



软-硬两相结构异质性对非晶合金剪切带传播机制的影响研究

袁旭东¹, 张龙^{1*}, 颜廷毅^{1,2}, 武毅^{1,2}, 王金贺¹, 付华萌¹, 李宏³, 张海峰^{3*}

1. 中国科学院金属研究所, 师昌绪先进材料创新中心, 沈阳 110016;

2. 中国科学技术大学材料科学与工程学院, 沈阳 110016;

3. 东北大学冶金学院, 沈阳 110819

*联系人, 张龙, E-mail: zhanglong@imr.ac.cn; 张海峰, E-mail: zhanghf@mail.neu.edu.cn

收稿日期: 2023-08-16; 接受日期: 2023-10-17; 网络出版日期: 2024-04-29

国家自然科学基金(编号: 52171164, 51790484)、冲击环境材料技术重点实验室基金(编号: WDZC2022-13)和中国科学院青年创新促进会会员(编号: 2021188)资助项目

摘要 本文采用分子动力学模拟的方法, 研究了具有软-硬两相结构异质性的非晶合金在拉伸变形过程中剪切带的传播机制. 发现剪切带由软相区向硬相区传播时, 会在界面处发生停滞并在随后的传播过程中发生剪切路径的改变. 这种结构的差异性使软硬两相发生不同步的屈服行为, 导致剪切带的不连续传播行为. 此外, 发现硬相区中的微观结构的不均匀性导致应力和局部熵的不均匀分布, 剪切变形区域会选择在大局部应力和高局部熵的区域发生. 本工作不仅加深了对剪切带在软-硬两相结构异质性非晶合金中传播机制和行为的认识, 并对设计开发具有更优力学性能的非晶合金材料具有启发作用.

关键词 分子动力学模拟, 非晶合金, 结构异质性, 剪切带

PACS: 71.23.Cq, 71.15.Pd, 62.20.Fe, 62.20.Mk

1 引言

因为具有高强度、高硬度及大的弹性极限等优良的力学性能, 非晶合金被视为一种具有极大应用潜力的材料^[1-4]. 然而, 塑性变形时生成的高度局域化的剪切带^[5-7]和随后由剪切带发展而成的使材料发生灾难性断裂的裂纹^[2,8]使非晶合金表现出很差的塑性, 这严重限制了其更广泛的应用. 尝试阻碍剪切带的迅速扩展可以有效的改善非晶合金材料的力学性能, 而被广

泛采纳的一种有效的办法是使非晶合金具有不均匀的结构. 如在非晶合金基体内引入软韧晶体相而形成具有异质结构的非晶复合材料. 晶体相的存在可以诱导多重剪切带的产生且能抑制剪切带的迅速传播^[9-14], 从而提高非晶合金材料的塑性. 研究也已表明若非晶合金基体具有尺度为几纳米到几十至几百微米的微观结构异质性, 如同时包含成分相同但微观结构不同的硬质非晶相和软质非晶相时^[15,16], 剪切带的灾难性扩展也能被有效的缓解. 目前的实验和模拟结果已经证

引用格式: 袁旭东, 张龙, 颜廷毅, 等. 软-硬两相结构异质性与非晶合金剪切带传播机制的影响研究. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2024, 54: 254614
Yuan X D, Zhang L, Yan T Y, et al. Effect of structural heterogeneity on the shear-band propagation mechanism in soft-hard dual-phase metallic glasses (in Chinese). Sci Sin-Phys Mech Astron, 2024, 54: 254614, doi: [10.1360/SSPMA-2023-0291](https://doi.org/10.1360/SSPMA-2023-0291)

实异质非晶结构之间的弹塑性差异使剪切带由硬质区向软质区跨结构传播时发生分叉^[16,17]从而诱导多重剪切带的生成, 然而关于剪切带由软质区向硬质区传播时的动力学行为仍然鲜有研究. 明确剪切带由软质区向硬质区传播的机制对进一步了解结构异质性非晶合金材料的变形行为和设计高性能的非晶合金具有重要的意义.

由于剪切带的尺度和传播速度的限制, 很难通过传统实验的方法详细揭示其复杂的动力学行为, 尤其是探究剪切变形与结构异质性之间的关联. 因此, 计算机模拟尤其是分子动力学模拟成为一个研究非晶合金微观结构及剪切动力学的有效手段^[5,18–20]. 本文采用分子动力学模拟的方法, 选取 $\text{Cu}_{64}\text{Zr}_{36}$ 非晶合金为研究体系, 通过建立具有大的微观结构差异的软-硬两相结构异质性非晶合金模型并进行拉伸变形模拟, 探究了剪切带由软相区传播至硬相区的动力学行为过程. 通过对模型进行微观结构表征, 揭示了异质结构差异对剪切带传播过程的影响. 采用局部应力状态分析、局部熵分布状况分析的方法进一步揭示了剪切带从软质区向硬质区扩展的微观机制.

2 模拟及分析方法

本文采用大规模原子/分子并行模拟软件 LAMMPS^[21]对 $\text{Cu}_{64}\text{Zr}_{36}$ 体系的非晶合金进行模拟研究. 选用Mendeleev等人^[22]提出的EAM势函数来描述体系原子之间的相互作用. 大量的模拟工作已经证实该势函数可以用来描述Cu-Zr体系的非晶合金在塑性变形过程中的结构演化行为及剪切变形过程^[17,23–26]. 模拟可分为异质结构模型创建和拉伸变形两个阶段. 整个过程中均采用2 fs的时间步长. 在创建非晶合金模型时, 将8000个原子随机放置于模拟盒子中并置于2000 K下等温弛豫2 ns, 由此得到均匀的液相结构. 随后以 10^{10} K/s的冷却速度将液态结构冷却至50 K以得到非晶合金初始构型, 并将以此冷速制备的非晶结构视为软相. 整个过程中均采用NPT系综^[27]和周期性边界条件.

为了探究剪切带由软相向硬相传播的微观机制, 需要制备与软相非晶存在明显微观结构差异的硬质相的非晶合金模型, 传统方法为将冷却速度降低数个数量级, 但由于分子动力学模拟时间尺度的限制, 这种

方式会浪费大量的时间成本和计算资源. Şopu等人^[28]的模拟工作证明, $\text{Cu}_{64}\text{Zr}_{36}$ 体系的非晶合金在高于玻璃转变温度50 K时进行弛豫, 可以在短时间内获得基体内短程有序结构含量大幅提高且没有晶化相产生的高度弛豫态非晶合金. 本文亦采用此方法建立硬质相非晶结构. 具体做法为将软相非晶合金模型以 10^{11} K/s的速度升温至1000 K, 并在此温度下等温弛豫400 ns后再以 10^{11} K/s的速度降温至50 K. 此后, 将铸态与弛豫后的模型分别沿x-y-z三个方向扩大, 并对模型尺寸进行调控, 使两个扩大后的模型在x-和z-方向长度保持一致. 将扩大后的两个模型沿y-方向拼接至一起以构成具有结构异质性的总计含有1800000个原子的拉伸模型, 并将模型命名为AC-HR异质结构非晶合金, 其中AC部分代表原始铸态结构即软相区, HR部分则代表弛豫后的硬相结构. 在AC部分的边界处设置一个缺口以使其产生应力集中, 后将模型置于50 K的温度下对模型施加沿着z-方向的应变速率恒定为 $4 \times 10^7/\text{s}$ 的单轴拉伸变形, 并在x-和z-方向施加周期性边界同时在y-方向施加开放性边界条件.

采用Voronoi多面体分析方法对非晶合金内部的短程有序结构含量进行计算, 从而分析异质结构中的微观结构差异和拉伸变形过程中的结构变化趋势. 塑性变形过程中的剪切带生成及传播行为通过计算原子应变、旋转角度、应力分量及结构熵进行分析^[29], 并在OVITO软件^[30]中进行可视化表征.

3 结果与讨论

图1(a)给出了用于拉伸模拟研究的具有结构异质性的非晶合金模型示意图, 其中左半边为AC部分, 右半边为HR部分. 为了明确两个部分的结构在原子尺度上的差异, 我们分别计算了两个部分中的以Cu原子为中心的短程有序团簇结构的含量及分布情况. 非晶合金基体内存在着大量的短程有序结构, 其种类与分布情况与非晶合金的化学成分和制备过程中的冷却速度等密切相关^[23,31,32]. 研究表明, 正二十面体(Fully Icosahedra, FI)结构是CuZr体系的非晶合金材料中最具有代表性的能够对材料的力学性能产生决定性影响的一种原子团簇^[23,33]. 与其他短程有序团簇和完全无序的原子团相比, FI结构具有更高的堆积密度, 更高的抗剪强度和更低的局部原子迁移率^[33,34]. 因此我们选取FI

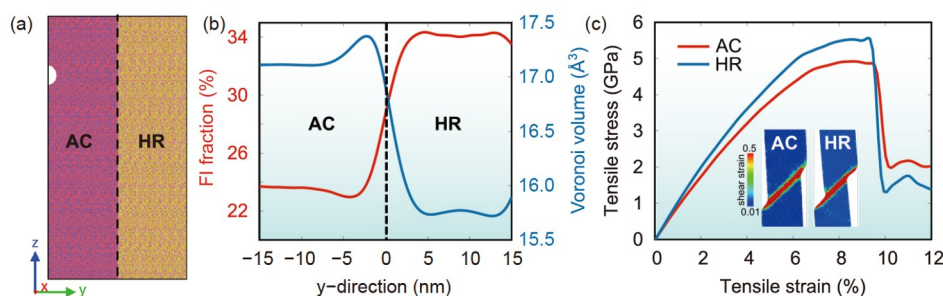


图 1 (网络版彩图) (a) 用于拉伸变形模拟的AC-HR结构异质性非晶合金MD模型; (b) AC-HR结构异质性非晶合金中FI结构和自由体积含量沿y-方向的分布. 红色曲线为FI结构, 蓝色曲线为Voronoi多面体体积大小; (c) AC和HR样品在50 K温度和 $4 \times 10^7/s$ 的应变速率下单轴拉伸变形时的应力-应变曲线. 插图显示了每个样品屈服后的剪切带形貌

Figure 1 (Color online) (a) The AC-HR heterogeneous metallic glass sample that is used for uniaxial tensile deformation simulation. (b) The distribution of FI structure and free volume along y-direction in AC-HR heterogeneous metallic glass. The red line represents the FI structure while the blue line represents Voronoi volume, respectively. (c) The uniaxial tensile stress-strain curves of AC and HR samples at 50 K and deformed with the strain rate of $4 \times 10^7/s$. Inset shows the shear band morphology of each sample after yielding.

结构为代表, 用切片统计方法计算了FI结构在两个部分中的分布情况. 具体方法为: 将异质结构界面处视为原点, 将模型沿y-方向平均切分为30个宽度为1 nm的切片, 统计每个切片内部的FI结构的含量. 从图1(b)红色曲线中可以看出, FI结构的含量由AC部分中的24%提高至HR部分的34%, 说明等温弛豫过程改变了非晶基体的微观结构, 使其短程有序化程度增加. 而FI含量在界面附近的陡然突变也证明了以界面处为分界线, AC-HR非晶合金模型具有结构异质性.

非晶合金内的自由体积也是表征其微观结构的有效参数之一, 自由体积也可以被称为过剩体积, 是指非晶合金中原子能够自由活动的区域, 它被定义为原子的实际占有体积减去其固有体积的差值^[35], 自由体积的含量会影响材料的力学性能与变形行为^[36-38]. 为了进一步验证AC与HR在微观结构上的差异, 我们用相同的切片分析方法分析了两部分的平均自由体积含量的区别. 在分子动力学模拟方法中, 自由体积可以通过原子周围的Voronoi多面体体积减去原子的固有体积来计算^[39]. 由于原子的固有体积在弛豫前后保持恒定, 因此AC与HR部分的Voronoi多面体体积大小的差异可以用来近似表征两部分自由体积含量的区别. 我们分别计算了AC与HR部分的Voronoi多面体体积且其结果如图1(b)中蓝色曲线所示. AC部分的平均Voronoi多面体体积为 17.2 Å^3 , 经过弛豫后局部结构有序化程度的增加使HR部分Voronoi多面体体积平均值下降至 15.7 Å^3 , 证明了HR部分与AC部分相比具有明显降低的自由体积含量. 自由体积的减少会导致非晶合金硬

度和弹性模量的增加, 在使非晶合金表现出更高的强度同时导致剪切带形成能力的降低^[40]. 为了进一步明确两部分的力学参数, AC与HR部分分别在50 K的温度和 $4 \times 10^7/s$ 的应变速率下单独进行了单轴拉伸变形模拟测试, 结果如图1(c)所示. 计算得出AC部分的拉伸屈服应力为4.7 GPa, 杨氏模量为92 GPa; 而HR结构的拉伸屈服强度为5.6 GPa, 杨氏模量为110 GPa. 力学参数上的区别预示着AC-HR异质结构中两部分的不同步屈服.

图2给出了AC-HR结构异质性非晶合金模型的单轴拉伸应力应变曲线和塑性变形过程中剪切带的传播过程示意图. 应力应变曲线表明整个拉伸变形过程可以被分为四个阶段. 第一阶段为整体弹性变形阶段, 对应于应力应变曲线起始点至应变量为3.9%的位置A处. 在这一阶段, 整个异质结构发生弹性变形, 拉伸应力随着应变量的提高而逐渐增加, 此时剪切带尚未形成. 在此阶段的末期, AC部分的缺口处周围可以发现由于剪切变形区域的启动导致的高应变区(如图2(b)-A所示), 这预示着剪切带即将生成和扩展. 应变量为3.9%–4.5%的阶段为变形第二阶段, 此时AC部分发生屈服伴随着剪切带生成并迅速传播至界面处(如图2(b)-B所示), 这也导致了此阶段应力值的陡然下降. 应变量为4.5%–7.5%时变形处于第三阶段, HR部分尚未发生屈服因此没有剪切变形的发生, 剪切带的传播受到阻碍而无法贯穿整个样品, 拉伸应力在此阶段再一次升高. 通过对比图2(b)中的B和C部分可以看出, 剪切带在此阶段逐渐变粗且在界面处表现尤为明显,

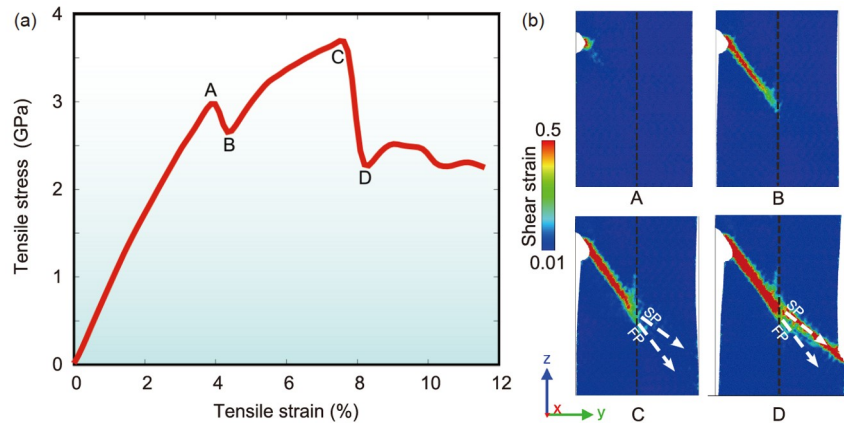


图 2 (网络版彩图) (a) AC-HR 结构异质性非晶合金单轴拉伸应力-应变曲线; (b) 拉伸变形过程中应变量为 A: 3.9%, B: 4.5%, C: 7.5%, D: 8% 时的剪切带形貌

Figure 2 (Color online) (a) Uniaxial tensile stress-strain curve of AC-HR heterogeneous metallic glass; (b) the shear band morphology during tensile deformation at strain levels of A: 3.9%, B: 4.5%, C: 7.5%, and D: 8%.

剪切变形区域沿着界面缓慢扩展但始终无法穿过界面. 当应变量大于 7.5% 时, 变形进入第四阶段, 剪切带由界面处开始重新启动并迅速贯穿 HR 部分使整个异质结构样品发生剪切, 导致应力应变曲线上应力的再一次大幅度下降.

非晶合金的塑性变形伴随着高度局域化的剪切带的产生和迅速扩展. 在整体为均质结构的非晶合金拉伸变形过程中, 当所施加载荷到达材料的屈服强度时, 剪切带开始生成并扩展贯穿整个样品. 而在 AC-HR 模型中, 结构异质性的存在使 AC 部分与 HR 部分具有不同的屈服强度. AC 部分首先发生屈服伴随着剪切带的生成和迅速传播至界面处, 此时 HR 部分仍处于弹性阶段因而无法发生塑性剪切变形. 不同步的屈服使剪切带在界面处发生短暂停滞后续扩张, 从而导致整个样品的分步塑性变形.

为了更细致地揭示结构异质对剪切带传播过程的影响机制, 我们重点分析了在变形的第三阶段时界面区域剪切带传播与微观结构演变的关系, 结果如图 3(a) 所示. 图中粉红色圆点区域代表着 FI 团簇结构. 与 AC 部分相比, HR 部分中大量密集分布的 FI 团簇结构更加直观的证实了其更加致密和有序的微观结构. 可以看出, 由于 HR 部分高密度的 FI 团簇的存在, 剪切变形区域无法启动, 剪切带的传播在界面处停滞. 随着应变程度的逐渐增加, HR 部分中的 FI 团簇含量逐渐减少, 剪切变形区域在 FI 团簇密度降低的区域开始逐渐出现.

理论认为剪切带形成的最初阶段为剪切变形区域原子在所施加的外力的作用下发生局部原子重排^[5,7,41], 剪切变形区域沿着大应力方向的逐渐积累最终导致高度局域化的剪切带的形成. 研究证实, 在塑性变形初期剪切变形区域会避开密堆积的 FI 原子团簇而在结构较为松散的位置开始启动^[33,42,43], 这些位置具有较低的抗剪切强度和较高的局部原子迁移率, 更容易在外力的作用下发生原子重排. 当 AC 部分的剪切带扩展至与界面发生初次接触时, 剪切带尖端试图在 HR 部分中进一步传播从而引发整个样品的剪切变形, 但此时 HR 部分仍密集分布着大量的 FI 团簇, 这些团簇限制了剪切变形区域的启动, 从而阻碍了剪切带的进一步扩展. 随着施加载荷的增加, AC 部分中大的塑性变形使 HR 部分发生局部结构畸变导致部分 FI 团簇被破坏, 局部结构有序化程度降低, 剪切变形区域开始逐渐启动, 塑性变形在 HR 部分中开始发生.

Şopu 等人^[5,17]和 Yuan 等人^[33]的分子动力学计算模拟结果表明, 剪切带的传播机制不能简单地归纳为剪切变形区域结构的堆积, 而是剪切变形区域和漩涡结构共同作用的结果. 被激活的初始剪切变形区域会引导其周围环境发生特定角度的旋转而形成一种漩涡结构, 这种漩涡结构可以为下一个剪切变形区域的激活提供驱动力同时作为两个相邻剪切变形区域的链接单元. 剪切变形区域-漩涡结构的链式反应的不断积累最终导致剪切带的传播. 因此, 分析漩涡结构对理解剪切传播过程至关重要, 因为它是将局部结构畸变沿特定

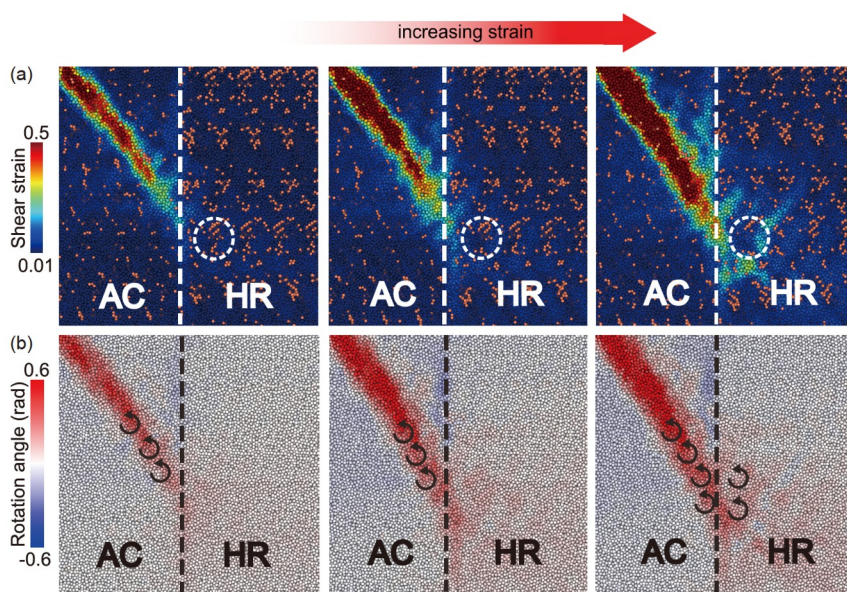


图 3 (网络版彩图)拉伸加载变形过程中, 异质结构界面处的剪切变形与FI结构之间的关系如(a)中所示. 其中粉色圆点表示FI结构. 相同应变下漩涡结构的分布情况如(b)中所示, 其中红色代表原子团簇发生逆时针旋转, 而蓝色则对应于顺时针旋转

Figure 3 (Color online) The correlation between shear deformation and FI structure evolution near the heterostructure interface during tensile loading is displayed in (a). The pink dots represent the FI structure. The distribution of vortex structure at the same strain level is exhibited in (b), the red color indicates that the cluster is rotated with counter clockwise direction while the blue color corresponds to clockwise rotation.

方向从单一剪切变形区域传递为连续剪切的重要介质^[17]. 在本文中, 我们亦分析了漩涡结构的运动规律并对结果进行可视化, 以此来加深对结构异质性非晶合金中剪切带传播行为的理解. 漩涡结构可以通过利用模拟分析软件OVITO计算并可视化原子的旋转角度来进行表征. OVITO根据每个原子初始位置和变形后的位置, 计算出应变张量 F 和相应的旋转张量 R , 其中 R 用四元数Rotation.(X, Y, Z, W)来表示. 在此基础上可以利用公式 $\text{sign}(\text{Rotation}.X) \times 2 \times \arccos(\text{Rotation}.W)$ 计算出原子的旋转角度并进行可视化. 图3(b)给出了变形过程中漩涡结构的演变规律, 其中rotation angle代表着局部漩涡结构中的原子团簇相对于拉伸加载方向(本工作中为 Z 方向)的旋转角度, 其中正负值分别代表逆时针和顺时针旋转. 在塑性变形过程中, 漩涡结构在AC部分沿着恒定的方向连续形成, 这促进了剪切变形区域沿此方向的链式反应, 形成高度局域化的剪切带. 而在HR部分中, 由于FI团簇结构的限制, 原子团簇难以发生旋转运动从而无法形成漩涡结构, 导致链式反应在界面处发生中断, 剪切变形区域在界面处堆积, 剪切带的传播暂时被停止. 同时, AC部分中的漩涡结构不断向剪切带周围环境继续扩张, 这导致了剪切带

发生缓慢的粗化. 当变形程度继续增加时, HR部分中FI团簇的破坏使局部抗剪切强度降低, 漩涡结构逐渐开始形成并辅助剪切变形区域越过界面在HR部分传播和产生链式反应, 导致剪切带的进一步生成和扩展.

从图1(b)可以明显地看出, 剪切带在由AC部分传播至HR部分时, 并未沿着恒定的方向而是发生了明显的角度偏转. 我们将HR部分中最终发生剪切变形的路径命名为剪切路径(Shear Path, SP), 并将与AC部分中剪切带方向相同但并未发生剪切变形的路径称为空闲路径(Free Path, FP). 为了明确剪切传播方向发生改变的深层原因, 我们将注意力集中在应变量为7.5%时材料的两相界面处, 对此处的局部冯米塞斯应力(von Mises Stress, VMS)的分布行了表征, 其结果如图4所示. 局部VMS可以通过计算所选取的截断半径内的每个原子的应力平均值来进行表征. VMS的大小不仅与纯变形所引起的变形能相关联, 而且其分布情况可以反应非晶合金系统的整体应力分布状态. 图4(a)给出了AC和HR两部分的VMS分布的总体情况, 此时HR部分较高的局部应力预示着剪切变形即将发生. 通过对SP和FP进行更加细化的切片计算分析可以看出, 此时SP表现出更大的局部应力. 非晶合金中的剪切带的形

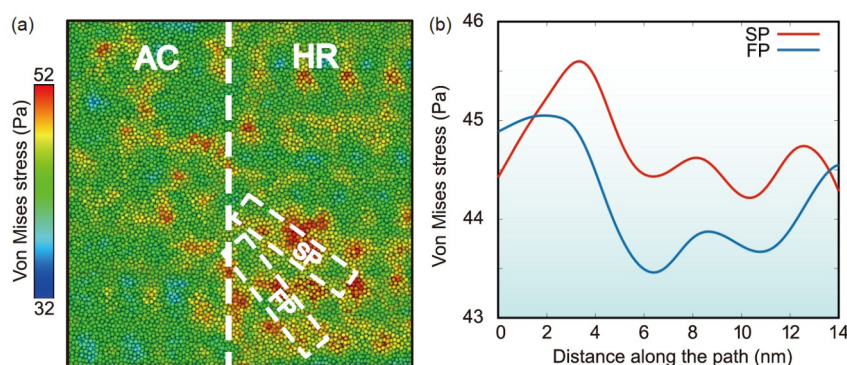


图 4 (网络版彩图) (a) 应变量为 7.5% 时异质结构界面附近的局部冯米塞斯应力分布状态. 对白色虚线方框内区域进行切片计算得到的剪切路径(SP)和自由路径(FP)的冯米塞斯应力大小及分布情况如(b)中所示

Figure 4 (Color online) (a) The local von Mises stress distribution near the heterostructure interface at the strain level of 7.5%. The values and evolution for the von Mises stress along SP and FP taken from the dashed boxes are shown in (b).

成是应力驱动下的原子团簇发生大规模重排的动态过程^[18,44,45]. SP中大的局部应力分布为原子团簇发生剪切运动提供了更高的驱动力,从而有助于剪切变形区域的激活和剪切变形的发生.

由于具有无序的结构,非晶合金的结构在原子尺度上具有不均匀性,这种不均匀性表现为短程有序结构的局部不均匀分布.虽然在制备过程中经过了等温弛豫,HR部分的非晶基体内的微观结构不均匀性依然存在.而研究证实,非晶合金基体的VMS的分布状态与其微观结构密切相关^[33,46-48].局部有序化程度低的区域原子被束缚于不稳定的高能态位置,具有高的局部应力;相反,有序化程度高的原子团簇结构更加稳定,局部应力更低^[19].HR部分基体内的结构不均匀性导致局部应力的不均匀分布,进而演变成在施加载荷的作用下VMS的不均匀重新布局,最终表现为SP与FP的局部应力状态的不同.而局部应力更高的SP成为剪切变形择优选择的首选路径.

以上的结果说明HR部分的局部微观结构的不均匀性是剪切变形取向的主要因素,为了进一步证实这个观点,我们对材料的局部结构熵分布情况进行了分析.局部熵量化了材料局部微观结构的有序度水平^[49,50],为探究微观结构不均匀性对剪切带传播途径的影响提供了更有利的依据.有理论已经证实,局部熵的分布能够准确预测剪切变形发生的位置和剪切带传播的路径^[19].局部熵计算模型由Piaggi和Parrinello^[50]提出,该模型通过对体系内单个原子*i*的熵值的近似估算从而通过以下公式计算以原子*i*为中心的局部

结构熵:

$$s^i(r) = -2\pi\rho k_B \int_0^{r_m} [g_m^i(r) \ln(g_m^i(r)) - g_m^i(r) + 1] \cdot r^2 dr, \quad (1)$$

其中 ρ 为所计算非晶合金体系的平均密度, k_B 为玻尔兹曼常数, r 为所选取的计算半径而 r_m 为临界截断半径, $g(r)$ 为原子*i*为中心的径向分布函数且其表达式为

$$g_m^i(r) = \frac{1}{4\pi\rho r^2} \sum_j \frac{1}{\sqrt{2\pi\rho\sigma^2}} e^{-(r-r_{ij})^2/(2\sigma^2)}, \quad (2)$$

其中*j*为中心原子的近邻原子, r_{ij} 为原子*i*与*j*之间的间距, σ 为由计算的体系而确定的参数.

我们同样计算并表征应变量为 7.5% 时两相界面区域的局部熵,其结果如图 5 所示.图 5(a)表明,与未发生大塑性变形的周围基体结构相比,AC部分中的剪切带区域显示出更高的熵值.与基体结构相比,剪切带区域更接近于“类液态”结构^[18],具有高的无序性和混乱度,因此表现出高的局部熵.对SP和FP进行细化切片分析,结果表明两个路径的局部熵分布都显示出了强烈的波动性且SP比FP具有更高的熵值(如图 5(b)所示).高的局部熵对应于有序度低的微观结构而低的局部熵则是短程有序结构含量较高的象征.在外部载荷作用下,高局部熵的区域能显示出更高的剪切变形区域激活的倾向^[19].随后剪切变形区域在漩涡结构的连接作用下发生链式反应而形成剪切带.与FP相比,SP较高的局部熵值预示了其更加无序的微观结构和更大的激活剪切变形区域的几率,最终导致剪切带沿着SP生成

和传播.

为了进一步验证模拟结果的可靠性, 我们分别改变了拉伸模拟时模型的初始缺口位置和初始原子随机速度分布参数, 进行了两次额外的拉伸模拟, 结果如图 6 所示. 图 6(a) 为改变模型缺口位置后拉伸变形过程中剪切带的形貌, 可以看出剪切带由 AC 传播至 HR 时也发生了剪切路径的改变. 通过对剪切路径 (SP1) 和自由

路径 (FP1) 的应力状态和局部熵分布的分析可以看出, 与 FP1 相比 SP1 具有更大的局部应力和更高的局部熵 (如图 6(b) 和 (c) 所示). 图 6(b) 的结果证明改变模拟初始的原子随机速度分布参数以后仍可以得到相似的模拟结果, 剪切带在 AC 与 HR 两相界面处发生短暂停顿并在随后的扩展中发生传播方向的改变, 剪切带在由 AC 传播至 HR 部分时会沿着具有大的局部应力和高的局

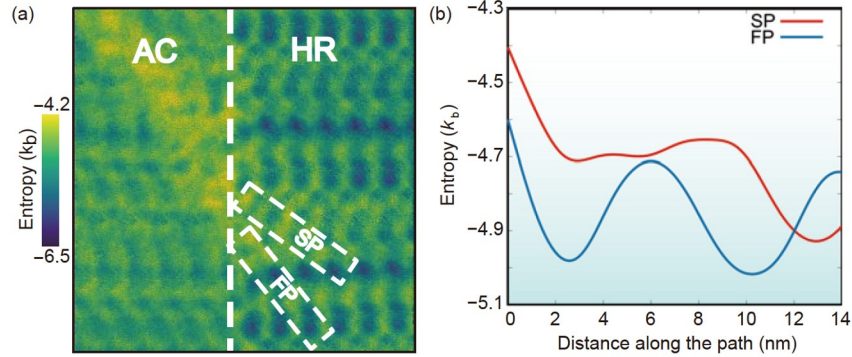


图 5 (网络版彩图) (a) 应变量为 7.5% 时异质结构界面附近的局部熵分布状态. 对白色虚线方框内区域进行切片计算得到的剪切路径 (SP) 和自由路径 (FP) 的局部熵大小及分布情况如 (b) 中所示

Figure 5 (Color online) (a) The local entropy distribution near the heterostructure interface at the strain level of 7.5%. The values and evolution for the entropy along SP and FP taken from the dashed boxes are shown in (b).

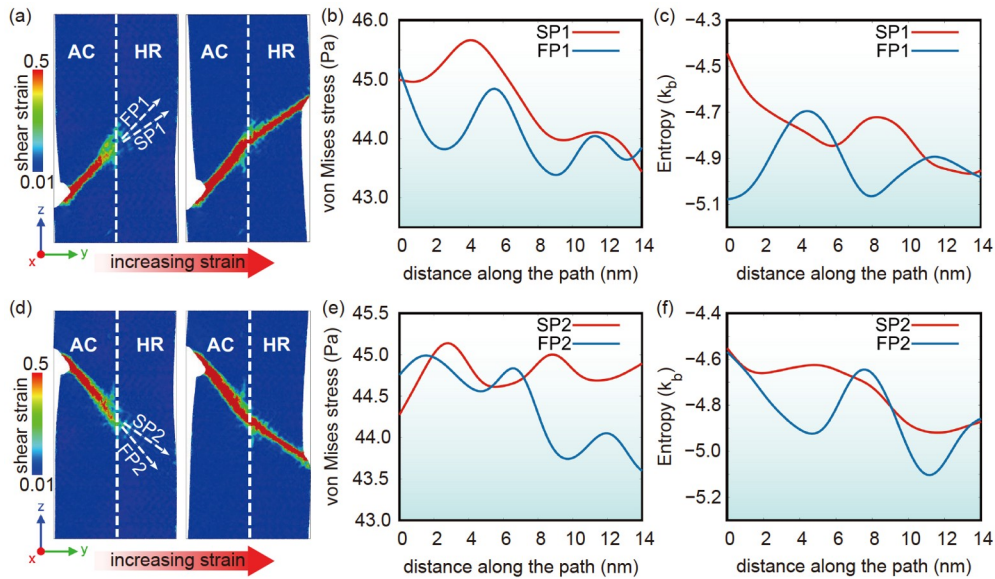


图 6 (网络版彩图) (a) 改变模型初始缺口位置后的拉伸变形过程中剪切带的扩展过程, 剪切路径 (SP1) 和空闲路径 (FP1) 的应力分布及局部熵分布分别如 (b) 和 (c) 中所示. (d) 改变初始原子速度参数后的拉伸变形过程中剪切带的扩展过程. 其中剪切路径 (SP2) 和空闲路径 (FP2) 的应力分布及局部熵分布分别如 (e) 和 (f) 中所示

Figure 6 (Color online) (a) The shear band percolation process during tensile deformation after modifying the initial notch position of the model, and the distribution of stress and local entropy of shear path (SP1) and free path (FP1) are displayed in (b) and (c), respectively. (d) The shear band percolation process during tensile deformation after changing the initial velocity random number seed, and the distribution of stress and local entropy of shear path (SP2) and free path (FP2) are displayed in (e) and (f), respectively.

部熵的路径传播(如图6(e)和(f)所示). 由此证明, 剪切带由软相区向硬相区传播时会发生剪切方向的改变且硬相区的微观结构对剪切方向有决定性影响, 剪切带将沿着具有大的局部应力和高局部熵的路径进行扩展.

4 结论

本文用分子动力学模拟的方法探究了具有软-硬两相结构异质性的非晶合金拉伸变形时剪切带的传播机制. 研究发现: (1) 由于两相屈服强度的不同, 剪切带首先在软相区中迅速传播, 并在两相界面处发生短暂的停滞后继续向硬相区传播; (2) 硬相区存在的大量

正二十面体(FI)结构对剪切变形区域的启动起到限制作用, 导致剪切变形区域-漩涡结构链式反应在界面处发生中断, 最终导致了剪切带的不连续传播; (3) 在由软相区向硬相区扩展时, 剪切带的传播方向会受到硬相区的局部应力状态和局部熵分布情况的影响, 剪切变形区域将沿具有高的局部应力和大的局部熵的方向发生, 因此剪切带在结构异质性非晶合金中传播时会发生剪切路径的改变. 本文的工作结合局部应力分析和局部结构分析的方法揭示了剪切带在非晶合金中由软相区向硬相区传播的微观机制, 深化了对结构异质性非晶合金的剪切变形行为的理解, 本文的解析和结论对于进一步揭示非晶态及其复合材料的力学行为具有一定的参考意义.

参考文献

- 1 Inoue A, Takeuchi A. Recent development and application products of bulk glassy alloys. *Acta Mater*, 2011, 59: 2243–2267
- 2 Sun B A, Wang W H. The fracture of bulk metallic glasses. *Prog Mater Sci*, 2015, 74: 211–307
- 3 Wang W H. Dynamic relaxations and relaxation-property relationships in metallic glasses. *Prog Mater Sci*, 2019, 106: 100561
- 4 Wang W H, Dong C, Shek C H. Bulk metallic glasses. *Mater Sci Eng-R-Rep*, 2004, 44: 45–89
- 5 Şopu D, Stukowski A, Stoica M, et al. Atomic-level processes of shear band nucleation in metallic glasses. *Phys Rev Lett*, 2017, 119: 195503
- 6 Mu X, Chellali M R, Boltynjuk E, et al. Unveiling the local atomic arrangements in the shear band regions of metallic glass. *Adv Mater*, 2021, 33: 2007267
- 7 Greer A L, Cheng Y Q, Ma E. Shear bands in metallic glasses. *Mater Sci Eng-R-Rep*, 2013, 74: 71–132
- 8 Shen L Q, Yu J H, Tang X C, et al. Observation of cavitation governing fracture in glasses. *Sci Adv*, 2021, 7: eabf7293
- 9 Chen Y, Tang C G, Jiang J Z. Bulk metallic glass composites containing B2 phase. *Prog Mater Sci*, 2021, 121: 100799
- 10 Song W, Wu Y, Wang H, et al. Microstructural control via copious nucleation manipulated by *in situ* formed nucleants: Large-sized and ductile metallic glass composites. *Adv Mater*, 2016, 28: 8156–8161
- 11 Qiao J, Jia H, Liaw P K. Metallic glass matrix composites. *Mater Sci Eng-R-Rep*, 2016, 100: 1–69
- 12 Zhang L, Narayan R L, Fu H M, et al. Tuning the microstructure and metastability of β -Ti for simultaneous enhancement of strength and ductility of Ti-based bulk metallic glass composites. *Acta Mater*, 2019, 168: 24–36
- 13 Zhang L, Zhang J, Ke H, et al. On low-temperature strength and tensile ductility of bulk metallic glass composites containing stable or shape memory β -Ti crystals. *Acta Mater*, 2022, 222: 117444
- 14 Zhang L, Yan T, Şopu D, et al. Shear-band blunting governs superior mechanical properties of shape memory metallic glass composites. *Acta Mater*, 2022, 241: 118422
- 15 Liu C, Maaß R. Elastic fluctuations and structural heterogeneities in metallic glasses. *Adv Funct Mater*, 2018, 28: 1800388
- 16 Bian X L, Zhao D, Kim J T, et al. Controlling the distribution of structural heterogeneities in severely deformed metallic glass. *Mater Sci Eng-A*, 2019, 752: 36–42
- 17 Şopu D, Scudino S, Bian X L, et al. Atomic-scale origin of shear band multiplication in heterogeneous metallic glasses. *Scripta Mater*, 2020, 178: 57–61
- 18 Feng S, Qi L, Wang L, et al. Atomic structure of shear bands in $\text{Cu}_{64}\text{Zr}_{36}$ metallic glasses studied by molecular dynamics simulations. *Acta Mater*, 2015, 95: 236–243
- 19 Şopu D, Moitzi F, Mousseau N, et al. An atomic-level perspective of shear band formation and interaction in monolithic metallic glasses. *Appl Mater Today*, 2020, 21: 100828

- 20 Guan P, Chen M, Egami T. Stress-temperature scaling for steady-state flow in metallic glasses. *Phys Rev Lett*, 2010, 104: 205701
- 21 Plimpton S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics. *J Comput Phys*, 1995, 117: 1–19
- 22 Mendeleev M I, Sordelet D J, Kramer M J. Using atomistic computer simulations to analyze X-ray diffraction data from metallic glasses. *J Appl Phys*, 2007, 102: 043501
- 23 Ritter Y, Şopu D, Gleiter H, et al. Structure, stability and mechanical properties of internal interfaces in $\text{Cu}_{64}\text{Zr}_{36}$ nanoglasses studied by MD simulations. *Acta Mater*, 2011, 59: 6588–6593
- 24 Scudino S, Şopu D. Strain distribution across an individual shear band in real and simulated metallic glasses. *Nano Lett*, 2018, 18: 1221–1227
- 25 Guan P, Lu S, Spector M J B, et al. Cavitation in amorphous solids. *Phys Rev Lett*, 2013, 110: 185502
- 26 Yuan X, Şopu D, Spieckermann F, et al. Maximizing the degree of rejuvenation in metallic glasses. *Scripta Mater*, 2022, 212: 114575
- 27 Martyna G J, Tobias D J, Klein M L. Constant pressure molecular dynamics algorithms. *J Chem Phys*, 1994, 101: 4177–4189
- 28 Şopu D, Yuan X, Eckert J. Annealing metallic glasses above T_g in order to accelerate the relaxation process in molecular dynamics simulations. *Appl Phys Lett*, 2022, 120: 011904
- 29 Shimizu F, Ogata S, Li J. Theory of shear banding in metallic glasses and molecular dynamics calculations. *Mater Trans*, 2007, 48: 2923–2927
- 30 Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO—The open visualization tool. *Model Simul Mater Sci Eng*, 2010, 18: 015012
- 31 Sheng H W, Luo W K, Alamgir F M, et al. Atomic packing and short-to-medium-range order in metallic glasses. *Nature*, 2006, 439: 419–425
- 32 Peng C X, Şopu D, Song K K, et al. Bond length deviation in CuZr metallic glasses. *Phys Rev B*, 2017, 96: 174112
- 33 Yuan X, Şopu D, Moitzi F, et al. Intrinsic and extrinsic effects on the brittle-to-ductile transition in metallic glasses. *J Appl Phys*, 2020, 128: 125102
- 34 Cheng Y Q, Sheng H W, Ma E. Relationship between structure, dynamics, and mechanical properties in metallic glass-forming alloys. *Phys Rev B*, 2008, 78: 014207
- 35 Wang W H. The nature and properties of amorphous matter (in Chinese). *Progress Phys*, 2013, 33: 177–351 [汪卫华. 非晶态物质的本质和特性. *物理学进展*, 2013, 33: 177–351]
- 36 Jiang M Q, Dai L H. Shear-band toughness of bulk metallic glasses. *Acta Mater*, 2011, 59: 4525–4537
- 37 Jiang M Q, Wilde G, Dai L H. Shear band dilatation in amorphous alloys. *Scripta Mater*, 2017, 127: 54–57
- 38 Guan P F, Wang B, Wu Y C, et al. Heterogeneity: The soul of metallic glasses (in Chinese). *Acta Phys Sin*, 2017, 66: 176112 [管鹏飞, 王兵, 吴义成, 等. 不均匀性: 非晶合金的灵魂. *物理学报*, 2017, 66: 176112]
- 39 Feng S D, Chan K C, Zhao L, et al. Rejuvenation by weakening the medium range order in $\text{Zr}_{46}\text{Cu}_{46}\text{Al}_8$ metallic glass with pressure preloading: A molecular dynamics simulation study. *Mater Des*, 2018, 158: 248–255
- 40 Stolpe M, Kruzic J J, Busch R. Evolution of shear bands, free volume and hardness during cold rolling of a Zr-based bulk metallic glass. *Acta Mater*, 2014, 64: 231–240
- 41 Schuh C A, Lund A C. Atomistic basis for the plastic yield criterion of metallic glass. *Nat Mater*, 2003, 2: 449–452
- 42 Ding J, Patinet S, Falk M L, et al. Soft spots and their structural signature in a metallic glass. *Proc Natl Acad Sci USA*, 2014, 111: 14052–14056
- 43 Ma E. Tuning order in disorder. *Nat Mater*, 2015, 14: 547–552
- 44 Liu W D, Ruan H H, Zhang L C. Atomic rearrangements in metallic glass: Their nucleation and self-organization. *Acta Mater*, 2013, 61: 6050–6060
- 45 Jiang M Q, Wang W H, Dai L H. Prediction of shear-band thickness in metallic glasses. *Scripta Mater*, 2009, 60: 1004–1007
- 46 Xu Q, Şopu D, Yuan X, et al. Interface-related deformation phenomena in metallic glass/high entropy nanolaminates. *Acta Mater*, 2022, 237: 118191
- 47 Hirata A, Kang L J, Fujita T, et al. Geometric frustration of icosahedron in metallic glasses. *Science*, 2013, 341: 376–379
- 48 Hu Y C, Guan P F, Li M Z, et al. Unveiling atomic-scale features of inherent heterogeneity in metallic glass by molecular dynamics simulations. *Phys Rev B*, 2016, 93: 214202
- 49 Smith H L, Li C W, Hoff A, et al. Separating the configurational and vibrational entropy contributions in metallic glasses. *Nat Phys*, 2017, 13: 900–905
- 50 Piaggi P M, Parrinello M. Entropy based fingerprint for local crystalline order. *J Chem Phys*, 2017, 147: 114112

Effect of structural heterogeneity on the shear-band propagation mechanism in soft-hard dual-phase metallic glasses

YUAN XuDong¹, ZHANG Long^{1*}, YAN TingYi^{1,2}, WU Yi^{1,2}, WANG JinHe¹,
FU HuaMeng¹, LI Hong³ & ZHANG HaiFeng^{3*}

¹ Shi-changxu Innovation Center for Advanced Materials, Institute of Metal Research, Chinese Academy of Sciences, Shenyang 110016, China;

² School of Materials Science and Engineering, University of Science and Technology of China, Shenyang 110016, China;

³ School of Metallurgy, Northeastern University, Shenyang 110819, China

*Corresponding authors (ZHANG Long, email: zhanglong@imr.ac.cn; ZHANG HaiFeng, email: zhanghf@mail.neu.edu.cn)

In this paper, the shear band propagation mechanism in the soft-hard heterogeneous metallic glass during tensile deformation is investigated using molecular dynamics simulations. Upon percolating from the soft phase to the hard phase, the shear band will stagnate at the interface between these two phases and alter its propagation direction during subsequent shearing. The structural difference leads to the asynchronous yielding of the soft-hard two phases and consequently causes the discontinuous propagation of the shear band. Furthermore, the inhomogeneous nature of the microstructure in the hard phase gave rise to stress and local entropy heterogeneity, resulting in the predilection of shearing in the areas of high stress and high local entropy. This work deepens the understanding of the shear band propagation mechanism in heterogeneous metallic glasses and provides a foundation for designing high-performance amorphous alloys.

molecular dynamics simulations, metallic glasses, structural heterogeneity, shear bands

PACS: 71.23.Cq, 71.15.Pd, 62.20.Fe, 62.20.Mk

doi: [10.1360/SSPMA-2023-0291](https://doi.org/10.1360/SSPMA-2023-0291)