

专题: 无序合金的序调控

软硬相序构金属玻璃中的剪切带行为*

王寿成 潘强强 宁睿 彭海龙†

(中南大学材料科学与工程学院, 粉末冶金全国重点实验室, 长沙 410083)

(2025年6月27日收到; 2025年8月16日收到修改稿)

金属玻璃 (MGs) 的剪切带行为与其微观结构不均匀性密切相关. 传统分子动力学 (MD) 模拟因超快冷却速率导致 MGs 结构保留了更多液体特征, 而交换原子的蒙特卡罗 (SMC) 方法能够在模拟上制备出可匹配实验室时间冷却速度的低能态金属玻璃. 本文通过 SMC 结合 MD 方法, 构建软硬相分布可控的 $\text{Cu}_{50}\text{Zr}_{50}$ 金属玻璃样品, 揭示纳米尺度结构不均匀性对剪切带萌生与扩展的调控机制. 由 MD 制备的软相中二十面体有序团簇含量较少, 优先激活塑性事件, 促进应力重新分布, 与邻近硬相一起响应对剪切带扩展起协同作用. MC 制备的硬相区由于其高密度的二十面体团簇的含量, 使得应力局域集中, 形成窄剪切带. 通过调控硬相体积分, 复合样品发生由韧到脆转变. 此外, 在保持硬相百分比不变的前提下, 不同序构策略可以改变非晶的力学行为: 离散硬相的分布能够增加样品的稳定性, 推迟剪切带的产生; 硬相包围软相的策略能够促进样品中产生二次剪切带, 使得剪切带区域相对非局域化. 该研究结果揭示了软硬区结构不均匀性对非晶合金力学性能的影响, 为采用序构方法设计金属玻璃力学性能提供了可能的理论指导.

关键词: 金属玻璃, 序调控, 分子动力学模拟, 剪切带**PACS:** 61.43.Dq, 64.70.pe, 81.05.Kf**DOI:** 10.7498/aps.74.20250845**CSTR:** 32037.14.aps.74.20250845

1 引言

金属玻璃 (metallic glasses, MGs) 是由原子无序排列构成的一种非晶材料, 一般通过快速冷却技术制备得到, 展现出高强度和高弹性极限等优越力学性能. 相对于其他非晶态体系, 如聚合物玻璃、陶瓷玻璃、高分子等, 金属玻璃构成物相对简单, 是凝聚态物理与材料科学的研究焦点之一^[1-4]. 然而, 其室温脆性和由剪切带引发的灾难性断裂行为严重制约了实际应用, 也是由于原子结构的无序性, 微观结构与塑性事件以及它们与宏观力学响应之间的关系极为复杂^[5]. 剪切带的萌生位置和扩展方式难以从微观结构上预先识别, 这种不可控性成为调整其塑性的关键制约因素. 通常认为, 剪切带是

由局域剪切转变区 (shear transformation zones, STZs) 在外力作用下激发、扩展并相互连接而成. STZ 作为塑性变形的载体, 通常由数十至上百个原子协同重排响应外部应力形成^[6-9]. 传统观点认为, STZs 的激活与玻璃中保留的“类液区 (liquid-like regions)”密切相关^[10]. 因此, MGs 也可以被看作是由固体的弹性基底和类似液体的流动缺陷组成^[11-13], 而剪切转变事件发生的区域被认为起源于松散排列的原子区域, 这些区域可以被认为是“缺陷”. 准确识别这类缺陷是建立 MGs 结构-性质关系的关键. Lu 等^[14]采用机器学习方法比较了不同动力学和结构参数指标对塑性事件的预测能力, 发现粗粒化局域振动熵能够有效预测塑性事件.

现有 MD 模拟由于其超快冷却速率 (通常 $\geq 10^9$ K/s) 远超实验条件 (10^0 — 10^3 K/s), 导致模

* 湖南省教育厅科学研究重点项目 (批准号: 24A0007) 和国家自然科学基金 (批准号: 52371168) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: hailong.peng@csu.edu.cn

拟制备的 MGs 保留更多金属熔体的结构特点. MD 模拟的金属玻璃的剪切模量也远低于实验室制备的相应 MGs 的剪切模量, 强度较低, 材料较软, 能够激活更多的 STZs, 具有较高“类液区”含量^[15-20]. 另一方面, 研究者引入蒙特卡罗 (Monte Carlo, MC) 算法提升结构弛豫效率^[21]. Berthier 团队就通过交换蒙特卡罗 (swap Monte Carlo, SMC) 方法成功制备出接近实验玻璃转变温度 (T_g) 的高稳态 MGs^[22-25]. Zhang 等^[26] 和 Yu 等^[27] 也通过 MD 和 SMC 模拟相结合的方法, 制备出低冷却速率的 MGs, 发现随着冷却速率的降低, 玻璃变得越来越硬, STZs 难以激活, 响应外部载荷的 STZ 数量远少于之前在 MD 模拟中观察到的数量, 也就是有利于剪切转变的“类液区”变少了. 这两种方法制备的金属玻璃因不同冷却速率引起结构状态显著不同, 表现出迥异的力学响应. 然而, 关于金属玻璃中“类液区”的空间分布变化如何调控 STZs 的分布、演变乃至剪切带的产生, 仍缺乏系统的认知.

鉴于金属玻璃的剪切带行为受微观结构特征影响, 而常用计算机模拟难以获得具有较大结构不均匀的金属玻璃样品, 本文采用 SMC 方法制备具有与实验冷却速度相匹配的原子密排硬区, 并复合传统分子动力学方法制备的具有极快冷却速度的“类液区”, 从而得到结构不均匀的金属玻璃. 金属玻璃的纳米尺度结构不均匀性已在实验上被广泛证实, 并发现这种特性对金属玻璃的性能产生较大影响^[28]. 本文采用 MD/SMC 方法制备序构金属玻璃样品, 研究序构这种微观结构不均匀性对金属玻璃强度及剪切带行为的影响.

2 模拟方法

采用经典分子动力学模拟方法制备 $\text{Cu}_{50}\text{Zr}_{50}$ 金属玻璃样品. 模拟采用嵌入式原子法 (embedded atom method, EAM)^[29] 构建的原子相互作用势. 模拟体系为一个立方盒子, 包含 40000 个原子 (20003 个 Cu 原子, 19997 个 Zr 原子), 该盒子在三个维度方向上的长度均约为 89 Å. 初始构型中原子随机分布在立方盒子中, 温度为 2000 K, 并充分弛豫. 随后, 采用 2 fs 为一个模拟时间步长将熔体在 200 ps 内冷却至 1200 K. 为模拟极低能态的硬相金属玻璃, 采用混合分子动力学与蒙特卡罗模拟方法 (MD/MC), 在 9.3×10^7 时间步长内进一步

将熔体从 1200 K 冷却至 200 K. 冷却过程中每 10 步分子动力学模拟, 采用一次方差约束的半正则 (variance constrained semi-grand canonical, VC-SGC) 系综进行交换蒙特卡罗模拟^[30]. 选定方差约束参数 κ 为 2000, 以确保合金中 Cu 和 Zr 的原子数比为 1:1. 已有研究证明, 混合 MD/MC 模拟在冷却速率上与实验相当, 能有效实现系统的缓慢冷却^[21,26,27]. 该工作中得到的低温稳态样品能量状态相当于冷却速度为 10^4 K/s 时得到的模拟样品. 为得到软硬相复合的金属玻璃样品, 将制备的极低能态样品冻结住一部分 (该部分遗留在样品中作为硬相), 然后在 1500 K 熔化未冻结部分. 随后将熔化部分以 10^{13} K/s 的速率冷却至 200 K. 在冷却过程中, 采用 NPT 系综来调整模拟盒子尺寸, 使三个维度方向的压力维持在零附近. 该快速冷却的部分具有较高能态, 为样品中“类液体”的软相. 最后, 将冻结区域解冻, 得到力学形变用软硬相序构金属玻璃样品.

制备了不同百分比和几何构型的软硬相序构金属玻璃, 如图 1(a) 插图所示. 硬相区域位于样品中心, 呈球形, 其原子百分比含量 $c = N_{\text{Hard}}/N_{\text{Total}}$ (其中, N_{Hard} 为硬相原子数, N_{Total} 为总原子数). c 取值为 50%, 60%, 70%, 80%, 90%. 该组样品命名为 Group 1. 为研究硬相几何形状分布对力学性能的影响, 在保持 c 不变化的情况下, 将中心的一个硬区分成 8 个等大小的球形硬区 (图 1(b) 插图), 该组样品命名为 Group 2. 此外, 还可以将软硬区的位置对调, 得到另外两种方式构建的金属玻璃样品, 如图 1(c) 和图 1(d) 插图所示, 这两组样品分别命名为 Group 3 和 Group 4.

最后, 对序构的金属玻璃样品进行无热准静态剪切 (athermal quasistatic shear, AQS) 形变^[31]. 具体为: 每一步在 x 方向实施一个沿 y 方向具有梯度分布的小应变变量 $\Delta\gamma = 1 \times 10^{-4}$, 随后通过能量最小化使构型弛豫到局域能量最低点, 重复循环上述步骤, 直至达到设置的剪切总变形量 $\gamma = 0.4$. 所有模拟都是在 LAMMPS 软件包中完成^[32].

3 结果与讨论

金属玻璃对剪切载荷的宏观力学响应通过图 1 的应力-应变 (σ - γ) 曲线展示. 不同硬相含量 c 的 MGs 在应变较小阶段 ($\gamma \lesssim 0.1$), 均表现出线

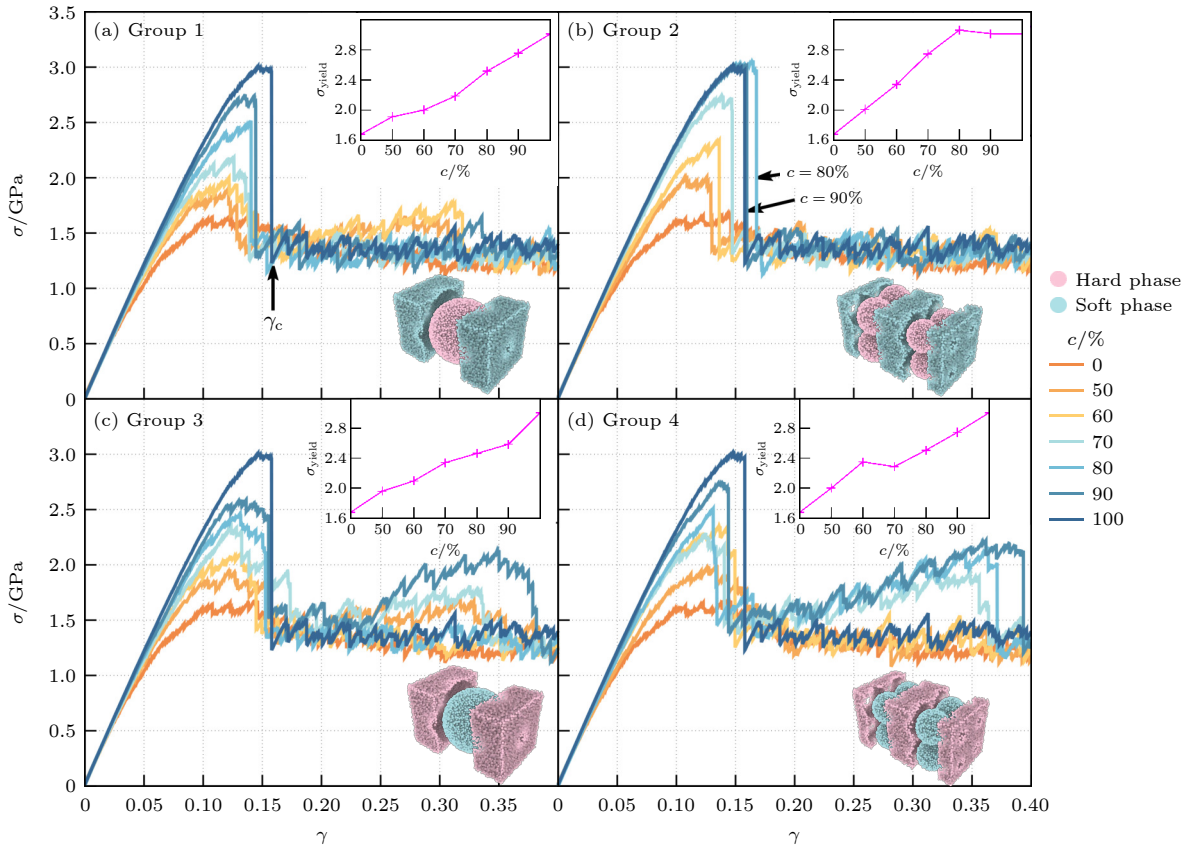


图 1 不同软硬区序构 $\text{Cu}_{50}\text{Zr}_{50}$ MGs 的应力-应变曲线, 插图是屈服应力随 c 的变化 (a) 硬区位于样品中间的一个球形区域; (b) 硬区位于样品中心 8 个分开的球形区域; (c) 软区位于样品中间的一个球形区域; (d) 软区位于样品中心 8 个分开的球形区域

Fig. 1. Stress-strain curves of the soft-hard regions ordered $\text{Cu}_{50}\text{Zr}_{50}$ MGs, with the inset showing the c -dependent yield stress: (a) The hard region locating at the center as a spherical shape; (b) the hard region locating at the center as eight spherical zones; (c) the soft region locating at the center as a spherical shape; (d) the soft region locating at the center as eight spherical zones.

性弹性响应, 硬相含量较高的合金在屈服前表现出更大的弹性响应范围, 且剪切模量 (应力-应变曲线斜率) 更高. 当应变增大时, 合金发生了屈服, 随后应力出现急剧下降. 该应力的急剧下降一般认为是由剪切带的产生导致的, 该点定义为剪切带产生的临界应变 γ_c . 当应力进一步增加时 ($\gamma \gtrsim 0.16$), 应力基本保持不变, 样品进入流变阶段. 从临界应变处的最大应力到流变应力, 存在一个落差, 该现象称为应力过冲 (stress overshoot). 应力过冲越大的样品, 意味着样品内部发生局域化的滑移越大, 样品越脆, 通常此时伴随着剪切带的产生 [33,34]. 反之, 应力过冲越小则样品越韧. 因此, 应力过冲度可以作为衡量样品韧脆性的一个重要指标.

随着硬区的百分比 c 增加, 4 组样品的应力过冲都由小变大, 即样品都发生了由韧到脆的转变, 并且屈服应力 σ_{yield} 单调增大 (图 1 插图). 在 Group 1, Group 3 和 Group 4 样品中, 应力过冲度和临界屈服应变 (γ_c) 都随着 c 的增加而单调增加. 这可以

理解为硬区的增加导致样品变得越来越脆, 以及越来越强, 与金属玻璃中随机钉扎能提高样品强度和脆性类似 [35,36]. 然而, 在 Group 2 样品组中, 应力过冲度和临界屈服应变的最大值出现在 $c = 80\%$ 样品中. 这说明硬相的离散化有助于维持合金的力学稳定性, 推迟剪切带的产生. 这种临界应力随 c 的非单调行为与微量合金化中非单调的韧脆转变行为类似 [37], 说明离散序构的硬相能得到与连续分布硬相不一样的对金属玻璃的稳定效果.

另一个有意思的现象是 Group 3 和 Group 4 样品组在流变区应力发生了再次上升的现象 (图 1(c) 和图 1(d)). 一般情况下, 金属玻璃屈服后流变发生在剪切带的平面带状区域, 而剪切带以外仍然保持刚性难以塑性形变状态, 因此样品处于稳定的流变区. 流变区应力的再次上升现象表明, Group 3 和 Group 4 样品组的流变机制可能不一样, 后面的研究表明这是由二次剪切带产生导致的. 这种不同的流变机制与软硬区的贯穿状态不一样有关. 具体来

讲, Group 1 和 Group 2 硬区处于中间, 软区处于贯穿状态, 包围硬区; 与之相比, Group 3 和 Group 4 软区处于中间, 硬区处于贯穿状态, 包围软区. 不同的贯通状态导致了流变行为的不同, 后面会具体分析该行为.

为了探究局域结构对 MGs 的力学性能的影响, 研究采用 Voronoi 多面体分析的方法分析了不同 c 浓度下 4 组序构样品在剪切形变前的局域有序结构. 图 2 给出了在众多 Voronoi 多面体中, 占据主导地位的 $\langle 0, 0, 12, 0 \rangle$ 的团簇含量变化和局域五次对称性 (FFLS) 比例分布. 局域五次对称性参数是指原子空间密排的 Voronoi 多面体中五边形面所占的比例. 原子 i 的局域五次对称性参数计算方法为 $f_i^5 = n_i^5 / \sum_{k=3,4,5,6} n_i^k$ [38], n_i^k 是原子 i 的 Voronoi 多面体中 k 边形的数量. 金属玻璃的五次对称性的含量与其强度有正相关性. $\langle 0, 0, 12, 0 \rangle$ 和 FFLS 演化趋势类似, 即 $\langle 0, 0, 12, 0 \rangle$ 和 FFLS 的含量都随着 c 的提高而增加, 表明能量极低态的硬区样品具有更多的稳定的二十面体团簇. 二十面体团簇具有较高的抵御塑性变形的能力, 能阻碍剪切流变区的扩展 [39]. 这从结构上解释了图 1 中观察到的屈服应力随着 c 的增加而增加的结果.

虽然这 4 组样品的力学行为具有明显差异, 尤其是在稳定流变区是否出现应力的异常升高行为, 但它们的二十面体团簇和 FFLS 的含量在同一浓度下没有很大的差异. Group 1, Group 2 和 Group 3 的曲线基本重合 (图 2(a) 和图 2(b)); Group 2 的曲线略高于其他 3 条曲线, 其二十面体团簇含量或者 FFLS 值在 $c = 70\%$ 基本已经达到平台值, 表明该组样品局域结构在 $c \geq 70\%$ 时就不存在明显差异. 这与该组样品在 $c \geq 70\%$ 时观察到的最大应力都相吻合 (图 1(b)). 为进一步证实这 4 组样品在同一硬区浓度下不存在明显的结构差异, 图 2(c) 给出了 FFLS 局域结构的分布情况. 可以看出, 随着 c 的增加, 低五次对称性结构 (即 $\text{FFLS} \leq 0.5$) 单调减少, 而高五次对称性结构 (即 $\text{FFLS} > 0.5$) 单调增加. 然而, 在同样的浓度 c 下, 不同组样品的结构分布情况并没有明显差异. 因此, 图 1 中观察到的不同流变行为, 无法从结构的统计平均差异来解释, 而是和软硬相的空间分布构型有关.

原子的非仿射位移量是用来表征金属玻璃原子尺度不可逆运动对外部载荷响应的重要参数, 它用来探究塑性事件以及剪切带的产生. 原子尺度非仿射位移量 D^2 定义如 (1) 式所示, 其核心思路

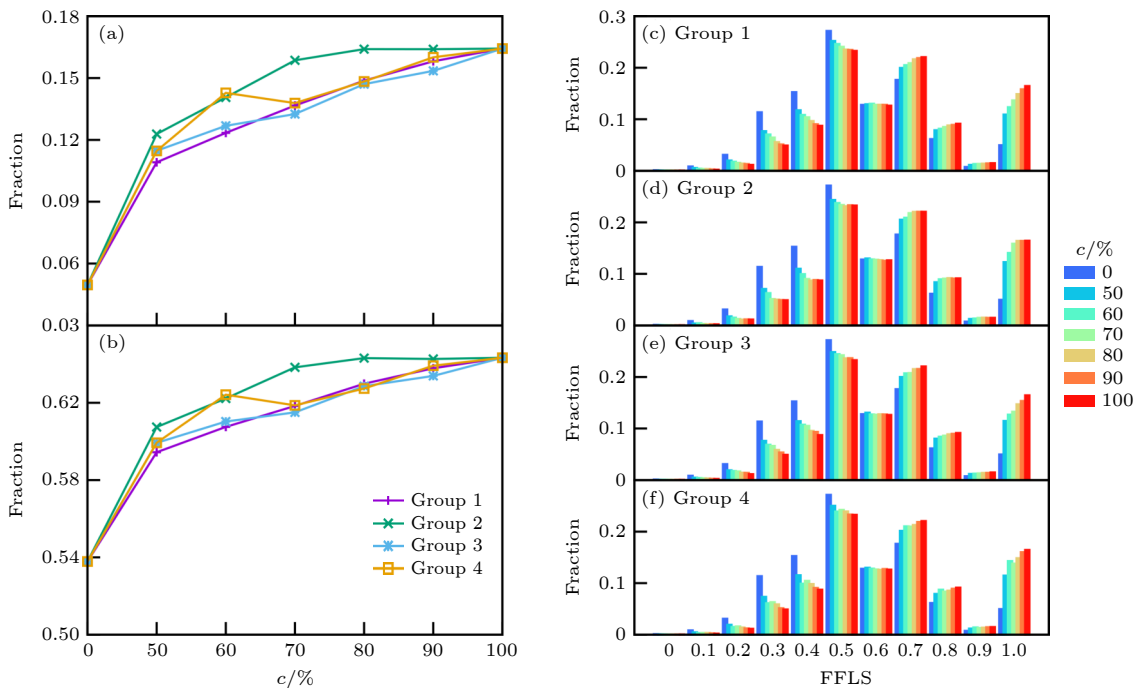


图 2 4 组序构 $\text{Cu}_{50}\text{Zr}_{50}$ 金属玻璃中 $\langle 0, 0, 12, 0 \rangle$ 和局域五次对称性参数 (FFLS) 随硬相含量 c 的变化 (a) $\langle 0, 0, 12, 0 \rangle$ 含量; (b) FFLS 含量; (c)–(f) FFLS 分布

Fig. 2. Evolution of $\langle 0, 0, 12, 0 \rangle$ and the FFLS parameters with c in the ordered $\text{Cu}_{50}\text{Zr}_{50}$ MGs: (a) $\langle 0, 0, 12, 0 \rangle$ clusters; (b) the FFLS parameters; (c)–(f) the FFLS distribution.

是通过比较近邻原子相对于中心原子的实际位移与仿射位移的差来量化局部塑性变形. 对于 i 原子其非仿射位移量可以表示为^[34]

$$D_i^2(\gamma) = \frac{1}{M} \sum_j [\mathbf{r}_{ij}(\gamma + \delta\gamma) - (\epsilon + \delta_{ij})\mathbf{r}_{ij}(\gamma)]^2, \quad (1)$$

其中, ϵ 是局域最小非仿射应变张量; δ_{ij} 是克罗内克函数, 这里用来作为变形前的参考状态; \mathbf{r}_{ij} 是原子 i 到原子 j 的距离向量, 其中 j 是 i 的最近邻原子, 最近邻原子定义为在中心原子截断距离 3.8 Å (该值为径向分布函数第一低谷的距离) 以内的原子; M 为最近邻原子个数. 对非仿射位移做最近邻原子个数的归一化有利于消除原子配位数不一样 (如不同元素种类导致) 的影响. 应变增量 $\delta\gamma$ 取值为 0.1%, 满足计算精度的要求. 由此可知, 该非仿射位移的定义表征的是相应 γ 下原子瞬时塑性形变量的大小.

非仿射形变量可以研究剪切带产生前后塑性形变事件的空间演变. 图 3 给出了无序构样品在临界应变 γ_c 附近, 沿 z 方向平均的原子非仿射位移量和样品在 x - y 面上的二十面体团簇分布. 在完全软

区构成的样品中, 剪切带产生前 (图 3(a)), 非仿射位移具有空间不均匀性和随机性的特征; 剪切带产生后 (图 3(b)), 非仿射形变量大的区域在 y 方向连通, 并贯穿整个样品, 但在剪切带之外, 依旧存在非仿射形变较大的原子. 该样品中二十面体分布随机而均匀 (图 3(c)). 与之差别较大的是, 在完全硬区构成的样品中, 剪切带产生前非仿射形变值相对小很多 (图 3(d)), 即塑性形变事件稀少且非常均匀; 剪切带产生后非仿射形变量大的区域沿 x 方向贯穿整个样品 (图 3(e)), 但在剪切带范围之外, 只有极少区域的原子发生了较大的非仿射形变. 这意味着完全由硬区构成的样品虽然具有更强的力学稳定能力, 但剪切带一旦开始产生, 其塑性形变变得更加局域化. 该样品的局域结构团簇分析表明, 二十面体团簇更多, 分布很均匀, 几乎在每个原子距离的周围都有较多的二十面体团簇 (图 3(f)). 此时, 由于没有低二十面体含量的软区来耗散能量, 二十面体团簇对塑性事件的阻碍能力将减弱, 使得样品硬而脆.

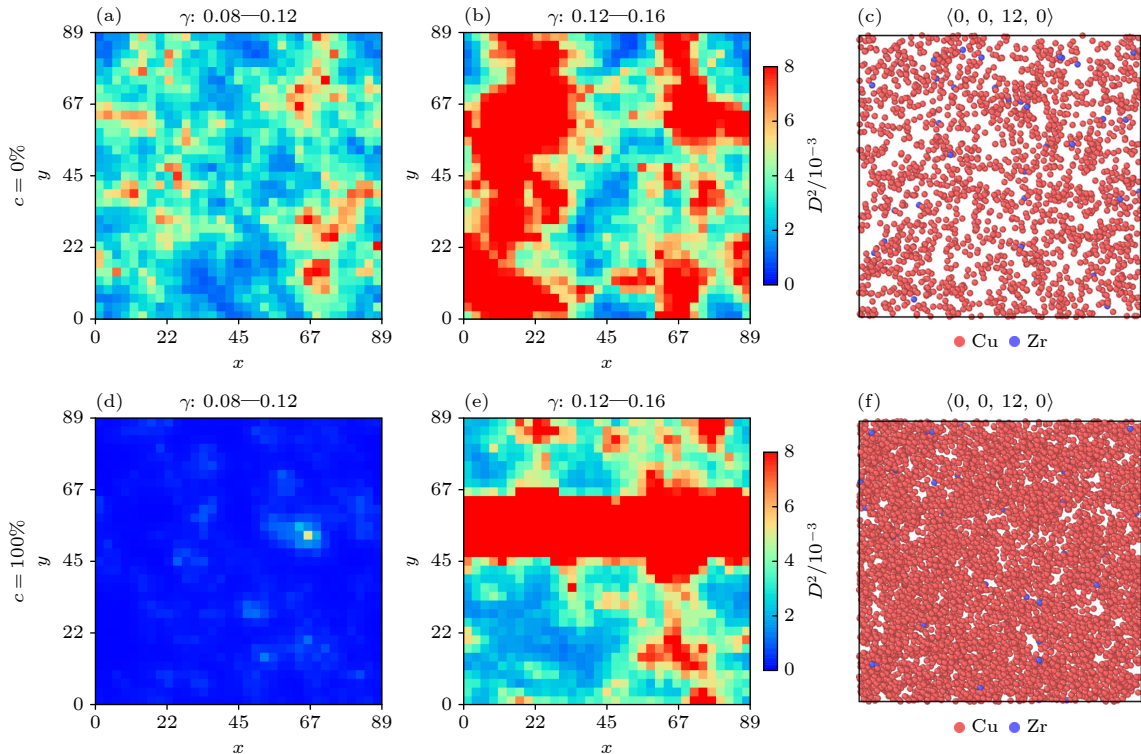


图 3 沿 z 方向平均的原子非仿射位移量及 x - y 平面上二十面体团簇空间分布 (a)–(c) $c = 0\%$ 样品, 其中 (a) 为临界应变 γ_c 前非仿射形变量图, (b) 为临界应变 γ_c 后非仿射形变量图, (c) 为二十面体团簇的分布; (d)–(f) $c = 100\%$ 样品, 其中 (d) 为临界应变 γ_c 前非仿射形变量图, (e) 为临界应变 γ_c 后非仿射形变量图, (f) 为二十面体团簇的分布

Fig. 3. Spatial distribution of the non-affine displacement field and icosahedral clusters: (a), (b) D^2 distribution before and after the critical strain at $c = 0\%$, respectively; (d), (e) D^2 distribution before and after the critical strain at $c = 100\%$, respectively; (c), (f) the icosahedral cluster distribution at $c = 0\%$ and $c = 100\%$, respectively.

为研究序构对剪切带产生行为的影响, 图 4 给出了 4 组序构样品 (c 均为 90%) 在临界应变 γ_c 附近原子的非仿射位移分布. 可以看出, 在临界应变之前, 各组样品中软区所在的位置首先激活塑性事件, 而硬相区所在位置非仿射位移较小 (图 4(a), 图 4(c), 图 4(e) 和图 4(g)). 这说明塑性事件起源于二十面体团簇密度低的区域, 也就是原子排列松散的位点. 到达临界应变之后, 由软区起源的塑性变形区开始扩展, 相互连接贯穿整个样品形成剪切带 (图 4(b), 图 4(d), 图 4(f) 和图 4(h)). 从图中可以看出, 剪切带形成的位置明显和软区的分布有关. 当软区在模拟盒子边缘时, 剪切带沿着盒子边缘形成; 同样, 软区在模拟盒子中间时, 剪切带在盒子中间形成. 对比图 4(d) 和图 4(b), 或者图 4(h) 和图 4(f), 可以发现软区的分布对剪切带的局域化有较大影响, 即软区集中分布样品中塑性形变更集中, 而软区离散分布样品中的局域化程度较低.

序构样品表现出一个异常的在流变区应力上升的现象 (图 1(c) 和图 1(d)). 为研究该现象, 图 5 给出了出现应力异常上升的 Group 3 和 Group 4 中 $c = 90\%$ 的样品在第二次应力过冲应变范围 ($\gamma = 0.336 - 0.376$) 内非仿射位移的二维分布图.

可以看到, Group 3 中剪切带最开始沿着 y 方向形成. 随着应变的继续增大, y 方向的特征慢慢消失, 出现沿 x 方向扩展的趋势 (图 5(c)), 最终形成 x 方向的剪切带. 据研究者所知, 这个第二次出现剪切带的现象, 在计算模拟中还未有过报道. 该现象表明, 虽然沿着 y 方向的剪切带最先产生, 但它在该序构的样品中可能不是稳定的. 在更大应变加载下, 初始剪切带逐渐不再具有高非仿射位移, 应力出现再次上升现象 (图 1(c)). 这可能是由于 Group 3 的样品是硬区包裹软区的构型, 外围的硬区阻碍了初始剪切带的扩展. 图 1 表明, 该应力在流变区异常上升的现象只发生在 Group 3 和 Group 4, 且在 c 值较大的样品中. 这证实了外围硬区的阻碍作用是产生二次剪切带根本原因的推测.

该推测也在 Group 4 样品中得到了证实. Group 4 样品的中心区域有 8 个软区. 初始塑性变形区通过将右侧 4 个软区连通而形成贯穿整个体系的剪切带 (图 5(e)). 随着应变增加, 该纵向的剪切带逐渐消失, 而上侧 4 个软区开始连接, 形成一条新的剪切带 (图 5(f)–(h)). 和 Group 3 样品组对比, Group 4 样品组内的硬区形成更加复杂的网络状, 包裹着中心的 8 个软区. 因此, 硬区对初始

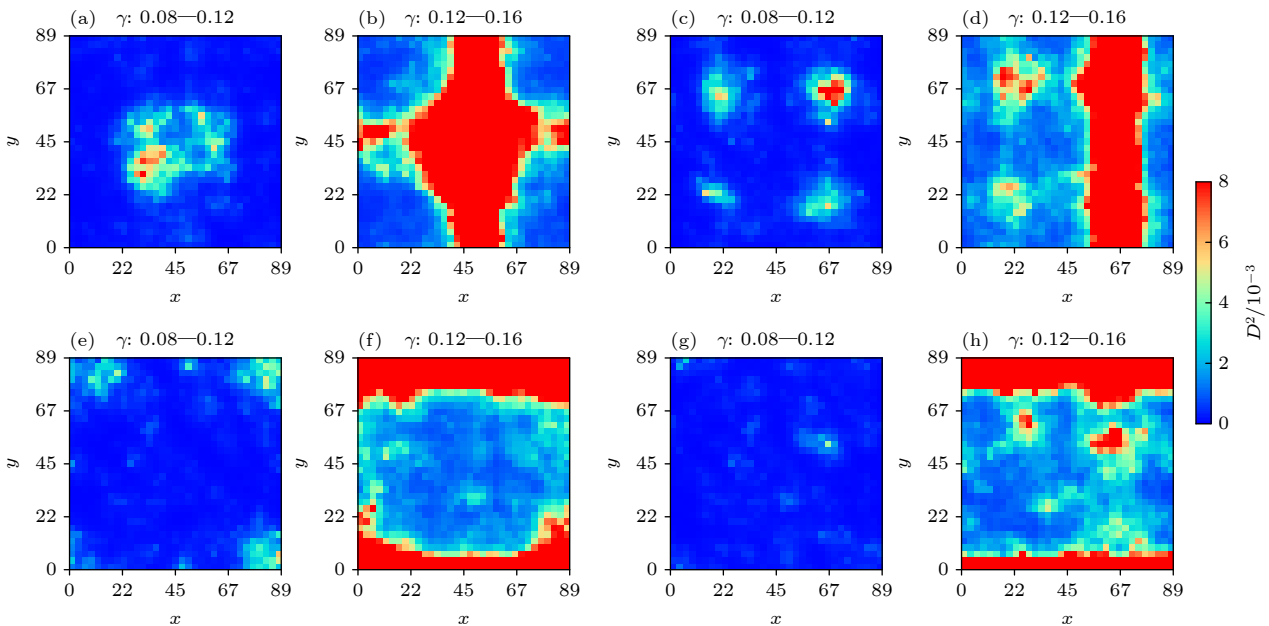


图 4 4 组序构样品 (c 均为 90%) 在临界应变前后非仿射位移量的分布情况 (a), (b) Group 1 临界应变前后; (c), (d) Group 2 临界应变前后; (e), (f) Group 3 临界应变前后; (g), (h) Group 4 临界应变前后分布情况

Fig. 4. The two-dimensional D^2 distribution of the ordered MGs with $c = 90\%$: (a), (b) Distribution before and after γ_c in Group 1; (c), (d) distribution before and after γ_c in Group 2; (e), (f) distribution before and after γ_c in Group 3; (g), (h) distribution before and after γ_c in Group 4.

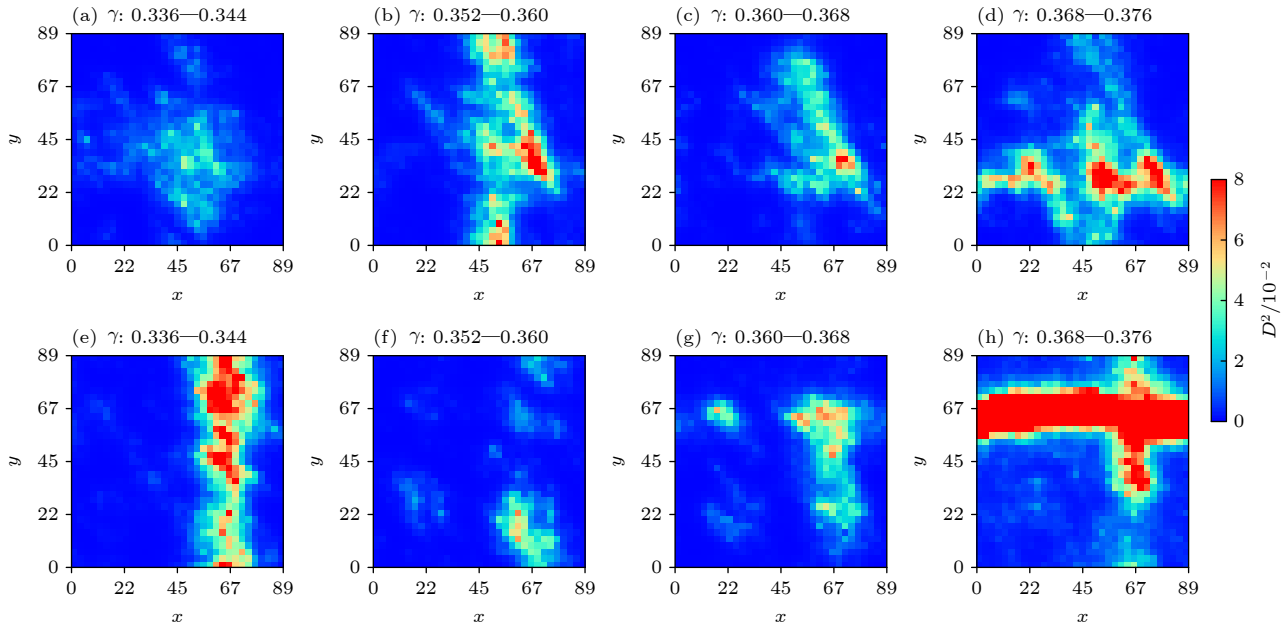


图 5 硬区浓度为 90% 样品二次剪切带产生过程中非仿射位移的空间分布情况 (a)–(d) Group 3 样品中应变分别为 0.336, 0.352, 0.360 和 0.368 时的非仿射形变场; (e)–(h) Group 4 样品中应变分别为 0.336, 0.352, 0.360 和 0.368 时的非仿射形变场
Fig. 5. The two-dimensional D^2 distribution of MGs samples with $c = 90\%$ in the strain range of the secondary shear band: (a)–(d) Strain at 0.336, 0.352, 0.360, and 0.368 for Group 3 samples; (e)–(h) strain at 0.336, 0.352, 0.360, and 0.368 for Group 4 samples.

剪切带扩展的约束更加明显, 使得二次剪切带的产生更加容易. 这点可以从 Group 4 样品的相关结果中得到证实, Group 4 样品应力-应变曲线上应力异常上升现象更加明显, 出现的应变值范围更小 (图 1(d)). 当软相包裹硬相时, 硬相依然能阻碍剪切带扩展, 但此时软相呈网络状分布. 硬相的阻碍作用类似于细晶强化机制, 这种强化导致样品强度提高 (图 1(c) 插图).

塑性区与基体之间的 (剪切) 模量和应变差异可能会引起应力集中, 从而增加在塑性区边界处继续激发塑性事件的可能性, 同时改变应变分布和塑性区形态^[40]. 在软硬相复合的金属玻璃中, 软相比硬相具有更低的模量, 易成为应力集中的部位. 图 6 展示了在较小应变下的一次剪切带和在较大应变下的二次剪切带形成示意图. 在应变较小或者样品刚发生屈服时 (图 6(a1) 和图 6(a2)), 软相区率先激活塑性单元, 在应力的作用下, 软相区发生形变. 众多研究将塑性事件与 Eshelby 的等效夹杂物问题联系起来. Eshelby 夹杂物产生的应变场原本是具有四重对称性的极化场, 这些极化场根据内部应力的极大值的方向排列, 使得原本近似球体的塑性形变区逐渐转变为椭球体. 在此过程中, 较大的应力集中分布在椭球体的两端^[41]. 随着椭球体的持

续发展扩张, 其区域逐渐沿特定方向扩展, 并最终形成剪切带. 在稳定流变区, 随着应变的进一步增大 (如图 6(b1)–(b3) 所示), 在剪切应力的进一步作用下, 软相区的椭球体形状被破坏, 上半部向右移动, 下半部分向左移动, 逐渐变形为微 S 形结构, 原有的塑性区被破坏. 这种形状的改变导致较大应力不再沿着椭球体长端分布, 最终沿水平方向形成新的塑性区, 进而产生二次剪切带.

当软相区在合金中的分布较为分散时 (图 6(c) 和图 6(d)), 其剪切带产生行为类似, 但具有一定差异性. 具体而言, 相邻软区中产生的塑性形变区易相互连接, 产生应力通道实现贯穿 (如图 6(c1) 中右侧两个软相区), 形成较大的椭球形塑性区, 在原位形成剪切带. 在较大应变条件下, 其变形机制与图 6(b1)–(b3) 所展示的情况具有相似性. 右侧的软相区同样变形为微 S 形结构, 并在水平方向上形成塑性区, 进而引发二次剪切带的形成. 和软相区分布集中的情况相比, 分散的软相区能使得形成贯穿整个样品的二次剪切带过程更加平滑. 由此可见, 应力与结构分布特征之间存在着相互影响的关系: 应力能够改变材料的结构分布特征, 而结构分布特征的改变又会反过来影响应力的分布.

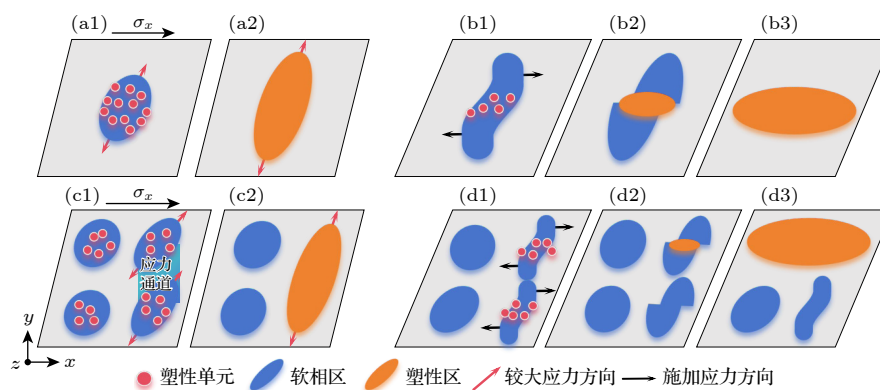


图 6 硬相含量较多的样品中产生一次剪切带和二次剪切带示意图 (a1), (a2) 应变较小时软区诱导第一次剪切带产生示意图; (b1)–(b3) 应变较大时软区诱导第二次剪切带产生示意图; (c1), (c2) 和 (d1)–(d3) 分别为硬区较为离散情况下第一次和第二次剪切带产生示意图

Fig. 6. Schematic diagrams for the generation of the primary shear band and the secondary shear band: (a1), (a2) Emergency of the primary shear band at relative small strains; (b1)–(b3) emergency of the secondary shear band at relative large strains; (c1), (c2) and (d1)–(d3) are the emergency of the primary and the secondary shear bands when the hard-phase regions are dispersively distributed, respectively.

4 结 论

本研究通过软硬相序构金属玻璃设计策略, 系统揭示了微观结构不均匀性对剪切带行为的调控机制. 序构所构建的软硬区分布状态影响剪切带萌生和演化模式. 交换原子蒙特卡罗算法制备的高稳态硬相中二十面体团簇富集形成“硬区”, 其高密度分布促使 STZs 高度局域化, 产生窄剪切带; 而 MD 制备的软相中二十面体团簇含量较少, 应力分布分散, 塑性事件为较大面积的区域模式, 可以在较广范围内耗散能量. 在软硬双相复合的金属玻璃样品中, 剪切带成核和演化与软相的(高“类液区”含量, 可视为实际金属玻璃中的流动“缺陷”)分布密切相关. 当体系受外部载荷时, 软相凭借局域应力集中率先激活 STZs. 受自身塑性承载能力限制, 软相会导致应力跨相重新分布, 激发邻近硬相协同变形, 共同促成剪切带的产生.

序构的结构特征对样品的力学行为和剪切带的产生具有显著影响. 硬区的离散分布比集中分布更能稳定金属玻璃, 使得剪切带产生的临界应变增加. 更为重要的是, 硬区包围软区还是软区包围硬区的策略极大影响金属玻璃的流变行为. 当硬区包围软区且硬相占比超过 70% 时, 样品中将产生二次剪切带. 该二次剪切带的产生与分散软区在外力加载下相互关联和贯穿的动态变化行为相关.

感谢中南大学高性能计算平台提供的计算支持.

参考文献

- [1] Wang W H, Dong C, Shek C H 2004 *Mater. Sci. Eng., R* **44** 45
- [2] Schuh C A, Hufnagel T C, Ramamurty U 2007 *Acta Mater.* **55** 4067
- [3] Krucic J J 2016 *Adv. Eng. Mater.* **18** 1308
- [4] Cheng Y Q, Ma E 2011 *Prog. Mater. Sci.* **56** 379
- [5] Zhu F, Hirata A, Liu P, Song S X, Tian Y, Han J H, Fujita T, Chen M W 2017 *Phys. Rev. Lett.* **119** 215501
- [6] Argon A S 1979 *Acta Metall.* **27** 47
- [7] Falk M L, Langer J S 1998 *Phys. Rev. E* **57** 7192
- [8] Priezjev N V 2017 *Phys. Rev. E* **95** 023002
- [9] Cubuk E D, Ivancic R J S, Schoenholz S S, et al. 2017 *Science* **358** 1033
- [10] Qiao J C, Wang Q, Pelletier J M, Kato H, Casalini R, Crespo D, Pineda E, Yao Y, Yang Y 2019 *Prog. Mater. Sci.* **104** 250
- [11] Wang Z, Wang W H 2017 *Acta Phys. Sin.* **66** 176103 (in Chinese) [王峥, 汪卫华 2017 *物理学报* **66** 176103]
- [12] Chang C, Zhang H P, Zhao R, Li F C, Luo P, Li M Z, Bai H Y 2022 *Nat. Mater.* **21** 1240
- [13] Wang Q, Shang Y H, Yang Y 2023 *Mater. Futures* **2** 017501
- [14] Lu X Q, Feng S D, Li L, Wang L M, Liu R P 2023 *J. Phys. Chem. Lett.* **14** 6998
- [15] Vollmayr K, Kob W, Binder K 1996 *J. Chem. Phys.* **105** 4714
- [16] Liu Y, Bei H, Liu C T, George E P 2007 *Appl. Phys. Lett.* **90** 071909
- [17] Zhang Y, Zhang F, Wang C Z, Mendeleev M I, Kramer M J, Ho K M 2015 *Phys. Rev. B* **91** 064105
- [18] Ryltsev R E, Klumov B A, Chitchev N M, Shunyaev K Y 2016 *J. Chem. Phys.* **145** 034506
- [19] Joy A, Bouchbinder E, Procaccia I 2013 *Phys. Rev. E* **87** 042310
- [20] Fan M, Wang M L, Zhang K, Liu Y H, Schroers J, Shattuck M D, O'Hern C S 2017 *Phys. Rev. E* **95** 022611
- [21] Sadigh B, Erhart P, Stukowski A, Caro A, Martinez E, Zepeda-Ruiz L 2012 *Phys. Rev. B* **85** 184203
- [22] Grigera T S, Parisi G 2001 *Phys. Rev. E* **63** 045102
- [23] Berthier L, Coslovich D, Ninarello A, Ozawa M 2016 *Phys. Rev. Lett.* **116** 238002

- [24] Ninarello A, Berthier L, Coslovich D 2017 *Phys. Rev. X* **7** 021039
- [25] Parmar A D S, Ozawa M, Berthier L 2020 *Phys. Rev. Lett.* **125** 085505
- [26] Zhang Z, Ding J, Ma E 2022 *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **119** e2213941119
- [27] Yu J H, Zhang Z, Sha Z D, Ding J, Greer A L, Ma E 2025 *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **122** e2427082122
- [28] Luo Q, Cui W R, Zhang H P, et al. 2023 *Mater. Futures* **2** 025001
- [29] Mendeleev M I, Kramer M J, Ott R T, Sordet D J, Yagodin D, Popel P 2009 *Philos. Mag.* **89** 967
- [30] Sadigh B, Erhart P 2012 *Phys. Rev. B* **86** 134204
- [31] Maloney C E, Lemaître A 2006 *Phys. Rev. E* **74** 016118
- [32] Plimpton S 1995 *J. Comput. Phys.* **117** 1
- [33] Barlow H J, Cochran J O, Fielding S M 2020 *Phys. Rev. Lett.* **125** 168003
- [34] Cui S H, Liu H S, Peng H L 2022 *Phys. Rev. E* **106** 014607
- [35] Dasgupta R, Mishra P, Procaccia I, Samwer K 2013 *Appl. Phys. Lett.* **102** 191904
- [36] Liu Y, Liu H S, Peng H L 2023 *J. Non-Cryst. Solids* **601** 122052
- [37] Liu Y, Yan Z H, Liu H S, Shang B S, Peng H L 2024 *Phys. Rev. B* **109** 054115
- [38] Li M Z 2017 *Acta Phys. Sin.* **66** 176107 (in Chinese) [李茂枝 2017 *物理学报* **66** 176107]
- [39] Peng H L, Li M Z, Wang W H 2011 *Phys. Rev. Lett.* **106** 135503
- [40] Eshelby J D 1957 *Proc. R. Soc. London, Ser. A* **241** 376
- [41] Tang X C, Deng J R, Meng L Y, Yao X H 2025 *Int. J. Plast.* **189** 104323

SPECIAL TOPIC—Order tuning in disordered alloys

Shear banding behavior in soft-hard phase ordered metallic glasses^{*}WANG Shoucheng PAN Qiangqiang NING Rui PENG Hailong[†]*(State Key Laboratory of Powder Metallurgy, School of Materials Science and Engineering, Central South University, Changsha 410083, China)*

(Received 27 June 2025; revised manuscript received 16 August 2025)

Abstract

Shear banding behavior of metallic glasses (MGs) strongly correlates with the microstructural heterogeneity. Understanding how the nucleation and propagation of shear bands are governed by the nanoscale structural heterogeneity is crucial for designing high-performance MGs. Herein, the traditional molecular dynamics (MD) and swap Monte Carlo (SMC) simulations are used to construct two phases of CuZr metallic glasses: the soft phase with a high cooling rate about 10^{13} K/s, and the hard phase with a extremely low cooling rate in simulations about 10^4 K/s. The soft phase contains fewer icosahedral clusters, allowing for easier plastic deformation; the hard phase has more of icosahedral clusters, which promotes shear localization once shear bands form inside. A ductile-to-brittle transition is found to occur in the soft-and-hard phase ordered MGs with the increase of the hard-region fraction c . Additionally, the strategy for ordering these two phases to strongly influence the mechanical behavior of MGs is proposed. Dispersed and isolated hard-regions can improve the mechanical stability of MGs and delay the occurrence of shear banding. Instead, the soft regions surrounded by hard regions can induce a secondary shear band that is formed through the reorientation of plastic zones under constrained deformation, leading to more delocalized plastic deformation zones. This work reveals that the structural heterogeneity achieved by adjusting the topology of soft and hard phases can significantly change the mechanical performance of MGs, which can guide the design of metallic glasses with controllable structures through architectural ordering strategies.

Keywords: metallic glasses, order modulation, molecular-dynamics simulations, shear banding**PACS:** 61.43.Dq, 64.70.pe, 81.05.Kf**DOI:** [10.7498/aps.74.20250845](https://doi.org/10.7498/aps.74.20250845)**CSTR:** [32037.14.aps.74.20250845](https://cstr.cn/32037.14.aps.74.20250845)

^{*} Project supported by the Scientific Research Foundation of Education Bureau of Hunan Province, China (Grant No. 24A0007) and the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 52371168).

[†] Corresponding author. E-mail: hailong.peng@csu.edu.cn

软硬相序构金属玻璃中的剪切带行为

王寿成 潘强强 宁睿 彭海龙

Shear banding behavior in soft–hard phase ordered metallic glasses

WANG Shoucheng PAN Qiangqiang NING Rui PENG Hailong

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 74, 196101 (2025) DOI: 10.7498/aps.74.20250845

CSTR: 32037.14.aps.74.20250845

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250845>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

序调控工程创制高频非晶基软磁材料研究进展

Research progress of ordered regulation engineering for developing high–frequency amorphous–based soft magnetic materials

物理学报. 2025, 74(13): 136101 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250585>

非牛顿流体剪切稀化特性的分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation on shear thinning characteristics of non–Newtonian fluids

物理学报. 2021, 70(12): 124701 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20202116>

局部塑性变形下铁基金属玻璃的致密化和非均匀性增强

Densification and heterogeneity enhancement of Fe–based metallic glass under local plastic flow

物理学报. 2022, 71(5): 058101 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211304>

剪切增稠幂律流体中单气泡上升动力学行为的格子Boltzmann方法研究

Lattice Boltzmann method for studying dynamics of single rising bubble in shear–thickening power–law fluids

物理学报. 2024, 73(13): 134701 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240394>

镁中位错和非晶作用机制的分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation of mechanism of interaction between dislocation and amorphism in magnesium

物理学报. 2022, 71(14): 143101 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20212318>

尺寸依赖的CoCrFeNiMn晶体/非晶双相高熵合金塑性变形机制的分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation of size dependent plastic deformation mechanism of CoCrFeNiMn crystalline/amorphous dual–phase high–entropy alloys

物理学报. 2022, 71(24): 243101 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20221368>