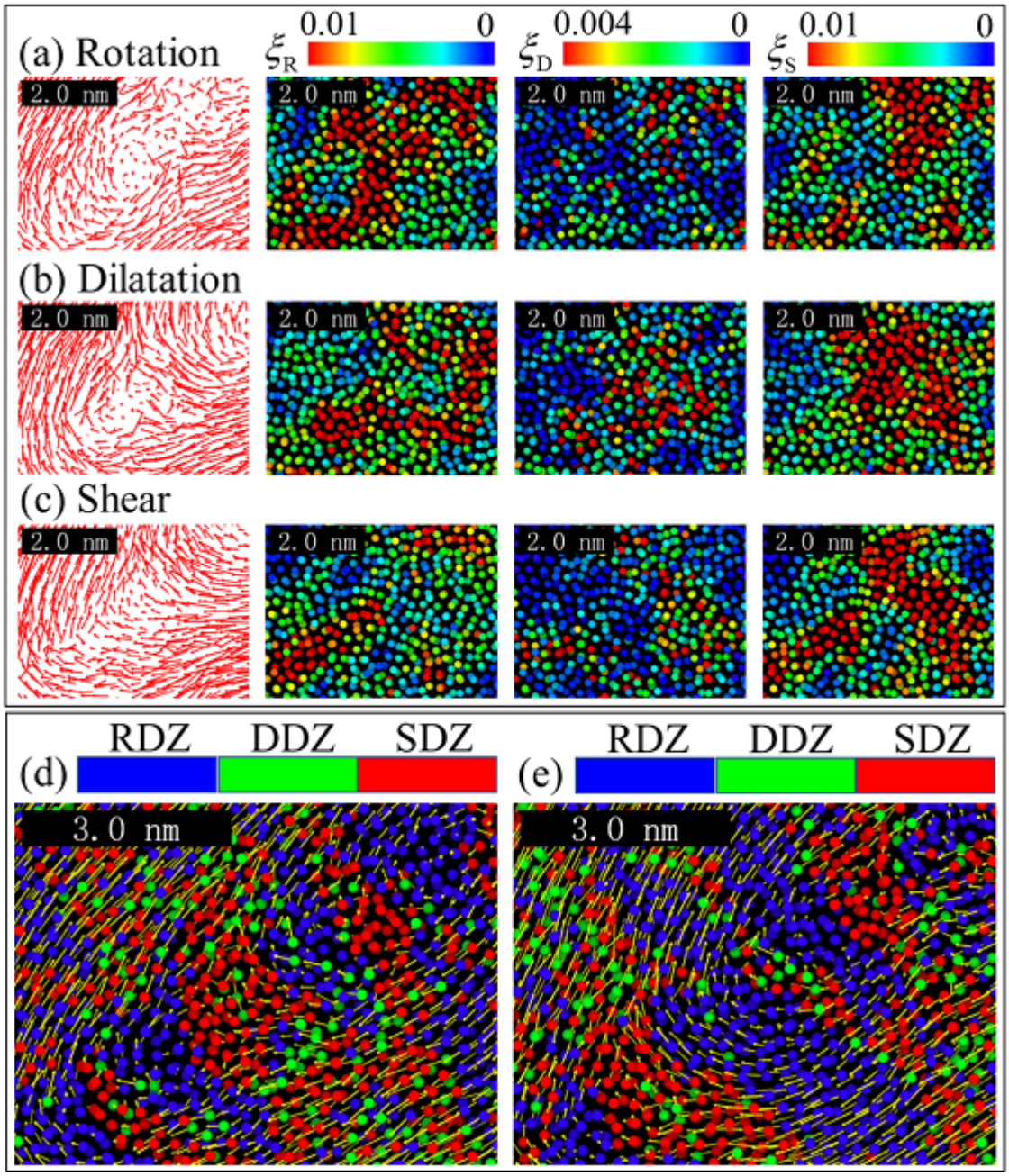

图4 非晶合金剪切带中的旋转、剪切和体胀运动事件

基于这个结果，戴兰宏团队研究人员统计了剪切、体胀、旋转事件的分布情况。如图5所示，三个事件均表现出不均匀的长拖尾分布，尾巴的极值部分对应较强烈的局部剪切、体胀和旋转事件。为了定量捕捉局部剪切、体胀、旋转事件隐藏在拖尾部分的关键信息，团队研究人员提取出与拖尾部分对应的极值点（这里用

ξ_{XR}、ξ_{XD}、ξ_{XS}分别表示旋转、体胀、剪切事件的极值），追踪这些极值点随宏观应变（strain）γ的演化规律。如图5d所示，在变形初始阶段体胀局域化明显强于剪切和旋转局部化，这意味着初始的塑性事件激活过程中，体胀占主导地位。在图5d中，分别采用约化的极值$\xi_{XR}/\langle\xi_R\rangle$、$\xi_{XR}/\langle\xi_R\rangle$以及$\xi_{XR}/\langle\xi_R\rangle$作为相应事件的表征，其中的尖括号表示系统的平均值。

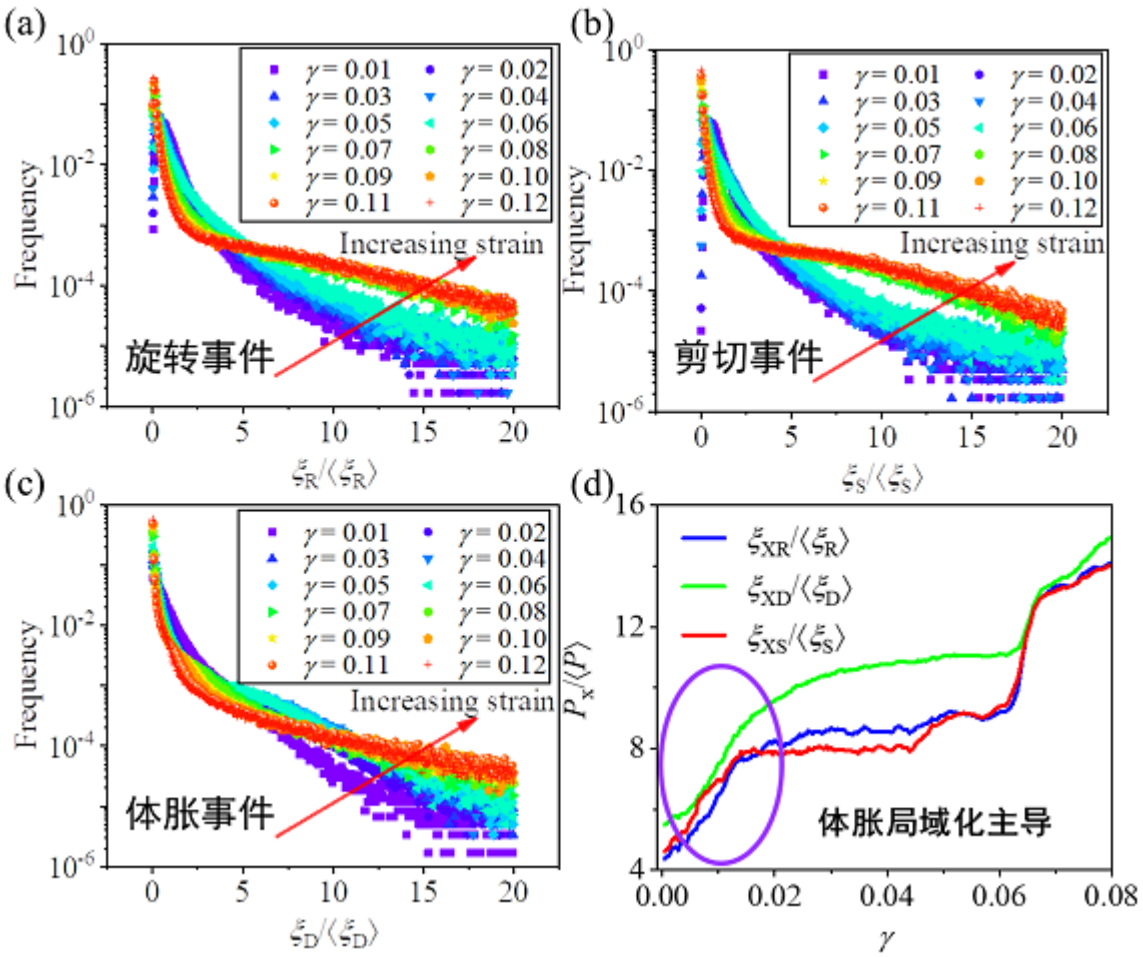

图5 (a)-(c) 不同加载应变下旋转、体胀、剪切事件的统计分布；(d) 旋转、体胀、剪切三种事件随宏观应变的演化规律

团队研究人员进一步剖析了剪切带涌现的原子尺度时空序列。图6a给出了剪切、体胀、旋转事件关联性随加载过程的演化。这里的关联性指剪切、体胀以及旋转事件之间的相关关系，用相关系数（Correlator）定量刻画。若两个事件无关联，相关系数为0；若两个事件同时增强或同时衰减，则相关系数为正；若一个事件增强对应另一个事件衰减，则相关系数为负。相关系数的取值在-1到+1之间，这里绝对值越大意味着对应的关联性越强。有趣的观察现象是：在剪切带涌现前，三个事件发生了从强耦合到旋转与剪切-体胀“失联”（或“破缺”）的突然转变。对应的空间分布信息在图6b-c中给出。他们通过冻结不同时刻的旋转、体胀、剪切运动场，

慢镜头观察上述转变特征。可以看到，在剪切带涌现前，SDZ、DDZ以及RDZ的空间分布经历了从均匀同步激活到非均匀间隔分布的转变过程。这里所谓的“同步激活，一致分布”指的是旋转、剪切、体胀事件在空间上的分布具有较高的重合度。换言之，发生旋转事件的区域同时也会发生剪切、体胀事件。这对应于图6b的物理图像，即、、的分布表现出峰对峰，谷对谷的现象。与之形成对比，所谓的“交替激活，间隔分布”则指的是旋转与剪切-体胀事件表现出的峰对谷，谷对峰的现象。非晶合金剪切带的这种转变与流体运动从层流到湍流的转变有惊人的相似之处。这样就建立了剪切带行为与流体动力学之间的自然联系，为后续建立无序物质流动行为的统一框架提供了证据支撑。

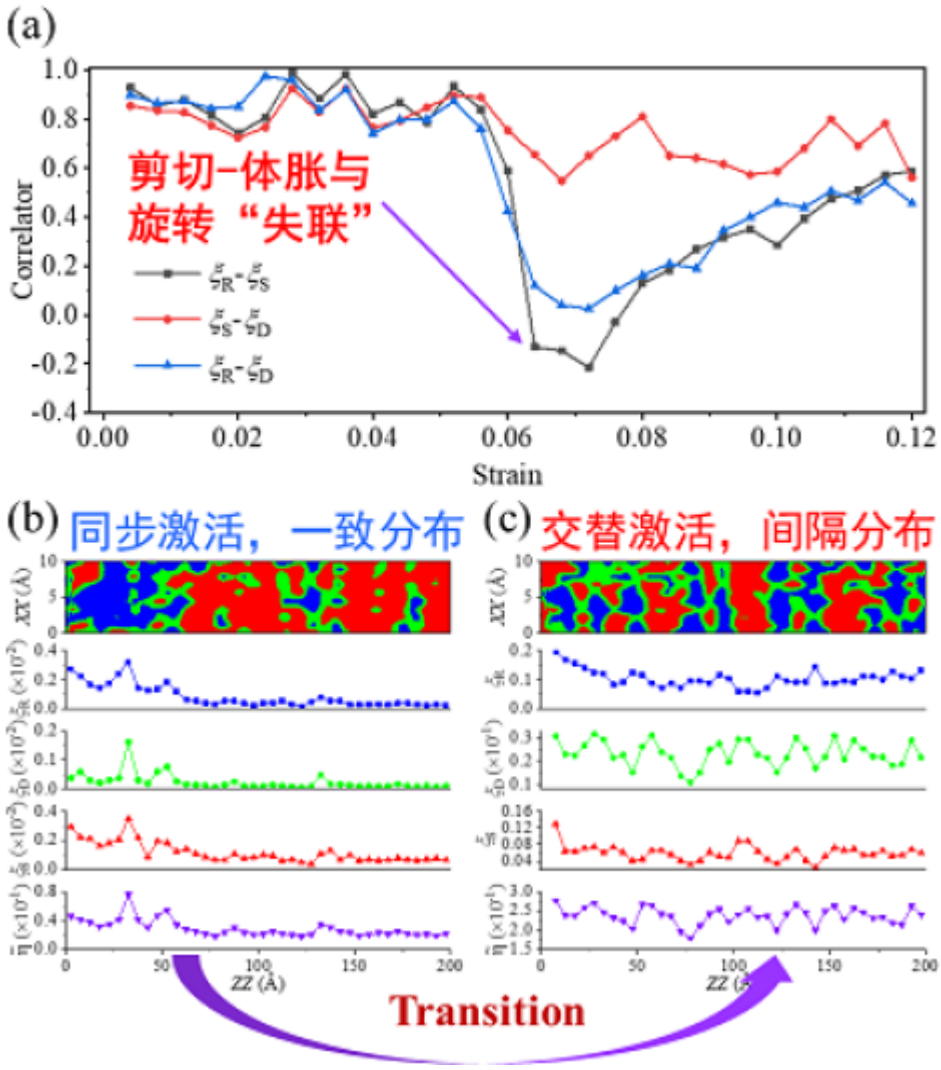

图6 剪切-体胀事件与旋转事件的关联“破缺”（**XX以及ZZ表示空间坐标）**

团队研究人员还进一步捕捉临界转变现象的前后时刻的物理图像，分别如图7a和图7b所示。其中白色气泡标识旋转主导区RDZ的位置，云图背景为剪切转变因子场（红色对应强剪切区域，蓝色表示弱剪切区域）。通过对比可以发现，两个时刻剪切运动场的空间分布（强弱区相对位置）近乎保持不变，较明显的差异在于相邻强剪切区中间区域的旋转事件的增强，或者说是对应白色气泡数量和大小的增多。从而表明，造成这一现象的原因是局部剪切、体胀事件周围区域的旋转二次增强。

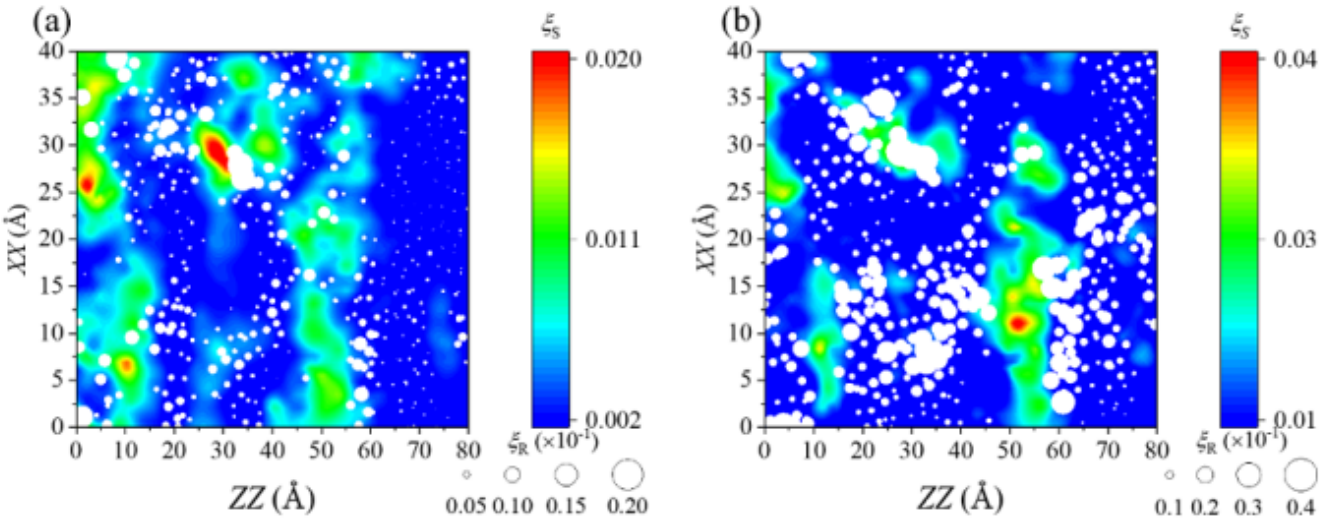

图7 剪切带涌现前出现原子旋转团簇运动（RDZ）显著增强

该项研究成果近期以“Hidden spatiotemporal sequence in transition to shear band in amorphous solids” [6]为题，发表在国际学术刊物Physical Review Research上。这里应当指出的是，同年戴兰宏研究团队在国际学术刊物Physical Review Materials 还发表了另一篇关于非晶合金的研究成果“Towards commonality between shear banding and glass-liquid transition in metallic glasses”[7]。他们基于分子动力学模拟，发现了剪切带涌现与玻璃-液体转变过程存在着惊奇的相似性：它们不仅有着相似的结构起源，而且还有着类似的动力学、能量状态等演化过程。这些结果揭示了外力刺激和热效应在改变非晶合金物理性质方面展现出了相似的作用。研究团队所发现的剪切带与玻璃-液体转变的一致性为在统一框架下研究非晶合金剪切带涌现与玻璃化转变打开了一扇新的窗户。

参考文献

[1] 汪卫华, 非晶态物质的本质和特性. 物理学进展, 33, 5, 2013.

[2] 陈艳, 剪切带的奥秘. 力学园地（2022.3.21发布）. 全文链接 http://www.imech.ac.cn/ztbd/lxyd2/xxzc/202203/t20220321_6401500.html (http://www.imech.ac.cn/ztbd/lxyd2/xxzc/202203/t20220321_6401500.html)

[3] V. Schmidt, H. R？sner, M. Peterlechner, G. Wilde, and P. M. Voyles, Quantitative Measurement of Density in a Shear Band of Metallic Glass Monitored Along its Propagation Direction, Phys. Rev. Lett. 115, 035501, 2015.

[4] C. E. Maloney and A. Lema？tre, Amorphous systems in athermal, quasistatic shear, Phys. Rev. E. 74, 016118, 2006.

[5] M. Hassani, A. E. Lagogianni, and F. Varnik, Probing the Degree of Heterogeneity within a Shear Band of a Model Glass, Phys. Rev. Lett. 123, 195502, 2019.

[6] Zeng-Yu Yang, Yun-Jiang Wang, and Lan-Hong Dai, Hidden spatiotemporal sequence in transition to shear band in amorphous solids, Phys. Rev. Res. 4, 023220, 2022.

[7] Zeng-Yu Yang and Lan-Hong Dai, Towards commonality between shear banding and glass-liquid transition in metallic glasses, Phys. Rev. Materials. 6, L100602, 2022.

中国科学院 CHINESE ACADEMY OF SCIENCES (http://www.cas.cn)
中国科学院力学研究所 版权所有 京ICP备05002803号 京公网安备110402500049
地址：北京市北四环西路15号 邮编：100190
(http://bszs.conac.cn/sitename?method=show&id=081D2D6355AD574EE053022819ACCBA7)