

# 基于原子体积场拉普拉斯算子对 金属玻璃剪切转变区的预测<sup>1)</sup>

史荣豪<sup>\*,†</sup> 肖攀<sup>\*,2)</sup> 杨荣<sup>\*</sup>

<sup>\*</sup>(中国科学院力学研究所, 北京 100190)

<sup>†</sup>(中国科学院大学工程科学学院, 北京 100049)

**摘要** 剪切转变区 (shear transformation zone, STZ) 作为金属玻璃塑性事件的一个基本特征单元, 已被研究者们逐渐接受, 但 STZ 产生的机制和来源仍具争议. 本文采用分子模拟方法对  $\text{Cu}_{64}\text{Zr}_{36}$  金属玻璃在受简单剪切加载时的变形行为展开了研究. 结果表明, 体系的初始构型与加载后 STZ 的产生是相关的. 虽然原子体积场及其梯度可以用来有效表征金属玻璃中局部原子构型的非均匀性, 但它们与 STZ 产生的区域没有直接明显的对应关系. 基于此, 提出一个新的局域结构参数  $\xi$  来用于金属玻璃中 STZ 产生区域的预测, 它由两部分构成: 原子体积场的拉普拉斯算子和体积场梯度分量的绝对差值. 原子体积场的拉普拉斯算子为负且绝对值较大时, 体积场梯度向量呈现向内指的分布特征, 代表体系中的局域软区; 而体积场梯度分量的绝对差值则用于遴选体积场梯度不同的分布模式. 进一步地, 建立了该结构参数与非仿射位移和剪切局部化三者关系, 发现特定的体积场梯度向量分布模式, 将导致局部剪切增强的非仿射位移场, 从而更容易诱发 STZ 的形成. 相关性分析表明, 该参数与 STZ 区域平均相关性高于 78%, 因此, 该参数能有效用于金属玻璃剪切转变区的预测, 且运用拉普拉斯算子的思想有望应用于金属玻璃力学行为的理论分析.

**关键词** 金属玻璃, 剪切转变区, 非仿射位移, 原子体积, 分子模拟

中图分类号: O344.4 文献标识码: A doi: 10.6052/0459-1879-19-369

## PREDICTION OF SHEAR TRANSFORMATION ZONES IN METALLIC GLASSES BASED ON LAPLACIAN OF ATOMIC VOLUME<sup>1)</sup>

Shi Ronghao<sup>\*,†</sup> Xiao Pan<sup>\*,2)</sup> Yang Rong<sup>\*</sup>

<sup>\*</sup>(Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China)

<sup>†</sup>(School of Engineering Sciences, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China)

**Abstract** Shear transformation zone (STZ), as a basic characteristic unit of plastic events in metallic glasses (MGs), has been widely accepted by researchers, but the source of its origin and activation mechanism are still controversial. Deformation behaviours of  $\text{Cu}_{64}\text{Zr}_{36}$  MGs under simple shear loadings are investigated using molecular simulation method in this paper. The results indicate that the activation locations of STZ are related to the initial configuration of MGs. Though

2019-12-24 收稿, 2020-02-15 录用, 2020-02-15 网络版发表.

1) 国家自然科学基金 (11790292, 11672298, 11432014) 和中国科学院战略性先导科技专项 (B 类)(XDB22040501) 资助项目

2) 肖攀, 副研究员, 主要研究方向: 多尺度计算力学. E-mail: xiaopan@lnm.imech.ac.cn

**引用格式:** 史荣豪, 肖攀, 杨荣. 基于原子体积场拉普拉斯算子对金属玻璃剪切转变区的预测. 力学学报, 2020, 52(2): 369-378

Shi Ronghao, Xiao Pan, Yang Rong. Prediction of shear transformation zones in metallic glasses based on Laplacian of atomic volume.

*Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 2020, 52(2): 369-378

the field of atomic volume and its gradient are a direct representation of the local atomic structural heterogeneity of MGs, they lack an obvious correlation to the regions of STZ activation. A new local structural parameter  $\xi$  is proposed in this paper based on the initial configuration of MG to predict the potential regions of STZ.  $\xi$  is the product of two factors: the Laplacian of atomic volume field (AVF) and the absolute difference between components of the gradient of AVF. Vectors of the AVF gradient present a distribution pattern of pointing inside if the Laplacian of AVF is negatively large, representing the localized soft regions in MGs. The absolute difference of AVF gradient components is used to select different patterns of the AVF gradient distribution. Furthermore, the relationship among structural parameter  $\xi$ , nonaffine displacement and shear localization is established, revealing that only certain patterns of AVF gradient distribution would lead to nonaffine displacements field strengthening shear localization, which is more likely to result in activation of STZs. The correlation analysis shows that the averaged spatial correlation index of  $\xi$  and STZ is larger than 78%, so  $\xi$  can be used as an effective parameter for predicting the activation regions of STZs in MGs. Moreover, the ideology of using Laplacian of local AVF in predicting potential STZ regions in MGs would bridge the analysis between atomic simulations of MGs, the mechanism of STZ activations and the traditional mechanical theory.

**Key words** metallic glasses, shear transformation zones, nonaffine displacements, atomic volume, molecular simulation

## 引 言

金属玻璃作为一种特殊非晶材料, 有着很多优异力学性能<sup>[1]</sup>, 大多是高温液体快冷形成, 其内部还保留类似液体的结构, 但是原子已经被冻结, 没有原子团的大尺度运动<sup>[2]</sup>. 快速冻结的同时也在原子尺度上造成金属玻璃的不均匀性, 有原子相对密集的区域, 也有原子相对稀疏的区域, 密度和模量近似于高斯分布<sup>[3]</sup>. 这种不均匀性是金属玻璃的本质特征<sup>[4]</sup>, 也是导致金属玻璃拥有独特塑性变形行为的重要原因<sup>[5]</sup>. 晶体金属的基本缺陷形式是位错<sup>[6]</sup>, 它具有明显的几何特征. 然而, 由于金属玻璃中原子排列的无序特性, 导致其缺陷的识别存在争议和困难.

为解释非晶的塑性变形机制, 在硬球模型<sup>[7]</sup>基础上, Spaepen<sup>[8]</sup>提出自由体积模型, 认为在外力作用下非晶的塑性变形的过程是原子不断跳到附近的空隙中, 因此自由体积越多的地方就类似于非晶的缺陷. 该模型应用在很多宏观分析中简单有效, 但自由体积模型确定的缺陷却往往在后续加载中没有失稳, 因此将其作为非晶微观塑性变形的核心机制仍存在争议<sup>[9]</sup>. Argon<sup>[10]</sup>进一步提出剪切转变区 (shear transformation zone, STZ) 模型, 认为非晶的塑性变形是局部原子团的剪切变形. Schall 等<sup>[11]</sup>在胶体玻璃实验中观测到原子团的剪切变形, 证实了 STZ 事件. 外界持续的加载会激发很多 STZ 事件, STZ 的相互渗透最终形成剪切带导致宏观的失稳断裂<sup>[12]</sup>. 研究表明, 类似于 Eshelby 夹杂, STZ 呈现出四极非衍射

位移场 (quadrupolar nonaffine displacement field) 特征<sup>[13]</sup>. 但要识别出金属玻璃中哪些区域容易激发 STZ 事件, 在理论上仍不完善, 在实验上更加困难<sup>[2]</sup>.

近年来计算机技术的发展使分子动力学模拟方法广泛应用于金属玻璃研究<sup>[14-20]</sup>. 分子动力学可以追踪每个原子的运动, 清晰地展示金属玻璃内部的原子结构, 再结合数学上的 Voronoi 多面体, 可以得到局部五次对称性. 宏观上, Li 等<sup>[19]</sup>研究了五次对称性和金属玻璃弛豫时间的关系, Zhang 等<sup>[20]</sup>发现一个局部五次对称性的阈值, 超过该阈值金属玻璃就会展现出局部的塑性变形. 微观上, Tian 等<sup>[16]</sup>进一步利用五次对称性定性研究应变梯度和剪切带的关系, 发现高应变梯度有助于形成剪切带, 但实际上应变梯度是源自于金属玻璃本身的非均匀性, 并且五次对称性无法解释 STZ 的形成机理, 因为仅靠构型无法描述原子运动的规律, 还需要考虑原子间的相互作用.

原子间相互作用在计算机模拟中是用势函数来计算的. 如果将金属玻璃的原子视作简谐振子, 可以用势函数计算整个体系的动力学矩阵, 对角化动力学矩阵的模态分析可以得到整个体系的声子谱<sup>[21]</sup>. 大量模拟计算表明金属玻璃低频模态偏离德拜模型, 形成玻色峰<sup>[22-24]</sup>. 这些低频模态为主的原子在体系中是准局域分布的, 具有相对低的激活能, 更容易塑性变形, 通常被称为“软模”<sup>[25-27]</sup>, 与塑性变形密切相关. 宏观上, Yang 等<sup>[23]</sup>采用 Voronoi 多面体法找出玻色峰的方向序, 将玻色峰的方向序和金属玻璃

模量相关联。微观上, Ding 等<sup>[27]</sup>结合 Voronoi 多面体法找到了软模的结构特征, 发现软模主要是一些几何不利构型 (geometrically unfavored motifs, GUMs), 这些构型被视为缺陷。软模在小应变下和 STZ 事件发生区域对应度较好, 但是当应变很大, 比如接近剪切带形成时, 一个 STZ 事件可能涉及过多模态, 软模的效果无法达到像位错一样的准确<sup>[28]</sup>。Ding 等又进一步提出可动体积 (flexible volume), 在与初始 STZ 事件强相关的基础上, 可动体积还和剪切模量线性相关, 但仍然缺乏定量的相关性分析<sup>[29-30]</sup>。梯度算子也是很有用的<sup>[31-33]</sup>, Xu 等<sup>[34]</sup>用应力梯度以及 ARTn (activation-relaxation technique nouveau) 等计算方法, 较准确地定量预测了加载应变小于 5% 的 STZ 事件及其顺序, 但应变大于 5% 的 STZ 事件甚至剪切带未涉及, 并且 ARTn 需要多次求解全局动力学矩阵, 计算时间复杂度太高。另一方面, 通过原子的刚度<sup>[35]</sup>或者动力学矩阵<sup>[13]</sup>可以直接计算出原子的非仿射位移, 但是 STZ 的四极非仿射位移场是如何形成的却不清晰, 其背后的力学机理仍需作进一步地分析。

本文对金属玻璃初始构型的原子体积场 ( $V$ ) 进行局域平均得到平均原子体积场 ( $\bar{V}$ ), 采用其梯度  $\nabla\bar{V}$  和拉普拉斯  $\nabla^2\bar{V}$  作为金属玻璃体系非均匀的特征,  $\nabla^2\bar{V}$  低的区域为局部软区,  $\nabla\bar{V}$  描述软区体积梯度场的局域分布。基于  $\nabla^2\bar{V}$  和  $\nabla\bar{V}$  构造参数  $\xi$ , 通过阐明  $\xi$ 、非仿射位移和 STZ 三者的关联, 来预测金属玻璃中 STZ 形成位置。

## 1 计算模型和方法

本文针对经典的  $\text{Cu}_{64}\text{Zr}_{36}$  金属玻璃体系, 采用分子模拟方法展开机理研究。为考虑不同尺寸对结果的影响, 分别计算了 3 种不同尺寸体系, 它们的尺寸如表 1 所示。其中样本 1 含有 9000 个原子,  $x, y, z$  三方向长分别为  $L_x = 6.0 \text{ nm}$ ,  $L_y = 12.0 \text{ nm}$ ,  $L_z = 2.0 \text{ nm}$ , 3 个方向都采用周期性边界条件, 模型如图 1 所示。体系的  $z$  方向尺寸较小, 以便于对模拟结果进行准二维的结构分析。模拟中采用 EAM 势来描述原子之间的相互作用<sup>[36]</sup>。分子动力学模拟采用 LAMMPS 开源软件包<sup>[37]</sup>, 原子构型结果采用 Ovito 进行可视化<sup>[38]</sup>。

3 种金属玻璃样本均采用相同方法制备。首先生成  $\text{Cu}_{64}\text{Zr}_{36}$  面心立方晶体, 将该晶体在零压下加热到 2500 K 并弛豫 2 ns 得到稳定的高温熔融液体。然后以

$10^{13} \text{ K/s}$  的降温速率将体系急冷至 1 K 并弛豫 100 ps 得到稳定的金属玻璃, 最后通过共轭梯度法进行能量极小化得到 0 K 下  $\text{Cu}_{64}\text{Zr}_{36}$  的金属玻璃结构。图 2 是所生成样品体系的径向分布函数 (radial distribution function, RDF), 具有明显的玻璃态特征。进而对样品进行非热准静态剪切加载 (athermal quasi-static shear, AQS shear), 每一个加载步都对整个体系在  $x$  方向上施加应变为 0.01% 的简单剪切<sup>[13]</sup>, 然后对体系进行能量极小化, 得到当前加载步的平衡状态用于构型和结果分析。

表 1 3 种尺寸参数对照表

Table 1 Parameters of three sizes

Size No.	Number of atoms	$L_x/\text{nm}$	$L_y/\text{nm}$	$L_z/\text{nm}$
1	9000	12.0	6.0	2.0
2	15000	11.2	19.9	1.1
3	25000	18.7	19.9	1.1

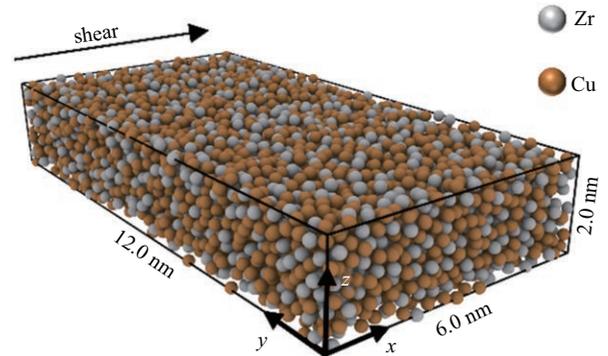


图 1 样品 1 的构型和尺寸

Fig. 1 The configuration and dimensions of sample 1

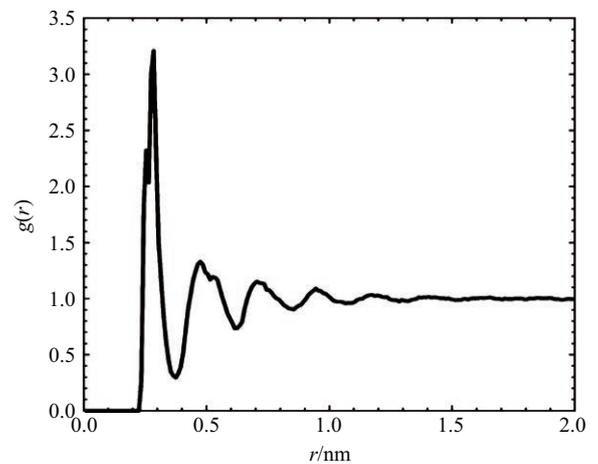


图 2 金属玻璃体系的径向分布函数

Fig. 2 RDF of the prepared metallic glass sample

## 2 结果和讨论

### 2.1 局部原子应变响应

图 3 是样品 1 在剪切加载下的应力应变曲线, 应力最大值出现在应变为 9.0% 附近 (图中红色虚线标注的点). 在应变小于 9.0% 时, 应力已经出现了多个明显的不连续跳动, 这说明体系内有局部屈服事件的发生. 由于金属玻璃变形行为的特殊性, 不同文献所定义的屈服点位置有所不同 [2-3,36], 在本文中, 定义屈服阶段为应力值最大点 (在这里应变为 9.0%) 之后的阶段.

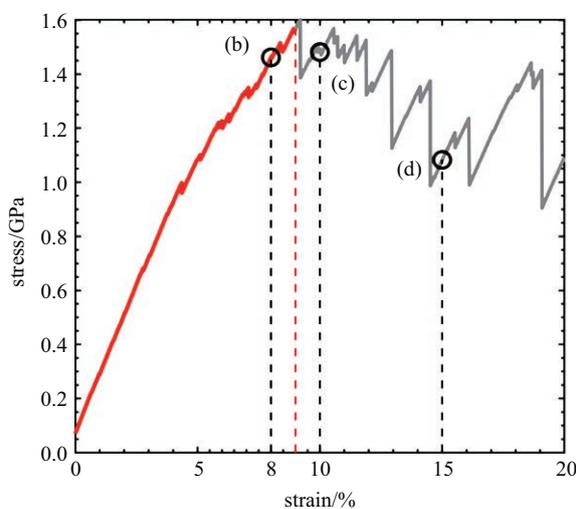


图 3 样品 1 的应力应变曲线

Fig. 3 Stress strain curve of sample 1

局域原子团的剪切变形被称为是 STZ 事件 [10], 并且局域剪切变形的发生让瞬间的宏观模量和应力产生奇异性 [13], 导致应力和能量的不可恢复性跌落 [40], 是金属玻璃在外力作用下塑性流动的载体 [41]. 在微观上寻找经历了剪切变形的 STZ 原子需要对比变形前后局域原子构型的相对变化 [42]. 为研究体系局部变形行为, 本文采用 Mises 原子应变 [43] 来刻画每个原子的邻域变形特性, 其中, 第  $i$  个原子的 Mises 原子应变记为  $\eta_i^{\text{Mises}}$ . 图 4 给出了体系在剪切应变分别为 8.0%, 10.0% 和 15.0% 时  $\eta_i^{\text{Mises}}$  分布图. 从分布图可以看出, 与图 3 的结果相对应, 体系从应变为 9.0% 时进入屈服阶段, 在应变为 15.0% 时, 可以明显看见剪切带.

图 5 曲线分别给出了体系在不同剪切应变下,  $y$  方向上平均原子应变随着剪切加载的演化过程. 从图 4 和图 5 结果可见, 体系进入屈服阶段后, 在

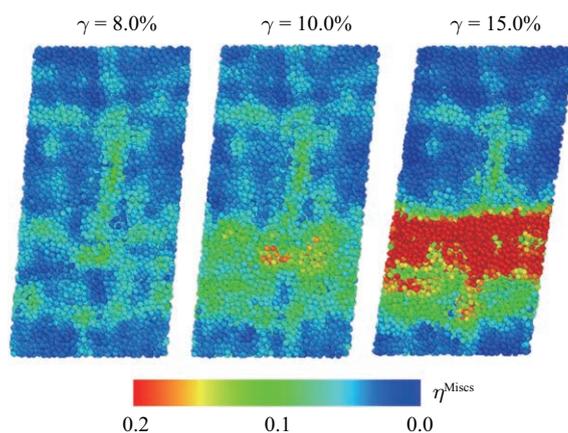


图 4 应变为 8.0%, 10.0% 和 15.0% 时的原子应变分布图

Fig. 4 The distribution of atomic strain when  $\gamma = 8.0\%$ ,  $10.0\%$  and  $15.0\%$

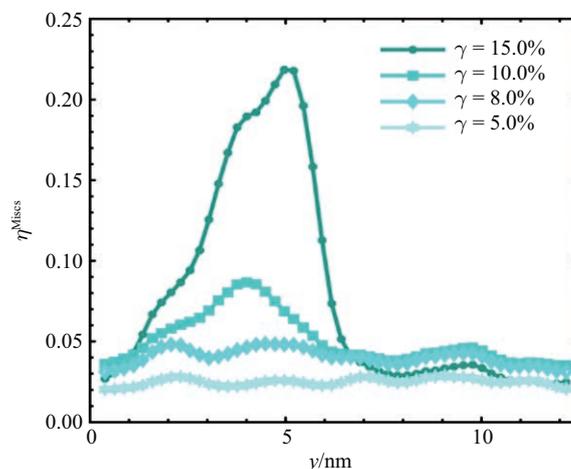


图 5 平均原子应变在  $y$  方向分布图

Fig. 5 The distribution of averaged atomic strain along  $y$  axis

$y = 4.0 \text{ nm}$  附近, 出现了一个明显的峰值, 表明体系在该区间的应变较大, 最后剪切带形成的位置在  $y = 2.0 \text{ nm}$  到  $y = 6.0 \text{ nm}$  之间. 值得注意的是, 在屈服之前剪切应变为 8.0% 时, 在  $y = 5.0 \text{ nm}$  附近已经出现了相对的峰值. 为了找出 STZ 原子, 本文设定一个应变间隔  $\Delta\gamma = 0.1\%$  和阈值  $\Delta\eta_i^{\text{Mises}}$ . 如果存在  $\gamma \in [0.1\%, 9.0\%]$ , 使得原子  $i$  的原子应变改变量满足

$$\Delta\eta_i^{\text{Mises}}(\gamma) = \eta_i^{\text{Mises}}(\gamma) - \eta_i^{\text{Mises}}(\gamma - \Delta\gamma) > \Delta\eta_i^{\text{Mises}} \quad (1)$$

则该原子在应变为  $\gamma$  时经历了 STZ 事件, 将该原子记为 STZ 原子. 图 3 中第一个 STZ 事件具有最低的  $\Delta\eta_i^{\text{Mises}} = 0.005$ , 因此  $\Delta\eta_i^{\text{Mises}}$  取 0.005 可以选出所有的 STZ 原子. 同一个样品重复加载, 其应力应变曲线、STZ 事件和剪切带的位置是相同的 [44]. 因此, STZ 事件以及剪切带和金属玻璃的初始结构有密切

关系. 为建立金属玻璃初始构型与 STZ 形成之间的关联, 需要对体系初始构型的非均匀性进行表征.

## 2.2 局域非均匀性表征

原子体积及其相关参数, 如原子数密度、自由体积, 可以作为金属玻璃局部非均匀性的直接反映. 在分子模拟中, 原子体积一般采用 Voronoi 多面体法进行计算<sup>[29]</sup>, 即原子  $i$  与其近邻各原子间的垂直平分面所包围的多面体的最小体积视为原子体积  $V_i$ . 对每个原子作体积云图 (图 6 左) 并不能直接反映体系的局部非均匀性, 而需要以原子为中心, 取一定的特征尺寸, 对其进行空间平均, 才能有效反映局部体积的分布. Wei 等<sup>[45]</sup> 研究了各种有预测 STZ 能力的参数, 发现它们空间自相关函数的特征尺度都和 STZ 平均尺度差不多. STZ 原子团的平均尺寸为  $1 \sim 1.5 \text{ nm}$ <sup>[46]</sup>, 因此本文以原子  $i$  为球心, 取平均半径  $r_{\text{ave}}$  为  $1.0 \text{ nm}$  进行空间平均, 得到的原子体积的平均值记为  $\bar{V}_i$ .

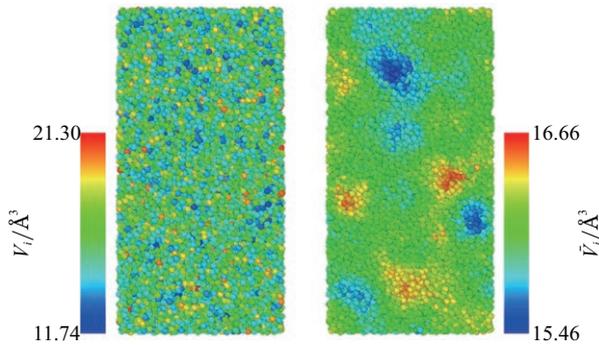


图 6 初始构型  $V_i$  (左) 和  $\bar{V}_i$  (右) 的分布

Fig. 6 The distribution of  $V_i$  (left) and  $\bar{V}_i$  (right) in initial configuration

初始构型原子体积局部平均后得到的  $\bar{V}_i$  分布如图 6 右所示, 具有较好的连续性. 进一步, 可以基于  $\bar{V}_i$  进行数值求导, 获得原子体积的梯度信息, 体积梯度记为  $\nabla \bar{V}_i$ , 计算式如下

$$\nabla \bar{V} = \left( \frac{\partial \bar{V}}{\partial x}, \frac{\partial \bar{V}}{\partial y} \right) = (\bar{V}_x, \bar{V}_y) \quad (2)$$

其中  $\bar{V}_x$  表示  $\bar{V}$  沿  $x$  方向的导数. 图 7 左给出了  $\bar{V}_x$  的分布云图, 图 7 中给出了  $\bar{V}_y$  的分布云图, 图 7 右给出了由式 (1) 得到的 STZ 原子的分布图. 由图 6 和图 7 可知, 原子的平均体积及其梯度分布都与 STZ 的形成位置无明显关联, 这说明虽然原子体积相关的参数是金属玻璃非均匀性的直接反映, 但它们与 STZ 形

成位置难以作简单对应. STZ 的形成与体系内局部原子位移场密切相关, 为了建立 STZ 形成区域与原子体积等参数的关联, 在这里进一步考察了原子非仿射位移场与  $\nabla \bar{V}_i$  的关系.

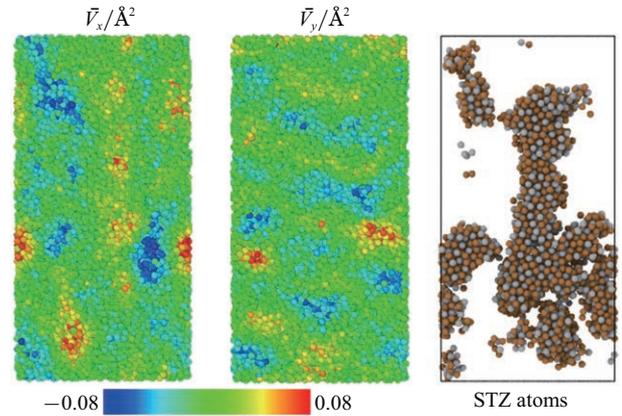


图 7 初始构型  $\bar{V}_x$  (左) 和  $\bar{V}_y$  (中) 的分布以及由式 (1) 确定的 STZ 原子分布 (右)

Fig. 7 The distribution of  $\bar{V}_x$  (left),  $\bar{V}_y$  (middle) in initial configuration and STZ atoms determined by Eq. (1) (right)

## 2.3 原子体积梯度与非仿射位移场的统计关系

对于连续均匀的弹性体系, 在剪切作用下, 其内部的位移场为仿射位移场  $\mathbf{r}^\circ$ . 大量计算表明<sup>[13,47]</sup>, 由于金属玻璃的非均匀性, 内部原子的实际位移场  $\mathbf{r}$  在仿射位移场  $\mathbf{r}^\circ$  的基础上存在非仿射位移场部分  $\mathbf{r}^*$ , 即  $\mathbf{r} = \mathbf{r}^\circ + \mathbf{r}^*$ . 系统剪切应变为  $\gamma$  时的非仿射位移场为

$$\Delta \mathbf{r}^*(\gamma) = \mathbf{r}(\gamma) - \mathbf{r}(\gamma - \Delta\gamma) - \Delta \mathbf{r}^\circ \quad (3)$$

其中  $\Delta \mathbf{r}^\circ = (\Delta\gamma \cdot \mathbf{y}, 0)$ , 为仿射位移增量. 研究表明, 在 STZ 事件发生的应变间隔内, 产生 STZ 处的原子非仿射位移大, 且呈四极漩涡状<sup>[48]</sup>, 这一非仿射位移特征反应出其附近的剪切应变得到加强, 从而出现剪切局部化.

非仿射位移的产生是由于系统原子经过仿射位移后受力并不平衡, 还有残余的仿射力场  $\boldsymbol{\varepsilon}$ . 单个原子的  $\boldsymbol{\varepsilon}$  与  $\mathbf{r}^*$  的关系如下<sup>[13]</sup>

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{jk} = D_{ij} \left. \frac{d\mathbf{r}_i^*}{d\boldsymbol{\varepsilon}_k} \right|_{\boldsymbol{\varepsilon}_k=0} \quad (4)$$

其中  $D_{ij}$  为该原子的局部动力学矩阵. 由式 (4) 可知, 金属玻璃中原子非仿射位移场的大小和方向与体系内部原子排列的非均匀性特征以及外部载荷的加载方向和大小相关. 为了简化分析, 这里考察二维金属

玻璃中一个原子的非仿射位移与其周围非均匀刚度的关系. 设方向 1 和方向 2 为该原子的两个主应变方向.  $k_{1+}$ ,  $k_{1-}$ ,  $k_{2+}$  和  $k_{2-}$  分别表示该原子由于周围局部不均匀性或者对称破缺而感受到的刚度. 由于主应变方向当  $i \neq j$  时  $D_{ij} = 0$ , 所以此时该原子的局部动力学矩阵只有两个非零元素  $D_j = k_{j+} + k_{j-}$ . 假设该金属玻璃在方向  $j$  产生应变  $\varepsilon_j$ , 该原子由于自身附近刚度的不均匀在应变  $\varepsilon_j$  的基础上产生非仿射位移. 在一阶近似下由式 (4) 可得该原子的非仿射位移为

$$r_j^* = \frac{\bar{\varepsilon}_j \varepsilon_j}{D_j} \quad (5)$$

其中  $\bar{\varepsilon}_j$  可以由以下式子算出 [13]

$$\bar{\varepsilon}_j = - \left( \frac{\partial^2 U}{\partial r_j^* \partial r_j^*} \right) \bigg|_{r_j^*} \frac{\partial r_j^*}{\partial \varepsilon_j} = a(k_{j+} - k_{j-}) \quad (6)$$

其中  $a$  为原子间的间距,  $U$  为原子的势能. 由此可以算出该原子的非仿射位移  $r^*$  为

$$r_j^* = \varepsilon_j a \frac{k_{j+} - k_{j-}}{k_{j+} + k_{j-}} \approx \varepsilon_j a^2 \frac{\partial K}{K \partial x_j} \quad (7)$$

其中  $j = 1, 2$  表示不同主方向. 当  $\varepsilon_1 = \gamma_0$  并且  $\varepsilon_2 = -\gamma_0$  时,  $r^*$  与  $\nabla K$  沿轴 1 对称. 在金属玻璃体系中, 原子所受的非均匀刚度场是由于周围邻近原子的不均匀分布而产生的. 从势函数的特性可知, 在平衡态附近, 当邻近原子靠得越近, 其所受等效刚度也会越大. 因此, 原子周围的刚度场梯度与原子体积梯度是负相关的. 由式 (7) 可得  $r_j^* \approx -\varepsilon_j a^2 \nabla V$ ,  $r^*$  与  $\nabla V$  沿轴 2 对称, 即可以近似认为在纯剪切下如图 8 所

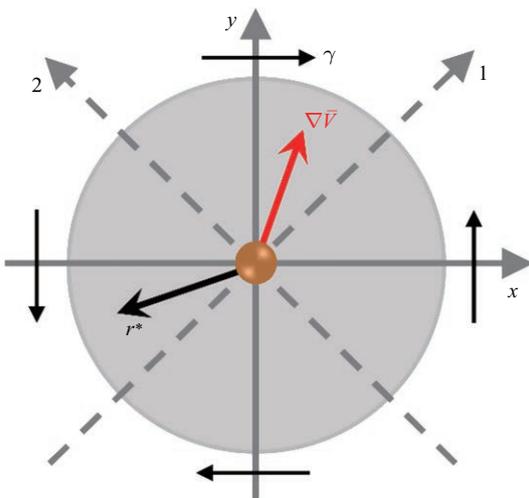


图 8 非仿射位移与非均匀原子体积的关系

Fig. 8 The relationship between nonaffine displacement and the heterogeneous atomic volume

示, 原子的非仿射位移方向与原子体积梯度方向沿  $y = -x$  轴对称. 为了验证这一近似, 对样品中原子的非仿射位移与原子体积梯度  $\nabla V$  的方向进行了统计, 如图 9 所示. 图 9 中统计了剪切带形成前的所有弹性阶段非仿射位移向量与体积梯度沿  $y = -x$  对称后的向量  $-(\bar{V}_y, \bar{V}_x)$  之间夹角  $\hat{\theta}$  的分布. 夹角  $\hat{\theta}$  在 0 附近最多, 表明这个对称关系在统计上成立. 不同曲线是按梯度向量模长为阈值选取, 当梯度向量模长越大时, 夹角  $\hat{\theta}$  在 0 附近越多. 即原子体积梯度值越大, 它与非仿射位移的方向对称性越好.

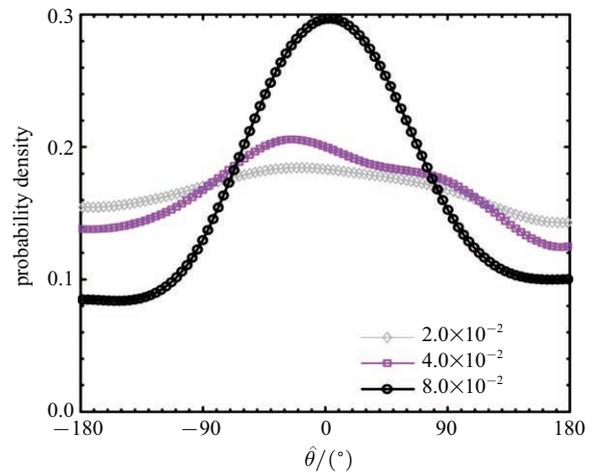


图 9  $-(\bar{V}_y, \bar{V}_x)$  与  $r^*$  的夹角分布

Fig. 9 Distribution of angles between  $-(\bar{V}_y, \bar{V}_x)$  and  $r^*$

## 2.4 原子体积梯度分布特征与剪切局域化

对非晶材料的原子非仿射位移场的计算研究表明 [13], 产生 STZ 处的原子非仿射位移大, 其方向呈四极漩涡状, 表明局部剪切变形得到加强. 从上一节的分析可以看出, 如果非仿射位移呈四极漩涡状, 则相应的原子体积梯度  $\nabla V$  分布如图 10(a) 所示. 从这一结果可以看出, 要使得原子非仿射位移场呈现出一种使得局部剪切变形能得到加强的模式,  $\nabla V$  的分布也要呈现出特定的形式, 而不仅仅是原子体积梯度的模量越大即可, 这也是为什么原子体积梯度与 STZ 形成的区域没有直接的相关性. 进一步的分析可以看出, 图 10(a) 的软区  $\nabla V$  呈现出向内指的特征, 而这正是原子体积梯度场散度的特性, 即当  $\nabla V$  在该区域的散度为负时, 原子非仿射位移场呈现出局部剪切变形加强的模式. 为此, 可以定义  $\nabla V$  的散度

$$\nabla^2 \bar{V} = \nabla \cdot \left( \frac{\partial \bar{V}}{\partial x}, \frac{\partial \bar{V}}{\partial y} \right) = \frac{\partial^2 \bar{V}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \bar{V}}{\partial y^2} \quad (8)$$

即原子体积的拉普拉斯算子, 来表征  $\nabla^2\bar{V}$  的分布特征. 从物理上来看,  $\nabla^2\bar{V}$  为正表示该处的体积梯度向量有向外发散的特征, 而体积梯度向量指向原子体积增大的方向, 表明越往中心位置, 原子体积越小, 即该区域更硬, 反之则更软. 相比梯度  $\nabla\bar{V}$ ,  $\nabla^2\bar{V}$  要求原子体积的变化出现局部化, 而不仅仅是在某一方向上有变化.

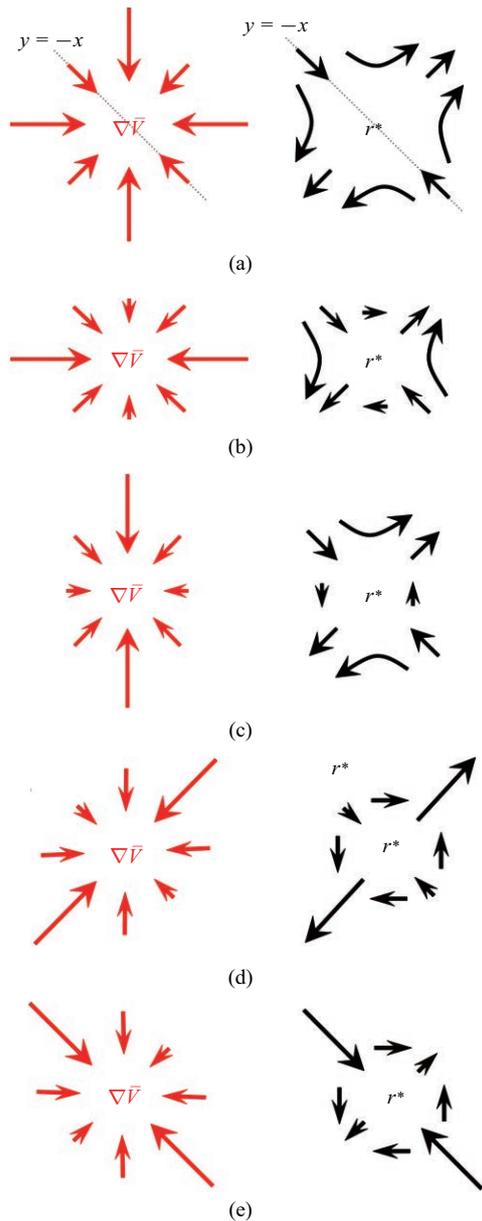


图 10  $\nabla^2\bar{V}$  与  $r^*$  的对应关系. (a) 软区的  $\nabla\bar{V}$  场与四极非仿射位移的对称关系, (b) 仅 x 方向上梯度大, (c) 仅 y 方向上梯度大, (d) 仅  $y = x$  方向上梯度大, (e) 仅  $y = -x$  方向上梯度大

Fig. 10 The relationship between  $\nabla^2\bar{V}$  and  $r^*$ . (a) Symmetry between  $\nabla\bar{V}$  of soft region and quadrupolar nonaffine displacement. (b) Large gradient only in the x direction. (c) Large gradient only in the y direction. (d) Large gradient only in the  $y = x$  direction. (e) Large gradient only in the  $y = -x$  direction

值得注意的是, 即使是  $\nabla^2\bar{V}$  为负, 由于  $\nabla\bar{V}$  的分布特征不一样, 其局部区域的剪切变形也不总是得到加强, 只有特定的  $\nabla\bar{V}$  分布模式才能导致剪切变形局部化, 如图 10(b) 和图 10(c) 所示. 如图 10(b) 左侧所示, 该软区在 x 方向上的梯度大, 而其它方向梯度小, 对应的非仿射位移场如图 10(b) 右侧仍是剪切状. 图 10(c) 和图 10(b) 相似. 而如图 10(d) 左侧所示, 该软区在  $y = x$  方向梯度大, 而其它方向梯度小, 对应的非仿射位移场如图 10(d) 右侧所示是一个以拉伸为主的位移场. 同理, 图 10(e) 的软区在  $y = -x$  方向梯度大, 对应的非仿射位移场如图 10(e) 右侧以压缩为主, 这两种情况都不会导致局部剪切变形得到加强.

### 2.5 基于原子体积拉普拉斯算子对 STZ 的预测

由上一节的分析可知, 只有结合  $\nabla^2\bar{V}$  与  $\nabla\bar{V}$  才能更准确地找出易于产生 STZ 的软区. 当存在  $|\bar{V}_x|$  和  $|\bar{V}_y|$  差值大的软区像图 10(a)~图 10(c) 就容易产生剪切状位移, 而不存在  $|\bar{V}_x|$  和  $|\bar{V}_y|$  差值大的软区如图 10(d) 和图 10(e) 其非仿射位移场就不会导致剪切变形加强. 因此, 构造

$$\text{Diff } \nabla\bar{V} = \sqrt{|\bar{V}_x^2 - \bar{V}_y^2|} \quad (9)$$

将图 10(d) 和图 10(e) 排除. Diff  $\nabla\bar{V}$  结合标量  $-\nabla^2\bar{V}$  最终构成了参数  $\xi$

$$\xi = \frac{-\nabla^2\bar{V} \cdot \text{Diff } \nabla\bar{V}}{\Omega_{\text{ave}}} \quad (10)$$

式中  $\Omega_{\text{ave}}$  为初始结构下所有原子的平均体积, 作为分母使  $\xi$  无量纲化. 基于参数  $\xi$ , 对样品的初始构型进行分析, 来预测 STZ 出现的位置. 图 11(a) 是  $\xi$  的云图, 颜色越红的区域就相对周围越软, 云图上的点为所有 STZ 原子的分布, 可见 STZ 原子与红色区域在空间上有较高的重合度. 图 11(b) 为云图内选取的两个局部放大图, 图中红色箭头就是体积梯度场  $\nabla\bar{V}$ , 很明显图 11(b) A 与 B 分别对应图 10(b) 与图 10(c) 的软区梯度场.

为了验证采用参数  $\xi$  作为金属玻璃缺陷识别的可靠性, 对参数  $\xi$  和 STZ 区域的相关性展开了分析. 为此, 先确定两个阈值:  $\xi_t$  和  $\Delta\eta_t^{\text{Mises}}$ . 其中  $\Delta\eta_t^{\text{Mises}}$  在式 (1) 中用来选出 STZ 原子, 集合  $S_\gamma$  包含在应变间隔为  $[\gamma - \Delta\gamma, \gamma]$  时出现的所有 STZ 原子, 集合 S 包含在应变间隔  $(0, \gamma]$  内出现的所有 STZ 原子, 显然

$$S = \cup_{\gamma=0.1\%}^{9.0\%} S_\gamma \quad (11)$$

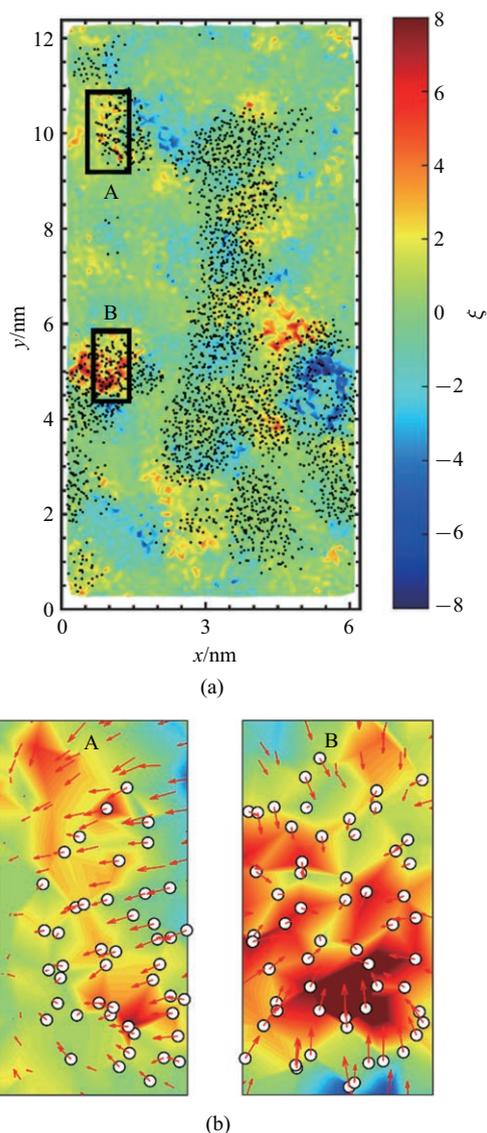


图 11  $\xi$  云图, STZ 原子与  $\nabla V$  的分布图  
Fig. 11 The contour plot of  $\xi$ , the spatial distribution of STZ atoms and  $\nabla V$

记体系原子总数为  $N$ , 集合  $S$  的原子数为  $N_S$ .  $\xi_t$  用来找出软区原子. 记集合  $P$  包含所有  $\xi$  值大于  $\xi_t$  的原子作为可能会经历 STZ 事件的软区原子集, 集合  $P$  的原子数为  $N_P$ . 根据  $\xi$  的云图本文选择  $\xi_t = 2.0 \times 10^{-5}$ .  $S_\gamma \cap P$  是集合  $S_\gamma$  的子集, 包含距离集合  $P$  小于  $3.5 \text{ \AA}$  (图 2 中 RDF 曲线的第一个极小值点, 仅包含了近邻的原子) 的 STZ 原子, 即为应变间隔  $[\gamma - \Delta\gamma, \gamma]$  内预测成功的 STZ 原子集. 图 12 的柱状图是  $N_{S_\gamma \cap P} / N_{S_\gamma}$ , 即每一个应变间隔内的预测准确率. 柱状图中有些应变间隔没有数据是因为该间隔内没有 STZ 事件. 将所有的条形值平均得到平均的预测率为 76.3%. 图 12 的红色曲线是采用的 Manning 等<sup>[26]</sup> 用在软模上

的相关性算法

$$C(\gamma) = \frac{\hat{S}(\gamma) \cdot \hat{P}}{N_P} + \frac{[\mathbf{I} - \hat{S}(\gamma)] \cdot [\mathbf{I} - \hat{P}]}{N - N_P} - 1 \quad (12)$$

其中  $\hat{S}(\gamma) = \{\hat{S}_i(\gamma) \in \{0, 1\}\}$  和  $\hat{P} = \{\hat{P}_i \in \{0, 1\}\}$  都是布尔向量, 当原子  $i$  在  $[\gamma - \Delta\gamma, \gamma]$  内经历了 STZ 事件则  $\hat{S}_i(\gamma) = 1$ , 反之则为 0. 同理, 当原子  $i$  的  $\xi$  值大于  $\xi_t$  时, 则  $\hat{P}_i = 1$ .  $C(\gamma)$  表示了  $\hat{S}$  和  $\hat{P}$  的相关性, 当且仅当  $\hat{S}$  和  $\hat{P}$  完全相关时  $C(\gamma) = 1$ , 当  $\hat{S}$  和  $\hat{P}$  毫无联系时  $C(\gamma) = 0$ . 随着应变的增大, STZ 原子也越来越多,  $C(\gamma)$  也就越来越大, 最终达到 0.75 左右. 表 2 列出了 3 种尺寸的平均  $C(\gamma = 9.0\%)$ , 其中每个  $\bar{C}(\gamma = 9.0\%)$  都是 5 个随机样品平均得到的, 可见基于原子体积场的拉普拉斯对于经典  $\text{Cu}_{64}\text{Zr}_{36}$  金属玻璃缺陷预测平均准确率高于 78%.

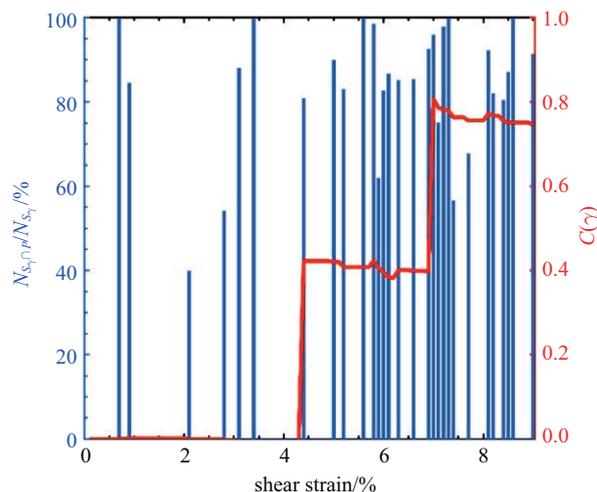


图 12 每一步的准确率 (柱状图) 与累计相关性 (红色曲线)  
Fig. 12 Accuracy in each step (bar plot) and cumulative correlation index (red solid curve)

表 2 3 种尺寸的平均  $C(\gamma = 9.0\%)$

Table 2 Averaged  $C(\gamma = 9.0\%)$  of three sizes

Size No.	Number of atoms	$\bar{C}(\gamma = 9.0\%)$
1	9000	0.78
2	15000	0.82
3	25000	0.79

值得说明的是, 参数  $\xi$  的计算是基于金属玻璃体系的初始构型, 随着剪切加载的进行, STZ 等塑性事件不断出现, 在 STZ 附近的原子构型也将发生变化, 导致局部的受力状态和原子体积场的分布与初始构型发生偏离. 因此, 虽然图 11(a) 中对于样品应变从 0.1% 到 9.0% 之间的 STZ 原子, 具有较好的预测性, 但其中仍有部分参数  $\xi$  比较大的区域并未与 STZ 区域

重叠. 实际上, 如果把统计应变放宽到 10.0%, 会发现该区域正好处在剪切带边缘, 有大量 STZ 原子覆盖, 如图 4. 因此, 如果想要得到更加准确的预测结果, 需要考虑计算每个 STZ 事件对局域构型的影响, 并更新参数  $\xi$ . 另一方面, 图 11 中参数  $\xi$  云图是基于原子体积平均场得到的 (平均半径为 1 nm), 它是对局部区域的表征, 而 STZ 原子是直接由单个原子的应变参数选择出来的. 因此, STZ 原子与参数  $\xi$  云图并非一一对应. 正如 STZ 事件本身描述是原子团的变形行为, 而非只针对某一原子.

从参数  $\xi$  的构成来看,  $\nabla^2\bar{v}$  是与坐标和加载方式无关的, 它是产生剪切局部化的必要条件, 但非充分条件. 对于具体的加载方式, 需要通过式 (10) 来做条件补充. STZ 事件的出现除了依赖于局部原子体积分布形式, 还依赖于外界载荷形式和方向<sup>[49]</sup>, 因此, 式 (10) 是依赖于加载方式的. 如果要将  $\xi$  拓展到其他加载方式, 则需要构造类似于式 (10) 的项, 来基于  $\nabla^2\bar{v}$  所代表的局部软区做进一步的条件补充. 是否存在一种普遍形式的条件补充公式, 需作进一步研究.

虽然本文仅将参数  $\xi$  用在 0 K 下进行金属玻璃的缺陷识别, 但是  $\xi$  仍然可以用在有限温度下. 在给定温度和加载方式下,  $\nabla^2\bar{v}$  与  $\nabla\bar{v}$  均与温度无关,  $\xi$  只是初始构型的函数, 同样可以用来寻找初始构型中的局部软区, 不过此时  $\bar{v}$  还需要在一定时间尺度上进行平均才能得到构型的平衡态.

### 3 总 结

本文采用非热分子模拟方法对三种不同尺寸的  $\text{Cu}_{64}\text{Zr}_{36}$  金属玻璃在受剪切加载时的局域塑性变形行为和 STZ 事件的结构起源展开了准二维的机理研究和简单的理论推导. 在没有随机热振动的干扰下, 体系的初始构型和外界的加载形式是 STZ 产生的决定性因素, 因此可以通过分析金属玻璃初始结构来预测在特定加载形式下 STZ 事件的可能位置. 虽然原子体积场 ( $\bar{v}$ ) 及其梯度 ( $\nabla\bar{v}$ ) 可以用来表征金属玻璃中局部原子构型的非均匀性, 但它们与 STZ 的真实产生区域没有明显对应关系. 由于 STZ 原子有很明显的局部剪切增强性非仿射位移场, 所以本文基于非仿射位移理论, 在二维情况下进一步推导, 发现在纯剪切下原子体积的梯度向量与原子的非仿射位移有对称关系, 并且通过本文分子模拟中的统计结果加以

证实. 基于此, 本文提出一个新的局域结构参数  $\xi$  来预测金属玻璃中 STZ 事件可能的产生区域,  $\xi$  是两个因子的乘积: 原子体积场的拉普拉斯算子 ( $\nabla^2\bar{v}$ ) 和体积场梯度分量的绝对差 ( $\text{Diff } \nabla\bar{v}$ ). 初始构型中  $-\nabla^2\bar{v}$  较大的区域,  $\nabla\bar{v}$  向量的箭头向内汇聚, 表示原子体积向内逐渐变大, 代表体系中的局域软区; 而  $\text{Diff } \nabla\bar{v}$  则用于在五种  $\nabla\bar{v}$  向量分布模式中筛选出指定的三种分布模式. 本文发现  $\text{Diff } \nabla\bar{v}$  值比较大的局部软区, 其特定的  $\nabla\bar{v}$  向量分布模式在对称关系下将导致形成局部剪切增强的非仿射位移场, 从而更容易诱发局部 STZ 事件, 由此建立了  $\xi$ 、非仿射位移和剪切局部化三者关系. 本文进一步采用两种不同的相关性算法对  $\xi$  进行空间相关性分析, 在 3 种不同体系下该参数与 STZ 原子分布区域的平均相关系数均高于 78%. 因此, 在统计意义上, 该参数能对金属玻璃在剪切加载下的局域 STZ 事件进行有效的空间预测; 在理论上, 该参数中的拉普拉斯算子可以进一步深化 STZ 结构起源的理论背景, 并有望应用于金属玻璃力学行为的理论分析.

### 参 考 文 献

- 1 孙奕韬, 王超, 吕玉苗等. 非晶材料与物理近期研究进展. 物理学报, 2018, 67: 126101 (Sun Yitao, Wang Chao, Lü Yumiao, et al. Recent progress of the glassy materials and physics. *Acta Physica Sinica*, 2018, 67: 126101 (in Chinese))
- 2 Wang Z, Wang WH. Flow units as dynamic defects in metallic glassy materials. *National Science Review*, 2019, 6: 304-323
- 3 Wang N, Ding J, Yan F, et al. Spatial correlation of elastic heterogeneity tunes the deformation behavior of metallic glasses. *NPJ Computational Materials*, 2018, 4: 19
- 4 Zhu F, Song S, Reddy KM, et al. Spatial heterogeneity as the structure feature for structure-property relationship of metallic glasses. *Nature Communications*, 2018, 9: 3965
- 5 Qiao JC, Wang Q, Pelletier JM, et al. Structural heterogeneities and mechanical behavior of amorphous alloys. *Progress in Materials Science*, 2019, 104: 250-329
- 6 Taylor GI. The Mechanism of plastic deformation of crystals. Part I. Theoretical. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 1934, 145: 362-387
- 7 Bernal JD. A geometrical approach to the structure of liquids. *Nature*, 1959, 183: 141-147
- 8 Spaepen F. A microscopic mechanism for steady state inhomogeneous flow in metallic glasses. *Acta Metallurgica*, 1977, 25: 407-415
- 9 汪卫华. 非晶态物质的本质和特性. 物理进展, 2013, 33: 177-351 (Wang Weihua. The nature and properties of amorphous matter. *Progress in Physics*, 2013, 33: 177-351 (in Chinese))
- 10 Argon AS. Plastic deformation in metallic glasses. *Acta Metallurgica*, 1979, 27: 47-58

- 11 Schall P, Weitz DA, Spaepen F. Structural rearrangements that govern flow in colloidal glasses. *Science*, 2007, 318: 1895-1899
- 12 Sun BA, Wang WH. The fracture of bulk metallic glasses. *Progress in Materials Science*, 2015, 74: 211-307
- 13 Maloney CE, Lemaître A. Amorphous systems in athermal, quasistatic shear. *Physical Review E*, 2006, 74: 016118
- 14 Hu YC, Guan PF, Wang Q, et al. Pressure effects on structure and dynamics of metallic glass-forming liquid. *The Journal of Chemical Physics*, 2017, 146: 024507
- 15 Wu YC, Wang B, Hu YC, et al. The critical strain - A crossover from stochastic activation to percolation of flow units during stress relaxation in metallic glass. *Scripta Materialia*, 2017, 134: 75-79
- 16 Tian ZL, Wang YJ, Chen Y, et al. Strain gradient drives shear banding in metallic glasses. *Physical Review B*, 2017, 96: 094103
- 17 Wei D, Yang J, Jiang MQ, et al. Assessing the utility of structure in amorphous materials. *The Journal of Chemical Physics*, 2019, 150: 114502
- 18 Hu YC, Tanaka H, Wang WH. Impact of spatial dimension on structural ordering in metallic glass. *Physical Review E*, 2017, 96: 022613
- 19 李茂枝. 非晶合金及合金液体的局域五次对称性. *物理学报*, 2017, 66: 176107 (Li Maozhi. Five-fold local symmetries in metallic liquids and glasses. *Acta Physica Sinica*, 2017, 66: 176107 (in Chinese))
- 20 Zhang Q, Li QK, Zhao S, et al. Structural characteristics in deformation mechanism transformation in nanoscale metallic glasses. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2019, 31: 455401
- 21 Fultz B. Vibrational thermodynamics of materials. *Progress in Materials Science*, 2010, 55: 247-352
- 22 Chen K, Ellenbroek WG, Zhang Z, et al. Low-Frequency Vibrations of Soft Colloidal Glasses. *Physical Review Letters*, 2010, 105: 025501
- 23 Yang J, Wang YJ, Ma E, et al. Structural parameter of orientational order to predict the Boson vibrational anomaly in glasses. *Physical Review Letters*, 2019, 122: 015501
- 24 Baggioli M, Zaccane A. Universal origin of boson peak vibrational anomalies in ordered crystals and in amorphous materials. *Physical Review Letters*. 2019, 122: 145501
- 25 Widmer-Cooper A, Perry H, Harrowell P, et al. Irreversible reorganization in a supercooled liquid originates from localized soft modes. *Nature Physics*, 2008, 4: 711-715
- 26 Manning ML, Liu AJ. Vibrational modes identify soft spots in a sheared disordered packing. *Physical Review Letters*, 2011, 107: 108302
- 27 Ding J, Patinet S, Falk ML, et al. Soft spots and their structural signature in a metallic glass. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 2014, 111: 14052-14056
- 28 Rottler J, Schoenholz SS, Liu AJ. Predicting plasticity with soft vibrational modes: From dislocations to glasses. *PHYSICAL REVIEW E*, 2014, 89: 42304
- 29 Ding J, Cheng YQ, Sheng H, et al. Universal structural parameter to quantitatively predict metallic glass properties. *Nature Communications*, 2016, 7: 13733
- 30 Fan Z, Ding J, Li QJ, et al. Correlating the properties of amorphous silicon with its flexibility volume. *Physical Review B*, 2017, 95: 144211
- 31 时北极, 何国威, 王士召. 基于滑移速度壁模型的复杂边界湍流大涡模拟. *力学学报*, 2019, 51(3): 754-766 (Shi Bei, He Guowei, Wang Shizhao. Large-eddy simulation of flows with complex geometries by using the slip-wall model. *Lixue Xuebao/Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 2019, 51: 754-766 (in Chinese))
- 32 孟春宇, 汤正俊, 陈明祥. 基于中间构形的大变形弹塑性模型. *力学学报*, 2019, 51(1): 182-191 (Meng Chunyu, Tang Zhengjun, Chen Mingxiang. A large deformation elastoplastic model based on the intermediate configuration. *Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 2019, 51(1): 182-191 (in Chinese))
- 33 刘静, 李杰, 张恒. 基于速度梯度张量特征值的陷窝内旋涡分析. *力学学报*, 2019, 51(3): 826-834 (Liu Jing, Li Jie, Zhang Heng. Dimple's Vortex analysis based on eigenvalue of velocity gradient tensor. *Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 2019, 51(3): 826-834 (in Chinese))
- 34 Xu B, Falk ML, Li JF, et al. Predicting shear transformation events in metallic glasses. *Physical Review Letters*, 2018, 120: 125503
- 35 DiDonna BA, Lubensky TC. Nonaffine correlations in random elastic media. *Physical Review E*, 2005, 72: 066619
- 36 Cheng YQ, Ma E, Sheng HW. Atomic level structure in multicomponent bulk metallic glass. *Physical Review Letters*, 2009, 102: 102101
- 37 Plimpton S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics. *Journal of Computational Physics*, 1995, 117: 1-19
- 38 Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO-the Open Visualization Tool. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2010, 18: 7
- 39 Wang B, Luo L, Guo E, et al. Nanometer-scale gradient atomic packing structure surrounding soft spots in metallic glasses. *npj Computational Materials*, 2018, 4: 41
- 40 Maloney C, Lemaître A. Universal breakdown of elasticity at the onset of material failure. *Physical Review Letters*, 2004, 93: 195501
- 41 Wang WH. Correlation between relaxations and plastic deformation, and elastic model of flow in metallic glasses and glass-forming liquids. *Journal of Applied Physics*, 2011, 110: 053521
- 42 Falk ML, Langer JS. Dynamics of viscoplastic deformation in amorphous solids. *Physical Review E*, 1998, 57: 7192-7205
- 43 Shimizu F, Ogata S, Li J. Theory of Shear Banding in Metallic Glasses and Molecular Dynamics Calculations. *Materials Transactions*, 2007, 48: 2923-2927
- 44 Hu YC, Guan PF, Li MZ, et al. Unveiling atomic-scale features of inherent heterogeneity in metallic glass by molecular dynamics simulations. *Physical Review B*, 2016, 93: 214202
- 45 Wei D, Yang J, Jiang MQ, et al. Revisiting the structure-property relationship of metallic glasses: Common spatial correlation revealed as a hidden rule. *Physical Review B*, 2019, 99: 014115
- 46 Zink M, Samwer K, Johnson WL, et al. Plastic deformation of metallic glasses: Size of shear transformation zones from molecular dynamics simulations. *Physical Review B*, 2006, 73: 172203
- 47 Zaccane A, Scossa-Romano E. Approximate analytical description of the nonaffine response of amorphous solids. *Physical Review B*, 2011, 83: 184205
- 48 Şopu D, Stukowski A, Stoica M, et al. Atomic-level processes of shear band nucleation in metallic glasses. *Physical Review Letters*, 2017, 119: 195503
- 49 Gendelman O, Jaiswal PK, Procaccia I, et al. Shear transformation zones: State determined or protocol dependent? *EPL*, 2015, 109: 16002