



# 动态加载下非晶合金的塑性事件演化及非近邻相互作用

唐晓畅<sup>1,2\*</sup>, 邓杰仁<sup>1</sup>, 莫泳晖<sup>1</sup>, 孟令怡<sup>1</sup>, 姚小虎<sup>1\*</sup>

1. 华南理工大学土木与交通学院, 广州 510640;

2. 中国科学院力学研究所, 非线性力学国家重点实验室, 北京 100080

\*联系人, 唐晓畅, E-mail: tangxc@scut.edu.cn; 姚小虎, E-mail: yaoxh@scut.edu.cn

收稿日期: 2023-08-25; 接受日期: 2023-10-19; 网络出版日期: 2024-04-29

国家自然科学基金(编号: 12232006, 12172138, 12202464, 11925203)、广东省基础与应用基础研究基金(编号: 2022B1515120044)、中国博士后科学基金(编号: 2022M721191)、非线性力学国家重点实验室开放基金(编号: LNM202308)和中央高校基本科研业务费(编号: 2022ZYGXZR114)资助项目

**摘要** 于无序中觅有序, 于繁复间见真章. 这是众多非晶材料研究者毕生的追求. 非晶合金是基于现代冶金技术和熵调控理念, 通过抑制合金熔体结晶以保持液体无序结构的一类新型金属材料. 良好的综合性能使其在国防军事、航空航天、轨道交通等战略核心领域都具有广阔的应用前景. 这些领域常要求结构装备能够承受连续冲击载荷, 因此材料在复杂载荷作用下的动力学响应和损伤演化过程是研究者关注的首要问题. 本文尝试从动态载荷的统一视角出发, 梳理非晶合金中的塑性事件演化及相互作用方面的研究发展脉络. 通过明确基本单元对系统所处外界环境的响应, 及其与宏观统计量之间的关联, 加深对非晶体系在动载下涌现出的新现象和新机制的理解. 最终希望能借助微细观机理研究明确技术发展方向, 探明现象和机制背后蕴含的底层调控空间.

**关键词** 非晶合金, 损伤演化, 数值模拟

**PACS:** 62.20.-x, 62.30.+d, 62.50.+p, 62.80.+f

## 1 引言

材料与人类文明的发展息息相关, 从石器时代, 到铜器、铁器时代, 生产工具的每次更新换代都会显著改变历史的发展进程. 现代国防军事、航空航天、轨道交通等战略核心领域的发展, 更是离不开材料科学的进步和创新. 近几十年来, 国内外不断有新型高性能先进材料涌现, 非晶合金<sup>[1,2]</sup>作为其典型代表, 以独

特的设计理念及优异的材料性能得到了学界和业界的广泛关注<sup>[3]</sup>.

非晶合金是基于现代冶金技术——快速凝固技术和熵调控理念——抑制合金熔体结晶, 进而保持液体无序结构所得到的一类新型金属材料. 非晶合金以及同样基于熵调控理念制造的高熵合金, 把金属材料的强度、韧性<sup>[4]</sup>和抗辐照、抗腐蚀能力<sup>[5]</sup>提高到了新的高度, 在能源、航天、生物医药、消费电子等高新技

**引用格式:** 唐晓畅, 邓杰仁, 莫泳晖, 等. 动态加载下非晶合金的塑性事件演化及非近邻相互作用. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2024, 54: 254602  
Tang X C, Deng J R, Mo Y H, et al. Plastic event evolution and nonadjacent interaction of amorphous alloys under dynamic loading (in Chinese). Sci Sin-Phys Mech Astron, 2024, 54: 254602, doi: 10.1360/SSPMA-2023-0301

术领域都拥有广阔的应用前景. 在国防军事领域, 非晶合金独特的剪切自锐性<sup>[6]</sup>和较低的燃烧激活能<sup>[7]</sup>, 使其得以胜任反坦克穿甲弹和固体推进剂等武器、空天装备方面的角色. 良好的综合性能又使其能在严酷的冷热循环、高能粒子辐照等复杂太空环境中表现出高稳定性, 有望作为空间反射镜、卫星天线展开臂等机构的关键部件. 关于非晶合金体系力学特性的研究具有重要的理论价值和实际用途, 是材料科学与结构工程相互交叉、相互渗透的重要前沿方向和重大基础性问题.

空天、国防领域常要求结构装备能够承受连续冲击载荷, 因此材料在复杂载荷作用下的动态力学响应和损伤演化过程是研究者关注的首要问题<sup>[8]</sup>. 本文在第2节中首先介绍了3个相对独立发展、实则存在共性的研究领域, 尝试从动态载荷的统一视角出发, 理解非晶体系在动载下涌现出的新现象和新机制. 另一方面, 组成材料的基本单元间的相互作用决定了材料内部的基本结构, 再加上跨尺度过程中各层级涌现出的新机制, 两者共同决定了材料在宏观尺度的综合响应. 因此, 第3节从非晶合金体系塑性变形的基本单元和基本单元间的相互作用两方面展开介绍. 这一领域的研究任务是明确基本单元对系统所处外界环境的响应, 及其与宏观统计量之间的关联. 在此基础上探明现象和机制背后蕴含的底层调控空间, 以求实现理论对实践应用的反哺.

## 2 动态加载下的涌现与演化

### 2.1 振荡系统的动力学行为

振荡(Vibration)是指系统在平衡点附近的周期性往复运动. 当系统在时变扰动下发生受迫振荡时常表现出独特的动力学行为, 吸引了众多非晶材料和颗粒物理学家<sup>[9]</sup>的关注. 近期, 周期性振荡加载被广泛应用于玻璃转变的研究中<sup>[10-17]</sup>. 深圳大学马将团队<sup>[18,19]</sup>通过高频加载(应变率 $\sim 10^3/s$ ), 以远低于室温屈服应力的载荷幅值(12 MPa)在非晶合金中诱发了超塑性变形, 并探索了将非晶合金的这一特性应用于金属、陶瓷黏合剂等方面的可行性<sup>[20,21]</sup>. 这一技术也可用于触发晶体的超快非晶化<sup>[22]</sup>, 并通过循环周期控制晶体-非晶转变比例. 背后的机制被归结为动态加载下体积应变的快速累积, 原子尺度的体涨效应降低了玻璃转变

的激活能垒, 提高了样品中的原子迁移率, 促进了材料的塑性变形(图1). 这一技术与非晶薄膜的超声焊接<sup>[23]</sup>不同, 后者主要利用了非晶表面的超快动力学. 此外, 这一效果还与非晶中的结构和动力学非均匀性有关, 具有较高流动能力的软区可能更容易被激活<sup>[17]</sup>. 这些技术手段的进步无疑拓展了非晶合金的无序结构和流动成型能力在材料设计中的运用空间.

与之相反的非晶-晶体转变过程早在2005年Ichit-subo等人<sup>[24]</sup>揭示非晶合金非均匀性的著名文章中就已出现. 这种相较而言能量更低的超声波退火技术常被用于消除工件表面的残余应力. 这提示, 调整振荡加载的载荷幅值可以得到截然不同的调控效果. 这一现象同样在分子动力学模拟中出现. Lacks和Osborne<sup>[25]</sup>研究了非晶体系在单次剪切循环过程中的结构演变行为, 并发现对于较小的剪切应变幅值, 循环结束后体系往往会进入比之前能量更低的状态, 类似于老化效果, 而较大的应变幅值带来的则是能量更高的回春效果. 这一转变的临界振幅与体系的退火程度<sup>[14,15,26,27]</sup>和系统尺寸<sup>[28-30]</sup>有关, 初始势能较低的样品往往会更容易恢复活力. Sastry课题组<sup>[10,29]</sup>在非晶体系的对称剪切循环过程中, 同样观察到了随应变幅值提升系统行为从局域稳态到扩散稳态的转变. 小应变循环会将系统移动到不同状态, 而大应变循环会使系统远离初始状态. 轻微的振荡倾向于使构型致密化, 但剧烈的振荡则反而会使构型更稀疏. 此后, Regev等人<sup>[31]</sup>又在振荡剪切系统中观察到了非晶体系的混沌行为. 他们发现在若干小振幅周期后, 系统势能会进入循环, 演化为周期性极限环<sup>[32]</sup>. 这意味着体系中的粒子在多次加载-卸载过程中沿相同轨迹运动, 即结构重排是可逆的. 随着应变振幅增大, 系统进入周期性循环的时刻不断推迟. 直到达到临界振幅, 系统将不再进入极限环, 而是表现出混沌行为(正的李雅普诺夫指数, Lyapunov Exponent). 由于他们观察到的临界振幅和简单剪切的屈服应变很接近, 所以他们推测, 非晶体系的塑性屈服是混沌行为的结果. 这种局部不可逆重排与非晶固体中雪崩的相关性也在此前的胶体系统实验中得到证实<sup>[33,34]</sup>. 近期, Shang等人<sup>[35]</sup>又进一步研究了非对称循环剪切加载<sup>[28]</sup>下的非晶塑性行为, 指出了塑性事件耗竭引起的局部势能面不对称可在材料中引入各向异性的塑性响应. 利用机械振荡在结构老化和年轻化间进行调节<sup>[36]</sup>, 已逐渐成为一种新型的材料性能调控思路.

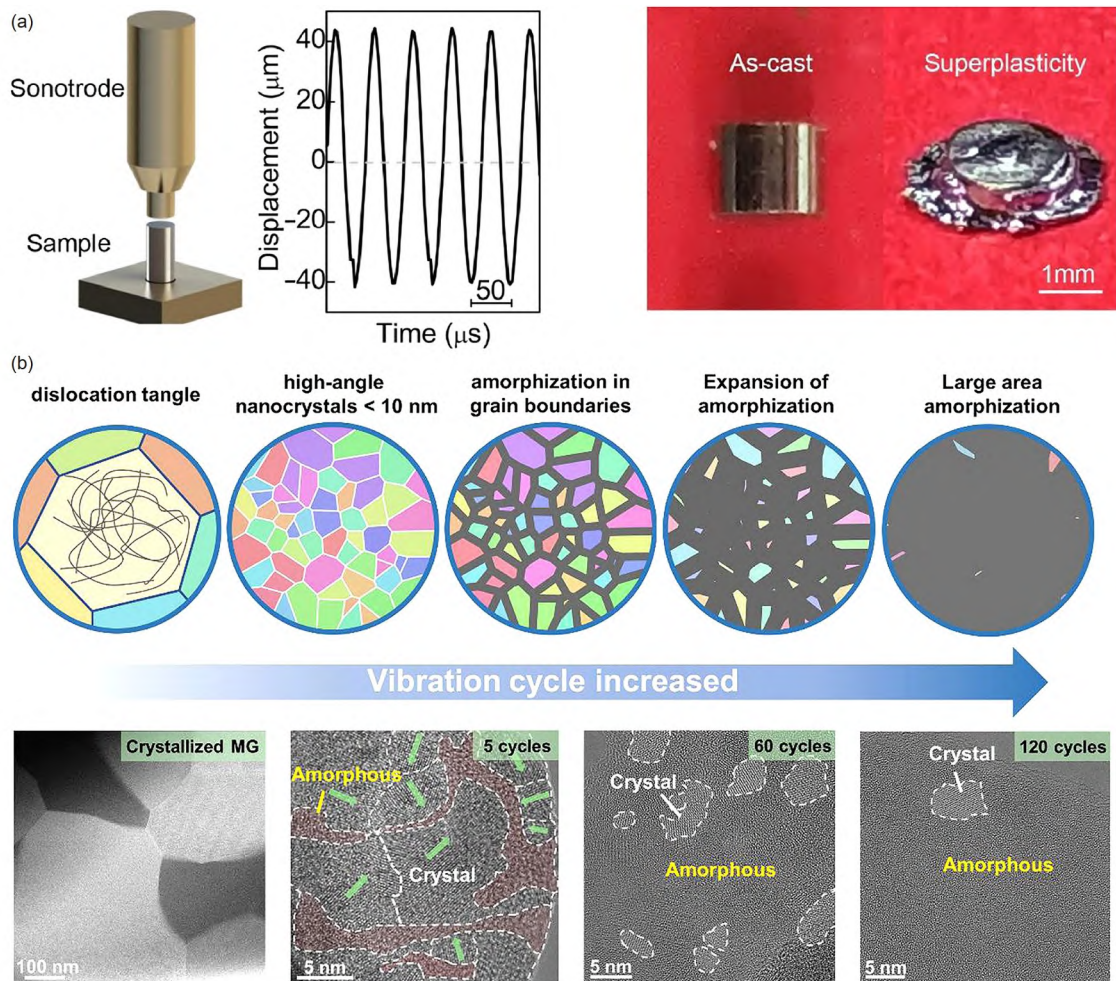


图 1 (网络版彩图) 超声振动诱导非晶合金中的超塑性流动(a)<sup>[18]</sup>和晶体-非晶转变(b)<sup>[22]</sup>

Figure 1 (Color online) Ultrasonic vibration induced (a) superplastic flow in amorphous alloys [18] and (b) crystal-amorphous transition [22].

## 2.2 应力波加载下的材料损伤演化

当载荷以极高的速率施加在物体上时, 扰动会以应力波的形式传播出去. 不同加载模式的区别主要反映在应力波幅值、频率和作用时间上, 常规Hopkinson杆和轻气炮对应于高应力幅值、单脉冲、短作用时长的应力波加载, 上一节提到的高频加载对应于低应力幅值、多脉冲、长作用时长的情况.

应力波加载下材料的动态力学响应与准静态加载下的有明显区别. 一方面, 相关物理量在极短时间尺度内发生数量级的跃变, 同时显著的惯性效应导致应力波传播和相互作用不可忽略, 进而带来损伤演化和断裂机制的差异. 前期压缩阶段的应变局域化会显著影

响后续拉伸阶段的细观损伤演化<sup>[37]</sup>, 加速材料的动态失效进程. 这带来了一种随冲击速度提升自发产生的“韧脆转变”现象, 表现为低速下的韧窝形貌和高速下独特的杯锥式断口(Cup-cone)<sup>[38]</sup>. 目前研究者们已经认识到杯锥的形成是循序渐进的. 初始成核发生在杯锥顶点, 后续损伤沿圆锥面继续演化. 这表明非晶体系的动态损伤演化在时间和空间上都存在非均匀性. 初始成核源的空间分布以杯锥结构的形式得以保存, 为非晶体系的定量统计提供了理想的平台. 它将不同的动态力学性能指标与微细观损伤演化过程更为精确地联系起来, 可获取常规手段无法得到的物理机制和规律. 因此, 通过开展基于断口形貌表征的细观统计分析, 发现冲击速度提升带来的初始成核源密度增大

和层裂强度提高主要由应变率控制<sup>[39]</sup>, 因此两者虽然存在相关性, 但并不强耦合. 本课题组此前撰写的另一篇综述<sup>[40]</sup>对这一领域进行了更为详细的介绍. 由于目前关于这一“韧脆转变”的研究主要在铅基非晶合金体系中开展, 这一现象的普遍性仍未得到验证. 但可以预期, 对于具有不同屈服强度的非晶体系, 发生韧脆转变的临界速度以及成核密度的演化规律将有所区别(图2)<sup>[41]</sup>. 对于具有不同塑性变形能力的体系, 孔洞与剪切带模式的相互竞争和转变机制则仍不明确. 有意思的是, 与杯锥结构类似的现象也在晶体材料中被观察到. Grégoire和Ponga<sup>[42]</sup>通过分子动力学模拟发现, HCP镁单晶体系由于存在先天滑移系, 只需预制孔洞就可以激活六棱锥形的滑移面. 从非晶到高熵合金<sup>[43-45]</sup>再到单晶<sup>[46-49]</sup>, 这种无序度变化带来的材料动态行为变化, 也是值得研究者关注的问题.

另一方面, 材料的动态损伤演化过程耦合了宽广的温度和应变率范围, 涉及复杂的应力状态, 带来了纷繁复杂, 甚至互相矛盾的研究结果. 其中既涉及纳米孔洞成核<sup>[50]</sup>和绝热剪切带形核<sup>[51]</sup>, 又包含后续剪切带内的孔洞演化<sup>[52]</sup>和孔洞边界的塑性流动<sup>[53]</sup>. 成核源既包含冷却过程形成的初始类液区缺陷<sup>[24]</sup>, 也涉及加载过程动态激发的流变缺陷<sup>[54]</sup>. 基本塑性事件可细分为剪切、体涨和旋转三种模式<sup>[55]</sup>, 更细致的理论还应考虑动态变形下的惯性效应<sup>[56-59]</sup>. 后续损伤演化过程

中也存在多种机制的竞争, 自由体积的聚集会显著降低孔洞形核的阈值、加速损伤演化进程<sup>[60,41]</sup>, 而纳米孔洞的形核又可能会反过来抑制周围基体的自由体积演化<sup>[61]</sup>. 多种机制的耦合效应带来了诸多机遇, 呼吁研究者进一步探索非晶体系在动态加载下的塑性流变范式和失效、断裂模式的转变机制.

### 2.3 脉冲电流中的力电耦合效应

前面两小节介绍了利用常规动态加载手段开展的非晶塑性流变和损伤演化机制研究, 但实际上脉冲载荷广泛存在于多种物理场中, 并不局限于机械加载这一种方式. 下面以集成电路和机械加工领域关于电迁移和电塑性的研究为例, 介绍通过电场方式引入应力脉冲的思路.

20世纪随着集成电路的发展, 电迁移下封装电路的失效问题日益凸显. 导线中的电流会带来热-磁-力耦合的多重效应<sup>[62,63]</sup>, 包括电场力和电子风力带来的电迁移效应<sup>[64]</sup>、焦耳热带来的热软化效应、缺陷附近电荷不平衡导致的原子键变化、感应磁场带来的位错脱钉等<sup>[65,66]</sup>. 虽然单个电子质量极小, 但只要电流密度和通电时间足够, 电子轰击原子核带来的动量交换也会引起不可忽视的质量输运, 进而在导线内部形成空隙或小丘, 诱发断路或短路现象. 对于集成电路而言这是绝对需要避免的, 但对于工程结构件而言, 电

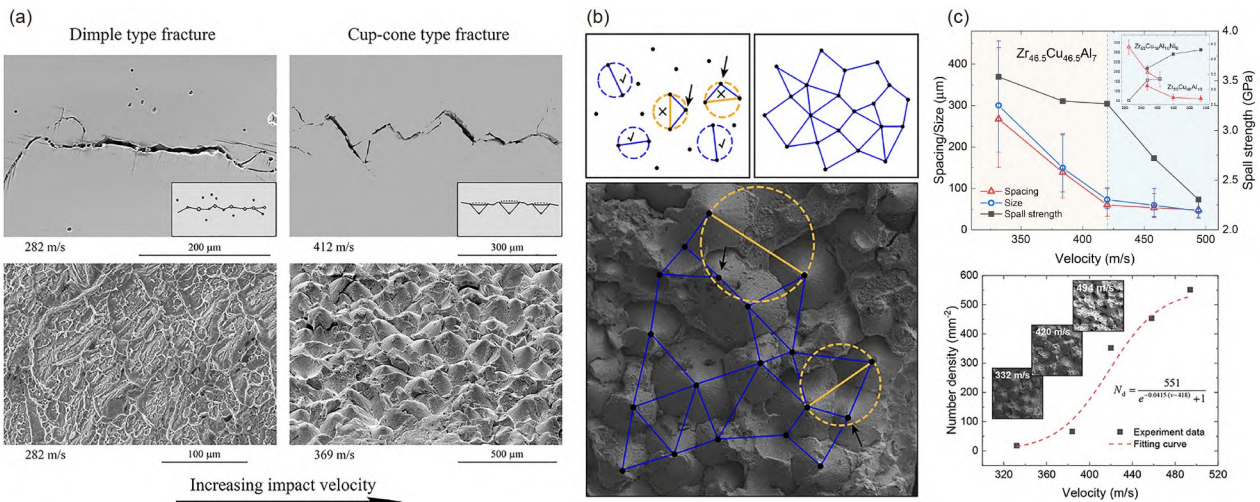


图2 (网络版彩图) (a) 随冲击速度提升的自发“韧脆转变”现象<sup>[41]</sup>; (b) 相邻杯锥结构的定义和统计方法<sup>[39]</sup>; (c) 杯锥间距、尺寸以及相应的成核密度随冲击速度的演化规律<sup>[39]</sup>

Figure 2 (Color online) (a) Spontaneous “ductile brittle transition” phenomenon with increasing impact velocity [41]. (b) Definition and statistical methods of adjacent cup-cone structures [39]. (c) Evolution of cup-cone spacing, size, and corresponding nucleation density with impact velocity [39].

迁移诱导的裂纹和微孔洞愈合<sup>[67-70]</sup>则具有明显的应用价值, 却还未被充分开发利用。

目前该技术主要应用在机械制造方面. 航空用途的高强钛、镁、铝合金等常因硬度过大而难以加工, 因此许多研究尝试在压铸过程中给工件通电, 利用电迁移和焦耳热效应, 降低材料强度并提升塑性, 便于构件的一体化成型<sup>[71]</sup>. Johnson等人<sup>[72]</sup>利用电脉冲的均匀加热特性, 规避非晶合金升温过程中的结晶行为. 华中科技大学柳林团队<sup>[73]</sup>在非晶合金加载过程中引入脉冲电流诱导动态回春, 从而扩大流变区域、推动整体的均匀变形. Ding等人<sup>[74]</sup>在脉冲电处理的试样中观察到了压缩塑性的提升, 并将其归结为电场诱导的壳层原子间电荷转移在加剧团簇畸变方面发挥了作用. 在晶体领域中, Minor课题组<sup>[75]</sup>则利用钛铝合金的反常热效应, 发现施加脉冲电流不但能够提升塑性, 还可以显著提高材料强度, 这表明存在焦耳热以外的力电耦合效应. 最近, 浙江大学<sup>[76]</sup>和加拿大多伦多大学<sup>[77]</sup>的研究者都通过透射电子显微镜直接观察到了电场作用下位错线的往复运动, 这也是无法通过原子热运动实现的效果(图3).

脉冲电流与稳定电流的不同之处是引入了周期性变化的脉冲载荷. 每个通-断电周期都相当于加载-卸

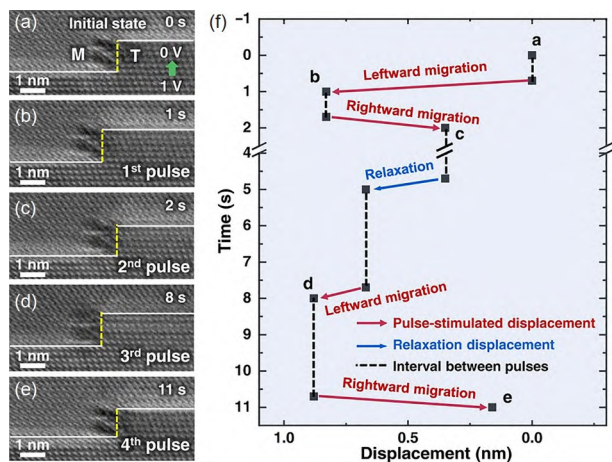


图3 (网络版彩图) (a)–(e)电脉冲作用下非共格孪晶界的非定向迁移<sup>[76]</sup>; (f) 孪晶界迁移过程示意图(黑色虚线表示脉冲之间的间隔, 红色和蓝色箭头分别表示电脉冲和弛豫下的迁移距离和方向)<sup>[76]</sup>

**Figure 3** (Color online) (a)–(e) Non-directional migration of incoherent twin boundary under electrical pulse [76]. (f) Schematic diagram of twin boundary migration (The black dash lines represent the intervals between pulses. The red and blue arrows represent the migration distance and direction under electropulsing and relaxation, respectively) [76].

载过程, 使原子围绕平衡位置发生热振动外的额外振动, 因此高频脉冲电流也可看作一种非常规的应力波加载方式, 虽然不可避免地会引入其他效应. 与常规机械波加载不同, 其扰动程度与试样中的局部结构、材料非均匀性有关, 存在定点调控、定向优化的可能性. 从凝聚态物理的角度看, 无论升高温度还是施加载荷, 都会促使体系脱离基态变为激发态. 一旦体系远离平衡态, 就很有可能在外界能量流的维持下发生自组织行为, 在某个方向上获得有序度的反常提升<sup>[78]</sup>. 不同点在于, 温度场带来的原子振动是各向同性的, 而电场/磁场则可以带来特定方向的载荷变化, 甚至形成复杂的空间关联函数. 但力电耦合效应的比例是否足够引起质变, 又是如何影响到塑性变形机制, 不同材料得到的规律不尽相同又该如何解释, 都是目前研究尚未探明的问题。

### 3 基本塑性事件

非晶合金的室温塑性变形行为常表现为剪切局域化, 剪切带的失稳扩展导致的灾难性破坏极大限制了材料的塑性变形能力. 为满足非晶合金在国防安全、轨道交通等领域的应用需求, 非常有必要加深对非晶合金流变行为和失效机制的理解. 最终目标是借助机理研究明确技术发展方向, 将其凝练为一种调控材料性能的新方案. 为了这一目的, 接下来的章节梳理了非晶合金中的塑性事件演化及相互作用方面的研究发展脉络。

#### 3.1 简单外载下的局部塑性事件

从势能图景(Potential Energy Landscape)<sup>[79,80]</sup>和非线性动力学<sup>[32]</sup>的角度分析, 有利于建立非晶合金塑性事件演化的统一视角. 势能图景将系统的势能视为其构型的函数, 为理解玻璃转变过程中的动力学变化提供了另一个维度. 随系统能量降低, 液体状态下的长程扩散行为逐渐被冻结, 系统被势垒分隔出众多亚稳态构型, 只剩下局部极小值内的振动和局部极小值间的弛豫<sup>[81]</sup>. 势能图景将玻璃体系中能量最大值处称为“山顶”, 最小值处称为“山谷”. 势能对位移的二阶导数为零的点, 即“鞍点”(Saddle Point). 鞍点在沿山顶连线方向上是稳定的(处于能量极小值), 在沿山谷连线方向上是不稳定的(能量极大值). 在分子动力学模拟中

常通过计算势能的海森矩阵(Hessian Matrix, 多元函数的二阶偏导数, 对应函数的局部曲率)来获取鞍点分布. 对于势能矩阵, 海森矩阵就对应模量. 单轴剪切情况下应力应变曲线上常见的应力骤降(Stress Drop), 就对应一个负的模量, 是局部塑性事件在宏观统计量上的反映.

构型空间中发生的塑性事件可以视为势能曲面上局部极小值跨越鞍点的过程, 即非线性动力学中的鞍结分岔. 剪切外载的引入改变了体系的势能图景, 导致局部势能极小值的消失, 使系统在机械上不稳定, 并迫使系统移动到交替的局部极小值<sup>[82,83]</sup>. 当系统所在的局部极小值在与鞍点的剪切碰撞中湮灭时, 就会发生基本塑性事件<sup>[84]</sup>. 特征是势能景观的几个特征降至零: 势垒高度、势垒和局部最小值处的曲率以及势垒到局部最小值的距离. 这种机械不稳定性对力学性能的影响是材料强度下降, 并最终导致玻璃的屈服和整体的塑性流动<sup>[85]</sup>.

无序体系在剪切加载下会呈现出体胀行为(Volumetric Dilatation), 这是因为处于较密状态的颗粒或原子群, 基本单元间距受限于近似不可压缩条件(来源于颗粒间的硬接触或原子间的斥力), 因此相对运动只能通过体积膨胀的形式发生. 因此, 单个局部塑性事件引起的剪胀效应, 可按弹性基体中的夹杂物(弹性常数不同)引起的变形失配进行建模<sup>[86]</sup>. 基于Eshelby等效夹杂这一经典物理图像, Dasgupta等人<sup>[87-89]</sup>给出了位移、应力、应变场的理论解, 所呈现的四极子结构(Quadrupole)与分子动力学的模拟结果高度相似. 但应注意的是, 呈四极子结构的位移或应力场, 与常规意义上的剪切转变区, 并不是等价描述. 正如Eshelby理论所指出的, 前者是包含夹杂物的弹性基体的通解, 并不局限于特定尺度. 而后的尺寸虽然从几十到几百个原子(几个nm)不等, 且受众多因素影响, 但终究是有尺寸上限的. Kang等人<sup>[90]</sup>通过4D-TEM在非晶合金的应变场中观察到了百纳米量级的四极子结构(图4), 并估算夹杂物尺寸上限为15 nm, 10倍于MD模拟观察到的塑性事件尺寸<sup>[91]</sup>. 这与Schmidt等人<sup>[92,93]</sup>观察到的剪切带内的周期性密度波动同处一个量级. 这些工作似乎表明, 从塑性事件到剪切带的跨尺度演化过程中存在一定的自相似结构, 从而不断诱发不同尺度下的长程弹性场. 换句话说, 引起四极子结构的Eshelby夹杂物并不一定是单个塑性事件, 塑性事件串接形成的更

大尺度下的塑性事件集合, 也能引起四极子长程弹性场. 四极弹性场的存在, 以及由此产生的塑性事件间的非近邻相互作用(Non-Adjacent Interaction), 最终导致了非晶材料的应变局域化和灾难性破坏, 这一话题将在第4节详细展开讨论.

### 3.2 塑性事件激活点的预测指标

非晶中本征的结构缺陷容易在外界载荷下发生原子结构的重排, 从而激活塑性事件. 因此, 许多研究尝试回答缺陷之所以拥有更低激活能垒的原因. 已有研究针对这一目标提出了诸多结构和动力学指标, 旨在定义非晶中的结构缺陷, 即易于激发塑性事件的“软区”. 在排列有序的晶体结构中识别塑性变形带来的无序化是较为容易的, 但在原子构型混乱的非晶体系中评估无序度的增减则要复杂得多. 因此, 近20年来模拟领域的研究主线之一, 就是希望抽丝剥茧, 给出简化的、具有一般性的关键序参量(Order Parameter), 去代替种类繁多的、具体的微观结构, 从而与塑性事件的激活建立直接联系. 参阅提出这些真知灼见的原始文献无疑是更为明智的决定, 但这里依然尝试从一个统一的视角出发, 按照领域发展的内在逻辑进行介绍, 帮助读者获得更为系统的认识.

最早的一类是在构型空间中, 基于某一时刻的原子结构进行定义, 本质上是几何学. 而且与几何学在数学发展的早期就出现一样, 这一类指标更为符合人类认知自然的客观规律. 首先讨论与Voronoi胞相关的定义. 如果统计某中心原子的最近邻原子个数, 便可获得它的配位数. 而后, 取中心原子与最近邻原子连线作垂直平分面. 所有这些平面围起来的空间, 即为Voronoi胞, 又名泰森多边形. 据此便可定义原子所占空间(自由体积)及其原子密度, 以反映局部的稀疏/密集程度. 也可通过中心原子坐标偏离Voronoi胞质心的程度, 计算Voronoi胞的各向异性程度<sup>[95,96]</sup>. 或者测量中心原子与相邻两原子围成的夹角, 并与参考构型比对, 则可以衡量Voronoi晶胞的扭曲程度<sup>[97,98]</sup>. 此外, 同样可以基于组成Voronoi胞的多边形定义 $N$ 重对称性( $N$ 边形在多面体所有面中所占比例). 例如, 常用的局域五次对称性含量指的就是Voronoi多边形中五边形的占比<sup>[99]</sup>. 局域五次对称性较高的原子团簇通常具有更稳定的结构, 表现为更慢的动力学和更高的剪切模量. 如果采用球壳简单胞定义, 并对所有原子取平均以

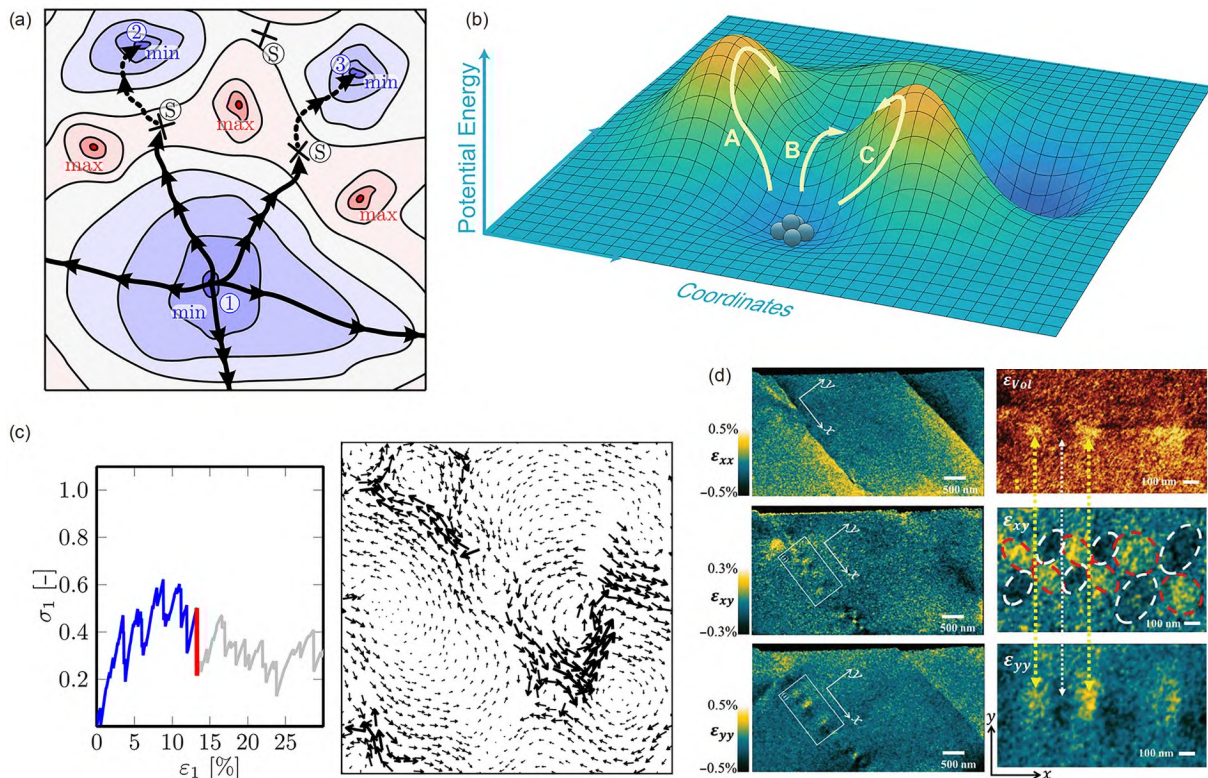


图 4 (网络版彩图) (a) 势能图景示意图<sup>[2]</sup>; (b) 塑性事件跨越能垒<sup>[94]</sup>; (c) 宏观曲线上的应力降和对应的微观塑性事件<sup>[2]</sup>; (d) 4D-STEM观测到的四极子结构<sup>[90]</sup>

Figure 4 (Color online) (a) Schematic diagram of potential energy landscape [2]. (b) Plastic event crossing energy barrier [94]. (c) Stress drop on macroscopic curve and corresponding microscopic plastic event [2]. (d) Quadrupole structures observed by 4D-STEM [90].

降维数据, 实际上便得到了径向分布函数的定义. 因此, 同样可以基于原子构型熵的形式, 定义局部结构相对于最无序的理想气体状态的扭曲程度, 即两体构型熵<sup>[100,101]</sup>. 原子体系与颗粒体系相比, 基本单元间的相互作用更为复杂. 如果在原子构型的基础上, 进一步考虑原子间相互作用力, 则可得到局部势能、局部热容等热力学定义<sup>[95]</sup>.

然而, 与Voronoi胞相关的短程结构指标在预测非晶结构动力学方面的能力已被表明是相对较弱的<sup>[102]</sup>. 因此, 寻求更为复杂但有效的结构指标成为了近10年来非晶模拟研究的一个工作重点. 其中一些指标基于结构演化历程定义, 相当于在结构指标的基础上, 进一步考虑构型随时间的演化. 最简单的方法就是直接用当前构型和参考构型计算原子位移. 但其结果中包含了试样整体的仿射变形(刚体平移和线性映射, 如旋转、剪切、拉伸等), 以及势能最小化导致的局部非仿射变形. 因此, 需要除去较大的仿射位移, 以获得相对

较小的非仿射分量. 将非仿位移以矢量的形式绘制于构型空间中, 就可以很好地展现局部塑性事件发生的位置, 包括漩涡(Vortex)和四极子结构.

在这一概念的基础上, 如果对原子位移取平方(保留数值, 避免相互抵消), 并取一定时间窗口作平均, 便得到了振动均方位移的定义. 平台区高度即为德拜-沃勒因子<sup>[103]</sup>, 可用于反映原子偏离平衡位置的程度. 非晶结构重排的难易程度会在这种固有结构的振动模式中得到体现<sup>[104]</sup>. 其中低频振动模(Low-Frequency Vibrational Modes)<sup>[105]</sup>表现出的准局域化(Quasi-Localization), 以及相应区域较低的激活能垒<sup>[106]</sup>, 使其常被用于识别非晶结构中的软区<sup>[107,108]</sup>, 从而在局域振动模式与塑性失稳之间建立关联<sup>[109]</sup>. 考虑到传统低频振动模的计算中使用了简谐近似, Lerner课题组<sup>[110,111]</sup>通过引入三阶的非谐张量(Anharmonic Tensor), 来去除声子噪声引入的基体运动对模式提取的干扰, 从而获得更好的结构预测效果. 考虑到低频振动模式数量的选取

中引入了人为因素, Tong等人<sup>[112]</sup>提出了一个更为定量的结构序参量 $\psi$ . 这一参量的预测效果与选取一定数量低频模态时的结果相似(图5), 但在许多情况下都能与塑性事件保持良好的相关性<sup>[95]</sup>. 在振动本征模的基础上, Wu等人<sup>[113]</sup>又利用特征向量的分布定义了拓扑缺陷, 并发现其与塑性事件的空间分布具有良好的相关性.

2020年, Richard等人<sup>[95]</sup>基于统计学中的累积秩相关系数统一评估, 系统比较了已有的非晶结构缺陷识别方法. 该方法基于这样一种理念: 如果一个指标的预测效果好, 那么剪切事件所在位置对应的指标会取极值. 而其他位置的计算结果偏离极值, 偏差程度可用概率分布函数来衡量. 他们的研究表明, 时间无关的结构指标表现一般不如基于原子历程的指标. 事实上, 如果目的只是探测局部结构性能, 那么Patinet课题组<sup>[114-116]</sup>提出的局部屈服应力(Local Yield Stress)是更为简单的方法. 即在常规加载时, 仅保留中间一小块区域( $5\sigma$ )的自由变形, 限制其他区域的非仿射变形, 此时激活中间区域结构失稳所需载荷, 即对应该区域

的局部承载能力. 这一方法不仅适用于简单剪切, 也可用于三轴加载, 或是改变剪切方向以研究非晶结构承载力的各向异性<sup>[117]</sup>. 因其本质上是在探测局部结构在某种激励下的响应, 即一种响应探测法, 相比于其他结构指标, 这一方法更为简单通用, 也具有更稳健的结构-性能关联, 但计算量较大是其在现阶段的局限性.

#### 4 基本塑性事件间的相互作用

非晶体系本身的特殊性为其剪切失稳过程增添了额外的复杂性. 首先, 与晶体系受限于固有滑移系不同, 非晶体系的塑性事件的激活方向具有极大的自由度. 激活位点也不一定是加载初期就在结构中存在的初始缺陷, 随加载推进可以逐渐涌现新的潜在激活点<sup>[118-120]</sup>. 某一位点的塑性事件也并不一定能够激活剪切方向上的相邻位点<sup>[115]</sup>. 因为塑性事件沿不同加载方向的承载能力也有所差异, 有利取向的塑性事件更容易被激活. 是否在某一位点激活塑性事件, 取决于该处的应力水平和局部承载能力的比值是否达到临界

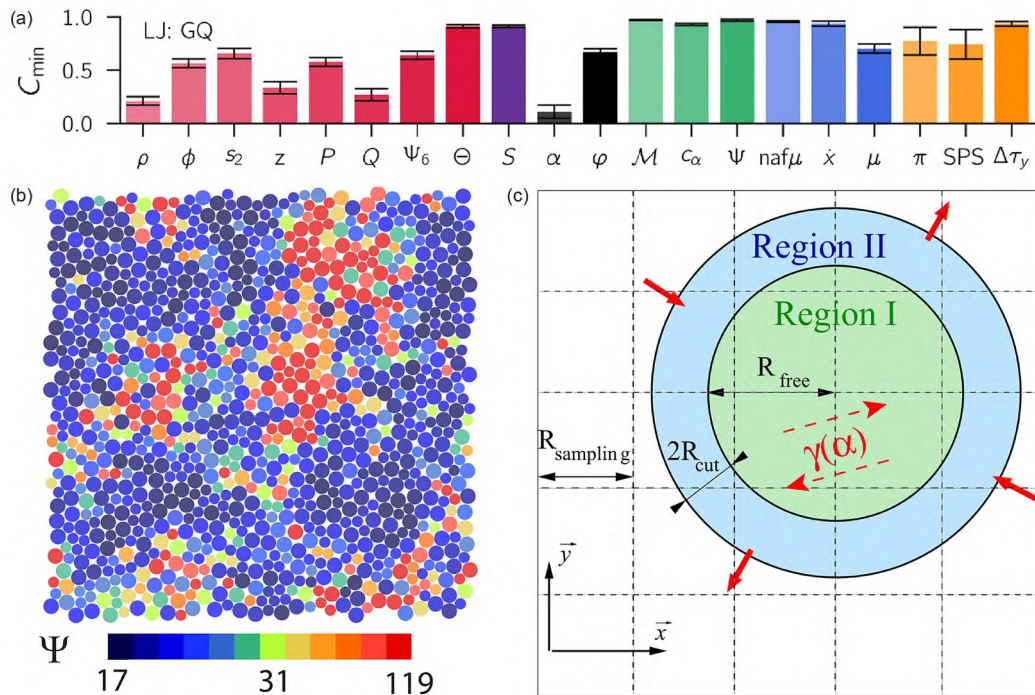


图 5 (网络版彩图) (a) 结构指标与塑性事件的关联效果比较<sup>[95]</sup>; (b) 序参量 $\psi$ <sup>[112]</sup>的空间分布; (c) 局部屈服应力探测示意图<sup>[114]</sup>

Figure 5 (Color online) (a) Comparison of the correlation between structural indicators and plastic events [95]. (b) Spatial distribution of order parameter  $\psi$  [112]. (c) Schematic diagram of local yield stress detection [114].



阈值, 这一临界阈值可表示为多种因素的函数. 其次, 非晶材料本身的非均匀性<sup>[121]</sup>又为塑性事件的激活能垒带来了分布特征<sup>[114]</sup>. 当塑性事件数量或分布达到某一程度时, 就会引起体系的结构重排, 导致承力结构的重分布<sup>[122]</sup>. 因此, 从力链(Force Chain)的角度看待非晶合金体系的机械失稳或许是更为全面的视角<sup>[123,124]</sup>, 但如何将力链与理论相结合仍是有待探讨的问题.

基本塑性事件间的相互作用这一课题近年来受到了非晶领域的广泛关注<sup>[125]</sup>. 这方面的已有研究可大致分为两部分: 一部分研究强调塑性事件之间的能量传递, 另一部分研究则侧重塑性事件之间的自组织行为. Şopu课题组<sup>[126-130]</sup>将研究侧重于初始塑性事件通过旋转剪切场激活后续相邻塑性事件这一机制<sup>[131]</sup>. Procaccia课题组<sup>[87,88]</sup>强调附加弹性模式的激发会导致塑性事件之间的强相关性, 并降低沿剪切方向流动的有效阻力, 从而导致变形后期出现剪切带.

如何从基本塑性事件相互作用的角度理解非晶体系的屈服行为? 从统一模型的视角看, 塑性事件本身并不依赖于缺陷区的存在, 缺陷只是降低了塑性事件的激活阈值<sup>[132]</sup>. 即使不存在初始缺陷, 材料也是要随着加载而破坏的, 塑性事件总是会发生的. 非晶弹性变形阶段也容纳了一定数量的局部塑性事件, 只是屈服之前, 这些局部塑性事件之间存在短期强相互作用和长期弱相互作用<sup>[133]</sup>, 尚不足以引起宏观流变行为. 那么对于不存在特定滑移系的非晶材料, 系统的局域化变形又是如何从孤立的塑性事件中涌现出来的?

目前学界已经认识到, 剪切失稳跨越了多个时空尺度, 从微观塑性事件到细观滑移线网络再到宏观剪切带, 其演化规律和内在逻辑有诸多相似之处, 但也有各自独特的几何(尺度<sup>[134]</sup>、取向<sup>[125,135]</sup>)和力学

特征. 为了日后能构建非晶体系受迫变形时剪切带自组织涌现的统一框架, 目前对剪切变形的各阶段开展细致的分类研究是繁琐但必需的.

2013年, Dasgupta等人<sup>[88]</sup>指出, 屈服对应于系统能量-四极子密度关系的转折点, 会导致系统失稳行为发生本质变化. 屈服之前, 四极子结构相关性较低, 而屈服后则高度相关, 且极化方向一致, 并能自组织形成剪切带. 这是因为沿主应力轴45°方向上、以线性排列且取向一致的四极子结构可使能量最小化<sup>[87]</sup>. 要建立塑性事件对应的四极子结构的完备描述, 就需要考虑四极子结构与外载坐标系的相对夹角(极化方向), 彼此间的相对位置和四极子密度. 此外, 还要在Eshelby理论的框架内, 考虑外载引起的基体-夹杂物变形失配、夹杂物之间的相互作用、夹杂物的应变能和纯基体的应变能. 其中所有四极子都沿主应力轴45°的排列方式可使第一项能量最小, 而夹杂物沿同一条线排列的构型可使第二项最小, 因为此时四极子间的位置矢量差也是沿主应力轴45°的. 这一工作给出了从基本塑性事件相互作用的角度理解非晶体系屈服行为的一种有效途径. 但他们也指出, 由于采用了较为简单的相互作用形式, 目前还无法给出屈服所对应的临界四极子密度. 此外, 确定模型参数<sup>[136,137]</sup>(塑性事件尺寸、特征应变<sup>[138]</sup>等)是否受加载方式、模型尺寸等因素的影响, 并给出激活势垒等参数的标定方法<sup>[139]</sup>, 也都是非常有意义的研究方向.

最近, Darve等人<sup>[140]</sup>进一步研究了从滑移线网络涌现到最终剪切带形成的过程(图6). 他们观察到在满足Rice局部化准则后, 一些细观滑移线会形成宏观剪切带, 这种应变局域化等价于弹性卸载, 导致其他部位的损伤演化停止. 这种细观滑移是仅受内性质支

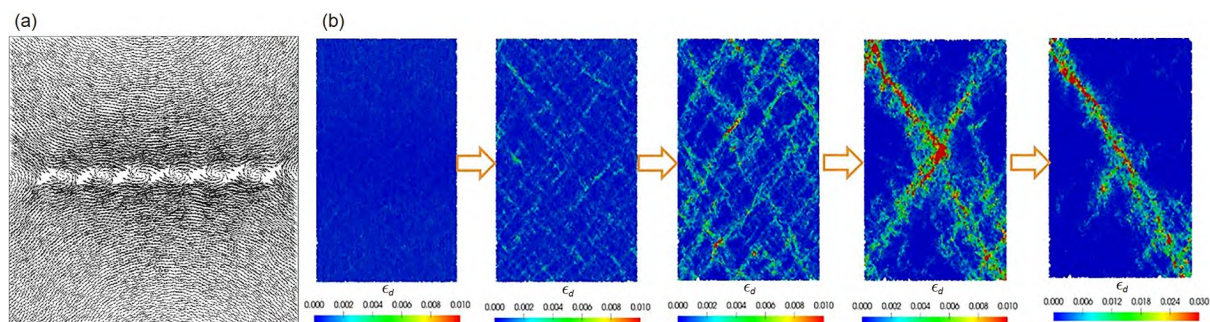


图 6 (网络版彩图) (a) 四极子自组织成剪切带<sup>[88]</sup>; (b) 滑移线网络到剪切带的演化过程<sup>[140]</sup>

Figure 6 (Color online) (a) Self-organization of quadrupoles into shear bands [88]. (b) Evolution from slip line network to shear bands [140].

配的, 而剪切带的取向则更受刚性边界长径比的影响<sup>[141]</sup>. 这让人回想起早期研究中提出的剪切带演化的两阶段模型<sup>[142-144]</sup>. 这一理念认为, 可行的剪切路径首先由许多塑性事件的局部组装形成, 是一条横跨了整个试样、却仅承受非常小位移的变形带. 在此之后, 材料才在这一路径上积累大变形, 导致了最终的剪切断裂. 正是这种机制, 导致了平行于试样断口边缘的熔融线<sup>[142]</sup>. 这一观点在Fielding课题组<sup>[145]</sup>的细观模拟中再次得到检验. Schuh课题组<sup>[146]</sup>也曾指出, 最终激活剪切带的位置并不是切应力最大的那条线, 而是那条路径上每一个点都最先达到屈服应力的线. 要确定这条路径, 首先要获取某一路径上所有点都能达到的临界切应力 $\tau_{cr}$ . 这样在所有路径中拥有最大 $\tau_{cr}$ 的路径, 就是剪切带的演化路径. 因为随着载荷增大, 这条路径上的点最先并同时达到材料的临界承载极限. 这其实也是一种能量最小化的要求.

是否可以将这些发现应用到非晶体系的塑性调控中? 这是一个极具挑战性的课题, 我们推测: 常规情况下四极子角度、相对位置和密度的配置会向着能量最小化路径走, 通过引入某些调控策略阻碍这一进程, 将会有助于提高非晶的塑性变形能力. 这不同于引入第二相<sup>[147]</sup>和槽口<sup>[148]</sup>这样的细观尺度调控, 也不同于原子配比优化<sup>[149]</sup>、次晶化(Paracrystallization)<sup>[150]</sup>这样的纳观尺度调控, 可以视为从塑性事件相互作用<sup>[151]</sup>入手的一种中程尺度下的调控策略.

## 5 考虑非近邻相互作用的本构模型

宏观唯象本构参数较少、形式较为简单, 在数据拟合上更为简便, 但也将它们的应用局限在了现象描述和工程层面. 只有在本构模型中进一步引入变形机制, 才有可能做到预测新现象, 实现对实验、模拟研究的反哺. 分子动力学模拟能够给出原子在相空间坐标所构成的完备描述, 因此可以实现结构-性能关联预测, 但当前阶段又因计算量问题无法胜任跨尺度的研究. 因此, 研究者总是希望能从统计分析的角度出发, 从原子结构中提炼关键的结构参量, 代替具体结构向更大尺度传递, 从而和宏观性能建立关联.

这一类包含微观机理的本构往往需要定义状态变量, 用于反映当前的构型信息, 进而确定系统所处阶段, 从而与对应的外载建立关联. 这一理念基于这样

的假设: 当前的原子构型受热历史和加载历程综合影响, 但却并不记录这些路径的信息. 下一刻的结构变化和对外载的响应, 也只取决于当前构型, 并不需要之前演化过程的信息, 因此状态变量足以代表系统的当前状态<sup>[152]</sup>. 理想的状态变量应是定义完备且便于实验观测的. 早期的自由体积理论<sup>[153]</sup>和剪切转变区理论(Shear Transformation Zone, STZ)<sup>[154]</sup>, 通过引入热力学中激活能的概念, 抓住了非晶流变的主要矛盾, 能半唯象、半定量地描述外力场和温度变化引起的玻璃转变行为<sup>[155]</sup>. 其中自由体积理论仅基于单原子跃迁的扩散机制构建, 不考虑原子团簇的协同作用, 物理图像与实际情况有较大差异. 这一不足之处在STZ理论中得到改善, 以多原子协同变形的剪切转变区作为新的物理图像, 经受住了分子动力学模拟和实验结果的检验. 尽管如此, 早期非晶塑性理论仍存在诸多局限性, 包括复杂应力状态下剪切和膨胀两种机制的耦合、蠕变效应、各向同性和运动应变软化/硬化、玻璃温度附近的热力学老化、低温下的急剧屈服、流动驱动的结构恢复和记忆效应等. 针对这些不足, 近期又有众多研究基于STZ的物理图像构建非晶塑性理论<sup>[156-158]</sup>. Bouchbinder等人<sup>[159-161]</sup>采用基于热力学定律定义的有效温度作为状态变量来描述系统状态, 使用对称和能量平衡原理来约束低温下STZ理论的形式<sup>[162]</sup>, 并根据实验数据检验了有效温度模型的有效性<sup>[163-165]</sup>.

理论都是基于一定物理图像建立, 结果已然包含于假设之中, 一旦所欲描述的现象超出理论假设就会失去预测能力. 比如, 考虑外力激活变形单元的理论, 就常常不考虑热激活, 因此不可能描述过冷液体弛豫的问题. 当温度较低、热振动的影响远小于外力影响时, 这么做是合理的, 因为解决问题的重点在于抓主要矛盾. 好的理论框架有可拓展性, 有时只需引入新机制项进行修正, 就能较好地描述新现象. 但无法被框架包含的机制则不能通过理论改良实现, 此时需要的是理念的革新.

其实早在1994年, Argon课题组<sup>[166]</sup>就提出了一种以随机序列代表局部非弹性变换的塑性本构, 使用动力学蒙特卡罗算法更新塑性事件间的相互作用. 在此基础上, Schuh课题组<sup>[167-169]</sup>基于传统STZ理论求解应力应变关系, 并联合动力学蒙特卡罗算法选取塑性事件激活位点. 通过将大塑性变形视为一连串塑性事件组成的马尔可夫链, 将下一时刻的塑性事件激活与当

前状态挂钩. 不同于一般有限元方法模拟的预制缺陷方法, 他们采用随机选取单元的方式来激活或湮灭塑性事件. 此概率与应力场、温度场挂钩, 从而考虑激活单元对相邻单元的影响. 基于这一模型, 他们系统研究了不同温度和应变速率下的变形模式转换和剪切带演化机制, 展现了细观力学模型和MD模拟在描述塑性单元方面的一致性. Chevalier等人<sup>[157]</sup>和Van Loock等人<sup>[158]</sup>借鉴了这一塑性事件的概率激活方式, 但相邻塑性事件的相互作用依然是通过弹性场和应力释放实现的.

Needleman课题组<sup>[170]</sup>以Eshelby夹杂理论为基础, 给出了求解离散剪切转变区塑性变形的办法. 他们通过将单个Eshelby夹杂的解析解叠加在图像场的线弹性边界值数值解上, 对边界值问题进行求解, 从而引入比有限元方法更多的塑性事件. 此外, 他们还通过引入非负的塑性耗散能, 对Eshelby夹杂理论的特征应变进行约束, 并在后续研究中<sup>[138]</sup>从单个塑性事件的耗散能扩展到多体相互作用的耗散能. 但除了统计效应(初始成核点分布和参数演化等)会影响离散塑性行为外, 离散缺陷间的相互作用也可能是混沌的, 这都可能影响模拟中跨尺度现象的关联<sup>[171]</sup>. 此外, 还有一些模型试图引入更现实的物理机制, 特别是非局部相互作用和热力学运动, 为非晶塑性变形创建更为真实合理的理论框架. Anand课题组<sup>[172-175]</sup>提出了考虑应变速率和温度的有限应变弹塑性理论, 在描述屈服后的应变软化和非线性卸载等特征上表现出色. Zhu等人<sup>[176]</sup>基于热力学定律构建了原子扩散与塑性流动的直接关系. 已有

理论是否可以依靠微观层面的机制去描述自发在宏观层面涌现的实验现象, 如包辛格效应(Bauschinger Effect)<sup>[117,157]</sup>, 以及前面提到的剪切带角度偏转<sup>[141,177]</sup>、黏滑(Stick-Slip)<sup>[178]</sup>、密度波动<sup>[92,93]</sup>等现象, 是值得研究者进一步探讨的问题.

另一方面, 现有理论大多基于平均场假设建立. 这样做的好处在于可以较低的计算成本将相互作用的多体问题转化为弱周期边界的单体自洽问题. 但平均场近似与非晶体系受迫变形的真实物理图像间存在诸多差异, 包括材料参数波动<sup>[179]</sup>(激活能垒、弹性常数等)和塑性事件性质(尺寸、激活应变等)的空间异质性<sup>[180]</sup>, 并且不可避免地掩盖了微观塑性事件之间的相互作用. 相应的简化在多大程度上是可以接受的, 是否导致预测结果偏离实际情况, 都是有待进一步确认的问题.

针对这一局限性, 最近本课题组<sup>[181]</sup>提出了一种在有限元框架内、考虑材料非近邻效应的通用方法, 与现有的材料塑性理论都有良好的兼容性和扩展性(图7). 对于非晶合金, 该非近邻方法通过引入中长程关联机制, 为塑性事件演化注入强竞争性, 使材料系统具备自组织临界性, 从而在无预制初始路径的情况下实现了三维应力状态下剪切带的自适应时空演化. 同时该模型可在连续力学框架内模拟微观剪切转变区运动, 并在剪切带传播前沿上可视化涡旋状速度场特征. 这种中长程关联机制实质上是一种实现单元物理量交互的普适性方法, 可适用于大部分平均场模型, 并不局限于非晶合金本身. 对于晶态金属, 可通过中长程关联方

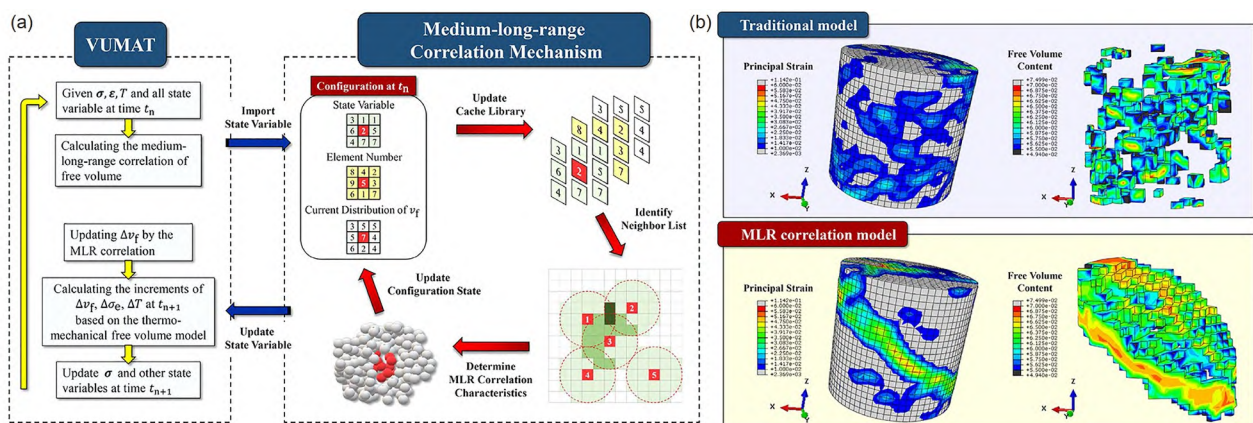


图7 (网络版彩图) (a) 考虑中长程关联的非晶塑性本构模型框架<sup>[181]</sup>, (b) 传统模型与中长程关联模型预测的剪切带演化<sup>[181]</sup>  
Figure 7 (Color online) (a) Amorphous plastic constitutive model considering medium-long range correlations [181]. (b) Evolution of shear bands predicted by traditional models and medium-long range correlations [181].

法考虑化学短程序对晶格畸变的影响. 对于聚合物, 可将局部力学行为与交联、键断裂或者分子滑移等过程关联. 对于混凝土等复合材料, 可将界面过渡区与骨料分布或强度分布相互关联, 从而描述混凝土在非均匀构型下的动态特征. 如何在这一框架基础上进一步结合微细观结构探测手段、明确相互作用的具体形式<sup>[182,183]</sup>, 从而发挥有限元数值模拟在推演塑性区演化方面的优势<sup>[56]</sup>, 是非常值得非晶物理和力学工作者深入合作、共同探讨的内容<sup>[56]</sup>.

## 6 总结与展望

非晶合金的动态流变过程蕴含着丰富的微细观响应机制, 目前已被认识的不过是冰山一角, 存在丰富的底层调控空间. 作为非晶流变的结构起源, 塑性事件的激发、相互作用, 及其与宏观力学、物理性能间的关联, 是提高非晶合金室温塑性变形能力的关键. 然而, 由于受限于实验和模拟手段在各自时空间尺度上的不足, 目前对塑性事件演化的跨尺度行为的研究仍处于起步阶段. 近期研究着重关注塑性事件的起源及其预测, 但部分研究也表明, 塑性事件的激活本身就存在极大的不确定性, 与外载条件高度相关<sup>[120]</sup>. 对早期塑性事件有效的预测方法, 也不一定适用于临近屈服点的情况. 即使充分掌握了塑性事件潜在激活点的信息, 也难以预判逾渗路径的最终位置. 即使对于单条剪切

带, 混沌效应在其中扮演的角色也是至关重要的. 混沌动力学导致了剪切失稳的不确定性, 继而引发了宏观塑性的离散性<sup>[184]</sup>. 混沌效应对于非晶而言, 既是挑战, 也是机遇. 这或许意味着与混沌控制领域<sup>[185]</sup>开展交叉研究的可能, 为无序体系的性能调控引入新的思路.

引入结构设计和利用材料性能是并行不悖的两种思路, 理应获得更紧密的结合. 一方面, 可以通过引入受迫振荡并调控振幅、频率、相位和分布等特征, 在无序体系中重新引入有序的原子的构型差异、疏密变化, 甚至是塑性应变梯度, 调控非晶体系中的非均匀性, 凝练出一种从材料级到元件级再到结构级的多尺度调控思路. 另一方面, 可以围绕受迫振动对非晶合金塑性事件时空间演化的影响, 探索无序体系在受迫变形中诱生的塑性事件, 及其与额外施加的周期性振动之间的相互作用, 最终探明这种耦合效应对逾渗路径的扰动所带来的协同强韧化效应.

总之, 动态加载不仅可用于研究材料的动态响应, 也可作为一种材料成型处理工艺. 非晶合金作为一种典型的复杂系统, 其力学响应本身就具有显著的非线性特征, 动态载荷的引入更是丰富了调控手段. 但非平庸效果不能寄希望于浅尝辄止式的简单尝试, 新一代调控手段要求将以往经验性的研究方式上升到对科学规律的系统认识. 这样才能打破底层优化逻辑, 构造适用于空天服役环境的、可动态调控的高性能材料.

## 参考文献

- 1 Wang W H. Amorphous Matter: The Fourth Conventional Matter (in Chinese). Beijing: Science Press, 2023 [汪卫华. 非晶物质: 常规物质第四态. 北京: 科学出版社, 2023]
- 2 Bamer F, Ebrahim F, Markert B, et al. Molecular mechanics of disordered solids. *Arch Computat Methods Eng*, 2023, 30: 2105–2180
- 3 Wang W H. The nature and properties of amorphous matter (in Chinese). *Prog 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]
- 4 Sun B A, Wang W H. The fracture of bulk metallic glasses. *Prog Mater Sci*, 2015, 74: 211–307
- 5 Yang X, Gao M, Liu Y, et al. Superior corrosion resistance of high-temperature Ir-Ni-Ta-(B) amorphous alloy in sulfuric acid solution. *Corr Sci*, 2022, 200: 110227
- 6 Li J C, Chen X W. Compressive-shear behavior and self-sharpening of bulk metallic glasses and their composite materials (in Chinese). *Adv Mech*, 2011, 41: 480–518 [李继承, 陈小伟. 块体金属玻璃及其复合材料的压缩剪切特性和侵彻/穿甲“自锐”行为. 力学进展, 2011, 41: 480–518]
- 7 Yu J, Wang H, Wu Y, et al. Combustion behavior and mechanism of  $\text{Cu}_{46}\text{Zr}_{46}\text{Al}_{18}$  bulk metallic glass in oxygen-enriched environments. *Corr Sci*, 2022, 204: 110415
- 8 Zhou H Q, Zhang F G, Pan H, et al. Main progress in research on material spalling (in Chinese). *Chin J High Pressure Phys*, 2019, 33: 1–20 [周

- 洪强, 张凤国, 潘昊, 等. 材料层裂研究的主要进展. 高压物理学报, 2019, 33: 1–20]
- 9 Li Z, Zeng Z, Xing Y, et al. Microscopic structure and dynamics study of granular segregation mechanism by cyclic shear. *Sci Adv*, 2021, 7: e8737
  - 10 Leishangthem P, Parmar A D S, Sastry S. The yielding transition in amorphous solids under oscillatory shear deformation. *Nat Commun*, 2017, 8: 14653
  - 11 Sastry S. Models for the yielding behavior of amorphous solids. *Phys Rev Lett*, 2021, 126: 255501
  - 12 Shang B, Jakse N, Guan P, et al. Influence of oscillatory shear on nucleation in metallic glasses: A molecular dynamics study. *Acta Mater*, 2023, 246: 118668
  - 13 Mungan M, Sastry S. Metastability as a mechanism for yielding in amorphous solids under cyclic shear. *Phys Rev Lett*, 2021, 127: 248002
  - 14 Yeh W T, Ozawa M, Miyazaki K, et al. Glass stability changes the nature of yielding under oscillatory shear. *Phys Rev Lett*, 2020, 124: 225502
  - 15 Bhaumik H, Foffi G, Sastry S. The role of annealing in determining the yielding behavior of glasses under cyclic shear deformation. *Proc Natl Acad Sci USA*, 2021, 118: e2100227118
  - 16 Parmar A D, Kumar S, Sastry S. Strain localization above the yielding point in cyclically deformed glasses. *Phys Rev X*, 2019, 9: 21018
  - 17 Zhang L, Wang Y, Yang Y, et al. The anelastic origin of mechanical cycling induced rejuvenation in the metallic glass. *Sci China-Phys Mech Astron*, 2023, 66: 286111
  - 18 Li X, Wei D, Zhang J Y, et al. Ultrasonic plasticity of metallic glass near room temperature. *Appl Mater Today*, 2020, 21: 100866
  - 19 Liang X, Zhu X L, Li X, et al. High-entropy alloy and amorphous alloy composites fabricated by ultrasonic vibrations. *Sci China-Phys Mech Astron*, 2020, 63: 116111
  - 20 Lin H, Yang J, Zhao H, et al. Fabrication of magnetostrictive composites using metallic glass as glue. *Intermetallics*, 2022, 145: 107561
  - 21 Li L, Li X, Huang Z, et al. Joining of metallic glasses in liquid via ultrasonic vibrations. *Nat Commun*, 2023, 14: 6305
  - 22 Li L, Lyu G J, Li H, et al. Ultra-fast amorphization of crystalline alloys by ultrasonic vibrations. *J Mater Sci Tech*, 2023, 142: 76–88
  - 23 Ma J, Yang C, Liu X, et al. Fast surface dynamics enabled cold joining of metallic glasses. *Sci Adv*, 2019, 5: x7256
  - 24 Ichitsubo T, Matsubara E, Yamamoto T, et al. Microstructure of fragile metallic glasses inferred from ultrasound-accelerated crystallization in pd-based metallic glasses. *Phys Rev Lett*, 2005, 95: 245501
  - 25 Lacks D J, Osborne M J. Energy landscape picture of overaging and rejuvenation in a sheared glass. *Phys Rev Lett*, 2004, 93: 255501
  - 26 Priezjev N V. Mechanical annealing and yielding transition in cyclically sheared binary glasses. *J Non-Crystal Solids*, 2022, 590: 121697
  - 27 Priezjev N V. Accessing a broader range of energy states in metallic glasses by variable-amplitude oscillatory shear. *J Non-Crystal Solids*, 2021, 560: 120746
  - 28 Adhikari M, Mungan M, Sastry S. Yielding behavior of glasses under asymmetric cyclic deformation. arXiv: 2201.06535
  - 29 Fiocco D, Foffi G, Sastry S. Oscillatory athermal quasistatic deformation of a model glass. *Phys Rev E*, 2013, 88: 20301
  - 30 Chakraborty S, Krishnan V V, Ramola K, et al. Enhanced vibrational stability in glass droplets. arXiv: 2303.07147
  - 31 Regev I, Lookman T, Reichardt C. Onset of irreversibility and chaos in amorphous solids under periodic shear. *Phys Rev E*, 2013, 88: 62401
  - 32 Strogatz S H. *Nonlinear Dynamics and Chaos*. Reading: Addison-Wesley, 1994
  - 33 Nagamanasa K H, Gokhale S, Sood A K, et al. Experimental signatures of a nonequilibrium phase transition governing the yielding of a soft glass. *Phys Rev E*, 2014, 89: 62308
  - 34 Keim N C, Arratia P E. Mechanical and microscopic properties of the reversible plastic regime in a 2D jammed material. *Phys Rev Lett*, 2014, 112: 28302
  - 35 Shang B, Wang W, Guan P. Cycle deformation enabled controllable mechanical polarity of bulk metallic glasses. *Acta Mater*, 2022, 225: 117557
  - 36 Zhang L T, Wang Y J, Pineda E, et al. Achieving structural rejuvenation in metallic glass by modulating  $\beta$  relaxation intensity via easy-to-operate mechanical cycling. *Int J Plast*, 2022, 157: 103402
  - 37 Tang X C, Li C, Li H Y, et al. Cup-cone structure in spallation of bulk metallic glasses. *Acta Mater*, 2019, 178: 219–227
  - 38 Escobedo J P, Gupta Y M. Dynamic tensile response of Zr-based bulk amorphous alloys: Fracture morphologies and mechanisms. *J Appl Phys*, 2010, 107: 123502
  - 39 Tang W X, Tang X C, Mo Y H, et al. Cup-cone statistical investigation assess the relationship between the micro-structure and spall strength of metallic glasses under planar impact loadings. *J Alloys Compd*, 2023, 940: 168862

- 40 Tang X C, Meng L Y, Yao X H. Damage evolution during the dynamic tensile fracture (spallation) of metallic glasses (in Chinese). *Chin Sci Bull*, 2021, 66: 1847–1860 [唐晓畅, 孟令怡, 姚小虎. 金属玻璃动态拉伸断裂 (层裂) 中的损伤演化行为. 科学通报, 2021, 66: 1847–1860]
- 41 Tang X C, Yao X H, Wilkerson J W. A micromechanics-based framework to predict transitions between dimple and cup-cone fracture modes in shocked metallic glasses. *Int J Plast*, 2021, 137: 102884
- 42 Grégoire C, Ponga M. Nanovoid failure in Magnesium under dynamic loads. *Acta Mater*, 2017, 134: 360–374
- 43 Huang G, Zhang X, Xie Z, et al. Effects of lattice distortion and chemical short-range order on creep behavior of medium-entropy alloy CoCrNi. *Mech Mater*, 2023, 177: 104549
- 44 Zhu L, Zhang X, Jian W R, et al. Plastic deformation mechanism and defect patterning under nanoindentation in medium entropy alloy CoCrNi. *J Alloys Compd*, 2023, 968: 171734
- 45 Li W, Chen S, Aitken Z, et al. Shock-induced deformation and spallation in CoCrFeMnNi high-entropy alloys at high strain-rates. *Int J Plast*, 2023, 168: 103691
- 46 Liu M T, Li W H, Feng L X, et al. Study on shock compression phase transition of single crystal silicon based on molecular dynamics simulation (in Chinese). *Exp Shock Waves*, 2022, 42: 013102 [刘梦婷, 李旺辉, 奉兰西, 等. 基于分子动力学模拟的单晶硅冲击压缩相变研究. 爆炸与冲击, 2022, 42: 013102]
- 47 Li W, Hahn E N, Yao X, et al. On the grain size dependence of shock responses in nanocrystalline sic ceramics at high strain rates. *Acta Mater*, 2020, 200: 632–651
- 48 Feng L, Li W, Hahn E N, et al. Structural phase transition and amorphization in hexagonal SiC subjected to dynamic loading. *Mech Mater*, 2022, 164: 104139
- 49 Xiong Q L, Shimada T, Kitamura T, et al. Selective excitation of two-wave structure depending on crystal orientation under shock compression. *Sci China-Phys Mech Astron*, 2020, 63: 114611
- 50 Huang X, Ling Z, Dai L H. Ductile-to-brittle transition in spallation of metallic glasses. *J Appl Phys*, 2014, 116: 143503
- 51 Dai L H, Bai Y L. Basic mechanical behaviors and mechanics of shear banding in BMGs. *Int J Impact Eng*, 2008, 35: 704–716
- 52 Shao Y, Yang G N, Yao K F, et al. Direct experimental evidence of nano-voids formation and coalescence within shear bands. *Appl Phys Lett*, 2014, 105: 181909
- 53 Tang X, Shen L, Zhang H, et al. Crack tip cavitation in metallic glasses. *J Non-Crystalline Solids*, 2022, 592: 121762
- 54 Wang Z, Wang W H. Flow unit model in metallic glasses (in Chinese). *Acta Phys Sin*, 2017, 66: 176103 [王峥, 汪卫华. 非晶合金中的流变单元. 物理学报, 2017, 66: 176103]
- 55 Yang Z Y, Wang Y J, Dai L H. Hidden spatiotemporal sequence in transition to shear band in amorphous solids. *Phys Rev Res*, 2022, 4: 23220
- 56 Puosi F, Rottler J, Barrat J L. Time-dependent elastic response to a local shear transformation in amorphous solids. *Phys Rev E*, 2014, 89: 42302
- 57 Karimi K, Barrat J L. Role of inertia in the rheology of amorphous systems: A finite-element-based elastoplastic model. *Phys Rev E*, 2016, 93: 22904
- 58 Salerno K M, Robbins M O. Effect of inertia on sheared disordered solids: Critical scaling of avalanches in two and three dimensions. *Phys Rev E*, 2013, 88: 62206
- 59 Salerno K M, Maloney C E, Robbins M O. Avalanches in strained amorphous solids: Does inertia destroy critical behavior? *Phys Rev Lett*, 2012, 109: 105703
- 60 Tang X C, Nguyen T, Yao X H, et al. A cavitation and dynamic void growth model for a general class of strain-softening amorphous materials. *J Mech Phys Solids*, 2020, 141: 104023
- 61 Rao W, Zhang J, Kang G, et al. A meso-mechanical constitutive model of bulk metallic glass composites considering the local failure of matrix. *Int J Plast*, 2019, 115: 238–267
- 62 Ceric H, Selberherr S. Electromigration in submicron interconnect features of integrated circuits. *Mater Sci Eng-R-Rep*, 2011, 71: 53–86
- 63 Ruskiewicz B J, Grimm T, Ragai I, et al. A review of electrically-assisted manufacturing with emphasis on modeling and understanding of the electroplastic effect. *J Manuf Sci Eng*, 2017, 139: 110801
- 64 Waryoba D, Islam Z, Wang B, et al. Low temperature annealing of metals with electrical wind force effects. *J Mater Sci Tech*, 2019, 35: 465–472
- 65 Kim M J, Yoon S, Park S, et al. Elucidating the origin of electroplasticity in metallic materials. *Appl Mater Today*, 2020, 21: 100874
- 66 Lahiri A, Shanthraj P, Roters F. Understanding the mechanisms of electroplasticity from a crystal plasticity perspective. *Model Simul Mater Sci*

- Eng, 2019, 27: 085006
- 67 Yu T, Deng D, Wang G, et al. Crack healing in SUS304 stainless steel by electropulsing treatment. *J Cleaner Prod*, 2016, 113: 989–994
- 68 Yang C L, Yang H J, Zhang Z J, et al. Recovery of tensile properties of twinning-induced plasticity steel via electropulsing induced void healing. *Scripta Mater*, 2018, 147: 88–92
- 69 Hua L, Liu Y, Qian D, et al. Mechanism of void healing in cold rolled aeroengine M50 bearing steel under electroshocking treatment: A combined experimental and simulation study. *Mater Charact*, 2022, 185: 111736
- 70 Ben D, Yang H, Ma Y, et al. Declined fatigue crack propagation rate of a high-strength steel by electropulsing treatment. *Adv Eng Mater*, 2019, 21: 1801345
- 71 Conrad H, Yang D. Effect of DC electric field on the tensile deformation of ultrafine-grained 3Y-TZP at 1450–1600°C. *Acta Mater*, 2007, 55: 6789–6797
- 72 Johnson W L, Kaltenboeck G, Demetriou M D, et al. Beating crystallization in glass-forming metals by millisecond heating and processing. *Science*, 2011, 332: 828–833
- 73 Chen Q, Zhang M, Gu J, et al. Expanding the homogeneous regime of deformation in bulk metallic glass by electromigration-induced rejuvenation. *Commun Mater*, 2020, 1: 1–8
- 74 Ding H, Gong P, Chen W, et al. Achieving strength-ductility synergy in metallic glasses via electric current-enhanced structural fluctuations. *Int J Plast*, 2023, 169: 103711
- 75 Zhao S, Zhang R, Chong Y, et al. Defect reconfiguration in a Ti-Al alloy via electroplasticity. *Nat Mater*, 2021, 20: 468–472
- 76 Li X, Zhu Q, Hong Y, et al. Revealing the pulse-induced electroplasticity by decoupling electron wind force. *Nat Commun*, 2022, 13: 6503
- 77 Li M, Shen Y, Luo K, et al. Harnessing dislocation motion using an electric field. *Nat Mater*, 2023, 22: 958–963
- 78 Sun B A, Wang L F, Shao J H. Self-organized critical behavior in plastic flow of amorphous solids (in Chinese). *Acta Phys Sin*, 2017, 66: 178103 [孙保安, 王利峰, 邵建华. 非晶力学流变的自组织临界行为. *物理学报*, 2017, 66: 178103]
- 79 Wales D J. Exploring energy landscapes. *Annu Rev Phys Chem*, 2018, 69: 401–425
- 80 Stillinger F H. Energy Landscapes, Inherent Structures, and Condensed-Matter Phenomena. Princeton: Princeton University Press, 2015
- 81 Malandro D L, Lacks D J. Relationships of shear-induced changes in the potential energy landscape to the mechanical properties of ductile glasses. *J Chem Phys*, 1999, 110: 4593–4601
- 82 Malandro D L, Lacks D J. Molecular-level mechanical instabilities and enhanced self-diffusion in flowing liquids. *Phys Rev Lett*, 1998, 81: 5576–5579
- 83 Chattoraj J, Caroli C, Lemaître A. Universal additive effect of temperature on the rheology of amorphous solids. *Phys Rev Lett*, 2010, 105: 266001
- 84 Maloney C, Lemaître A. Subextensive scaling in the athermal, quasistatic limit of amorphous matter in plastic shear flow. *Phys Rev Lett*, 2004, 93: 16001
- 85 Zhang Y, Cheng M, Meng L, et al. Microstructural evolution of shear bands formation of metallic glasses under different loading conditions and strain rates. *J Non-Crystal Solids*, 2022, 584: 121525
- 86 Eshelby J D. The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems. *Proc R Soc Lon*, 1957, 241: 376–396
- 87 Dasgupta R, Hentschel H G E, Procaccia I. Microscopic mechanism of shear bands in amorphous solids. *Phys Rev Lett*, 2012, 109: 255502
- 88 Dasgupta R, Hentschel H G E, Procaccia I. Yield strain in shear banding amorphous solids. *Phys Rev E*, 2013, 87: 22810
- 89 Dasgupta R, Hentschel H G E, Joy A, et al. Shear banding instabilities in amorphous solids: Predicting the yield strain. In: 4th International Symposium on Slow Dynamics in Complex Systems. Sendai: American Institute of Physics, 2013
- 90 Kang S, Wang D, Caron A, et al. Direct observation of quadrupolar strain fields forming a shear band in metallic glasses. *Adv Mater*, 2023, 35: 2212086
- 91 Hassani M, Lagogianni A E, Varnik F. Probing the degree of heterogeneity within a shear band of a model glass. *Phys Rev Lett*, 2019, 123: 195502
- 92 Schmidt V, Rösner H, Peterlechner M, et al. Quantitative measurement of density in a shear band of metallic glass monitored along its propagation direction. *Phys Rev Lett*, 2015, 115: 35501
- 93 Schmidt V, Rösner H, Wilde G, et al. Shear banding in metallic glasses described by alignments of Eshelby quadrupoles. *Phys Rev B*, 2017, 95: 134111

- 94 Yu J H, Shen L Q, Şopu D, et al. Critical growth and energy barriers of atomic-scale plastic flow units in metallic glasses. *Scripta Mater*, 2021, 202: 114033
- 95 Richard D, Ozawa M, Patinet S, et al. Predicting plasticity in disordered solids from structural indicators. *Phys Rev Mater*, 2020, 4: 113609
- 96 Kawasaki T, Araki T, Tanaka H. Correlation between dynamic heterogeneity and medium-range order in two-dimensional glass-forming liquids. *Phys Rev Lett*, 2007, 99: 215701
- 97 Tong H, Tanaka H. Revealing hidden structural order controlling both fast and slow glassy dynamics in supercooled liquids. *Phys Rev X*, 2018, 8: 11041
- 98 Tong H, Tanaka H. Structural order as a genuine control parameter of dynamics in simple glass formers. *Nat Commun*, 2019, 10: 5596
- 99 Li M-Z. Five-fold local symmetries in metallic liquids and glasses (in Chinese). *Acta Phys Sin*, 2017, 66: 176107 [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]
- 100 Wang Y J, Wei D, Han D, et al. Does structure determine property in amorphous solids? (in Chinese). *Chin J Theor Appl Mech*, 2020, 52: 303–317 [王云江, 魏丹, 韩懂, 等. 非晶态固体的结构可以决定性能吗? 力学学报, 2020, 52: 303–317]
- 101 Tanaka H, Tong H, Shi R, et al. Revealing key structural features hidden in liquids and glasses. *Nat Rev Phys*, 2019, 1: 333–348
- 102 Wei D, Yang J, Jiang M Q, et al. Revisiting the structure-property relationship of metallic glasses: Common spatial correlation revealed as a hidden rule. *Phys Rev B*, 2019, 99: 14115
- 103 Zhang H P. Investigation of mechanisms for boson peak and relaxation dynamics in disordered systems (in Chinese). Beijing: Renmin University of China, 2020 [张华平. 无序体系中玻色峰和弛豫动力学的机制研究. 北京: 中国人民大学, 2020]
- 104 Rottler J, Schoenholz S S, Liu A J. Predicting plasticity with soft vibrational modes: From dislocations to glasses. *Phys Rev E*, 2014, 89: 42304
- 105 Liu A J, Nagel S R. The jamming transition and the marginally jammed solid. *Annu Rev Condens Matter Phys*, 2010, 1: 347–369
- 106 Xu N, Vitelli V, Liu A J, et al. Anharmonic and quasi-localized vibrations in jammed solids—Modes for mechanical failure. *EPL*, 2010, 90: 56001
- 107 Manning M L, Liu A J. Vibrational modes identify soft spots in a sheared disordered packing. *Phys Rev Lett*, 2011, 107: 108302
- 108 Kapteijns G, Richard D, Lerner E. Nonlinear quasilocated excitations in glasses: True representatives of soft spots. *Phys Rev E*, 2020, 101: 32130
- 109 Tanguy A, Mantsi B, Tsamados M. Vibrational modes as a predictor for plasticity in a model glass. *Europhys Lett*, 2010, 90: 16004
- 110 Zylberg J, Lerner E, Bar-Sinai Y, et al. Local thermal energy as a structural indicator in glasses. *Proc Natl Acad Sci USA*, 2017, 114: 7289–7294
- 111 Gartner L, Lerner E. Nonlinear plastic modes in disordered solids. *Phys Rev E*, 2016, 93: 11001
- 112 Tong H, Xu N. Order parameter for structural heterogeneity in disordered solids. *Phys Rev E*, 2014, 90: 10401
- 113 Wu Z W, Chen Y, Wang W H, et al. Topology of vibrational modes predicts plastic events in glasses. *Nat Commun*, 2023, 14: 2955
- 114 Barbot A, Lerbinger M, Hernandez-Garcia A, et al. Local yield stress statistics in model amorphous solids. *Phys Rev E*, 2018, 97: 33001
- 115 Patinet S, Vandembroucq D, Falk M L. Connecting local yield stresses with plastic activity in amorphous solids. *Phys Rev Lett*, 2016, 117: 45501
- 116 Castellanos D F, Roux S, Patinet S. Insights from the quantitative calibration of an elasto-plastic model from a Lennard-Jones atomic glass. *Comptes Rendus. Physique*, 2021, 22: 1–28
- 117 Patinet S, Barbot A, Lerbinger M, et al. Origin of the bauschinger effect in amorphous solids. *Phys Rev Lett*, 2020, 124: 205503
- 118 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
- 119 Ma E. Tuning order in disorder. *Nat Mater*, 2015, 14: 547–552
- 120 Gendelman O, Jaiswal P K, Procaccia I, et al. Shear Transformation Zones: State determined or protocol dependent? *EPL*, 2015, 109: 16002
- 121 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]
- 122 Rodney D, Schuh C. Distribution of thermally activated plastic events in a flowing glass. *Phys Rev Lett*, 2009, 102: 235503
- 123 Tordesillas A, Muthuswamy M. On the modeling of confined buckling of force chains. *J Mech Phys Solids*, 2009, 57: 706–727
- 124 Wang Y, Wang Y, Zhang J. Connecting shear localization with the long-range correlated polarized stress fields in granular materials. *Nat Commun*, 2020, 11: 4349
- 125 Le Bouil A, Amon A, McNamara S, et al. Emergence of cooperativity in plasticity of soft glassy materials. *Phys Rev Lett*, 2014, 112: 246001
- 126 Şopu D, Stukowski A, Stoica M, et al. Atomic-level processes of shear band nucleation in metallic glasses. *Phys Rev Lett*, 2017, 119: 195503



- 127 Kosiba K, Şopu D, Scudino S, et al. Modulating heterogeneity and plasticity in bulk metallic glasses: Role of interfaces on shear banding. *Int J Plast*, 2019, 119: 156–170
- 128 Sheng H, Şopu D, Fellner S, et al. Mapping shear bands in metallic glasses: From atomic structure to bulk dynamics. *Phys Rev Lett*, 2022, 128: 245501
- 129 Bian X, Şopu D, Wang G, et al. Signature of local stress states in the deformation behavior of metallic glasses. *NPG Asia Mater*, 2020, 12: 59
- 130 Şopu D. STZ-Vortex model: The key to understand STZ percolation and shear banding in metallic glasses. *J Alloys Compd*, 2023, 960: 170585
- 131 Lemaître A, Caroli C. Rate-dependent avalanche size in athermally sheared amorphous solids. *Phys Rev Lett*, 2009, 103: 65501
- 132 Reddy V S, Nath P, Horbach J, et al. Nucleation theory for yielding of nearly defect-free crystals: Understanding rate dependent yield points. *Phys Rev Lett*, 2020, 124: 25503
- 133 Duan J, Wang Y J, Dai L H, et al. Elastic interactions of plastic events in strained amorphous solids before yield. *Phys Rev Mater*, 2023, 7: 13601
- 134 Popović M, de Geus T W J, Wyart M. Elastoplastic description of sudden failure in athermal amorphous materials during quasistatic loading. *Phys Rev E*, 2018, 98: 40901
- 135 Karimi K, Barrat J L. Correlation and shear bands in a plastically deformed granular medium. *Sci Rep*, 2018, 8: 4021
- 136 Albaret T, Tanguy A, Boioli F, et al. Mapping between atomistic simulations and Eshelby inclusions in the shear deformation of an amorphous silicon model. *Phys Rev E*, 2016, 93: 53002
- 137 Nicolas A, Rottler J. Orientation of plastic rearrangements in two-dimensional model glasses under shear. *Phys Rev E*, 2018, 97: 63002
- 138 Vasoya M, Kondori B, Benzerga A A, et al. Energy dissipation rate and kinetic relations for Eshelby transformations. *J Mech Phys Solids*, 2020, 136: 103699
- 139 Boioli F, Albaret T, Rodney D. Shear transformation distribution and activation in glasses at the atomic scale. *Phys Rev E*, 2017, 95: 33005
- 140 Darve F, Nicot F, Wautier A, et al. Slip lines versus shear bands: Two competing localization modes. *Mech Res Commun*, 2021, 114: 103603
- 141 Liu J, Wautier A, Nicot F, et al. How meso shear chains bridge multiscale shear behaviors in granular materials: A preliminary study. *Int J Solids Struct*, 2022, 252: 111835
- 142 Chen W, Liu Z, Ketkaew J, et al. Flaw tolerance of metallic glasses. *Acta Mater*, 2016, 107: 220–228
- 143 Han Z, Li Y. Cooperative shear and catastrophic fracture of bulk metallic glasses from a shear-band instability perspective. *J Mater Res*, 2009, 24: 3620–3627
- 144 Cao A J, Cheng Y Q, Ma E. Structural processes that initiate shear localization in metallic glass. *Acta Mater*, 2009, 57: 5146–5155
- 145 Pollard J, Fielding S M. Yielding, shear banding, and brittle failure of amorphous materials. *Phys Rev Res*, 2022, 4: 43037
- 146 Packard C E, Schuh C A. Initiation of shear bands near a stress concentration in metallic glass. *Acta Mater*, 2007, 55: 5348–5358
- 147 Qiao J, Jia H, Liaw P K. Metallic glass matrix composites. *Mater Sci Eng-R-Rep*, 2016, 100: 1–69
- 148 Pan J, Ivanov Y P, Zhou W H, et al. Strain-hardening and suppression of shear-banding in rejuvenated bulk metallic glass. *Nature*, 2020, 578: 559–562
- 149 Guan H D, Li C J, Gao P, et al. Research progress in high throughput preparation and characterization of materials (in Chinese). *Rare Metal Mater Eng*, 2019, 48: 4131–4140 [关洪达, 李才巨, 高鹏, 等. 材料高通量制备与表征技术研究进展. 稀有金属材料与工程, 2019, 48: 4131–4140]
- 150 Tang H, Cheng Y, Yuan X, et al. Toughening oxide glasses through paracrystallization. *Nat Mater*, 2023, 22: 1189–1195
- 151 Berthier E, Démery V, Ponsou L. Damage spreading in quasi-brittle disordered solids: I. Localization and failure. *J Mech Phys Solids*, 2017, 102: 101–124
- 152 Langer J S. Shear-transformation-zone theory of plastic deformation near the glass transition. *Phys Rev E*, 2008, 77: 21502
- 153 Spaepen F. A microscopic mechanism for steady state inhomogeneous flow in metallic glasses. *Acta Metall*, 1977, 25: 407–415
- 154 Argon A S. Plastic deformation in metallic glasses. *Acta Metall*, 1979, 27: 47–58
- 155 Barrat J, Lemaître A. Heterogeneities in amorphous systems under shear. In: *Dynamical Heterogeneities in Glasses, Colloids, and Granular Materials*. Oxford: Oxford University Press, 2011
- 156 Falk M L, Langer J S. Dynamics of viscoplastic deformation in amorphous solids. *Phys Rev E*, 1998, 57: 7192–7205
- 157 Chevalier J, Brassart L, Lani F, et al. Unveiling the nanoscale heterogeneity controlled deformation of thermosets. *J Mech Phys Solids*, 2018, 121: 432–446

- 158 Van Loock F, Brassart L, Pardoën T. Implementation and calibration of a mesoscale model for amorphous plasticity based on shear transformation dynamics. *Int J Plast*, 2021, 145: 103079
- 159 Bouchbinder E, Langer J S. Nonequilibrium thermodynamics of driven amorphous materials. I. Internal degrees of freedom and volume deformation. *Phys Rev E*, 2009, 80: 31131
- 160 Bouchbinder E, Langer J S. Nonequilibrium thermodynamics of driven amorphous materials. II. Effective-temperature theory. *Phys Rev E*, 2009, 80: 31132
- 161 Bouchbinder E, Langer J S. Nonequilibrium thermodynamics of driven amorphous materials. III. Shear-transformation-zone plasticity. *Phys Rev E*, 2009, 80: 031133
- 162 Langer J S, Pechenik L. Dynamics of shear-transformation zones in amorphous plasticity: Energetic constraints in a minimal theory. *Phys Rev E*, 2003, 68: 61507
- 163 Langer J S, Manning M L. Steady-state, effective-temperature dynamics in a glassy material. *Phys Rev E*, 2007, 76: 56107
- 164 Haxton T K, Liu A J. Activated dynamics and effective temperature in a steady state sheared glass. *Phys Rev Lett*, 2007, 99: 195701
- 165 Falk M L, Langer J S. Deformation and failure of amorphous, solidlike materials. *Annu Rev Condens Matter Phys*, 2011, 2: 353–373
- 166 Bulatov V V, Argon A S. A stochastic model for continuum elasto-plastic behavior. I. Numerical approach and strain localization. *Model Simul Mater Sci Eng*, 1994, 2: 167–184
- 167 Li L, Homer E R, Schuh C A. Shear transformation zone dynamics model for metallic glasses incorporating free volume as a state variable. *Acta Mater*, 2013, 61: 3347–3359
- 168 Homer E R, Schuh C A. Mesoscale modeling of amorphous metals by shear transformation zone dynamics. *Acta Mater*, 2009, 57: 2823–2833
- 169 Homer E R, Rodney D, Schuh C A. Kinetic Monte Carlo study of activated states and correlated shear-transformation-zone activity during the deformation of an amorphous metal. *Phys Rev B*, 2010, 81: 64204
- 170 Kondori B, Benzerga A A, Needleman A. Discrete shear transformation zone plasticity. *Extreme Mech Lett*, 2016, 9: 21–29
- 171 Needleman A. Discrete defect plasticity and implications for dissipation. *Eur J Mech-A Solids*, 2023, 100: 105002
- 172 Anand L, Su C. A theory for amorphous viscoplastic materials undergoing finite deformations, with application to metallic glasses. *J Mech Phys Solids*, 2005, 53: 1362–1396
- 173 Srivastava V, Chester S A, Ames N M, et al. A thermo-mechanically-coupled large-deformation theory for amorphous polymers in a temperature range which spans their glass transition. *Int J Plast*, 2010, 26: 1138–1182
- 174 Anand L, Ames N M, Srivastava V, et al. A thermo-mechanically coupled theory for large deformations of amorphous polymers. Part I: Formulation. *Int J Plast*, 2009, 25: 1474–1494
- 175 Ames N M, Srivastava V, Chester S A, et al. A thermo-mechanically coupled theory for large deformations of amorphous polymers. Part II: Applications. *Int J Plast*, 2009, 25: 1495–1539
- 176 Zhu W, Liu J, Mao S, et al. A new continuum model for viscoplasticity in metallic glasses based on thermodynamics and its application to creep tests. *J Mech Phys Solids*, 2021, 146: 104216
- 177 Deng J R, Tang X C, Mo Y H, et al. The Drucker-Prager criterion-based plasticity theory of amorphous alloys under the complex stress states. *J Non-Crystal Solids*, 2023, 616: 122453
- 178 Mo Y H, Meng L Y, Tang X C, et al. The toughening mechanism and spatial-temporal evolution of shear bands at different strain rates in Vit-1 metallic glass. *Mater Sci Eng-A*, 2020, 773: 138855
- 179 Kirchner K A, Cassar D R, Zanutto E D, et al. Beyond the average: Spatial and temporal fluctuations in oxide glass-forming systems. *Chem Rev*, 2022, 123: 1774–1840
- 180 Barbot A, Lerbinger M, Lemaître A, et al. Rejuvenation and shear banding in model amorphous solids. *Phys Rev E*, 2020, 101: 33001
- 181 Mo Y H, Tang X C, Meng L Y, et al. A general finite element based non-local theory for the medium-long-range correlation of metallic glasses. *Int J Plast*, 2023, 168: 103673
- 182 Puosi F, Olivier J, Martens K. Probing relevant ingredients in mean-field approaches for the athermal rheology of yield stress materials. *Soft Matter*, 2015, 11: 7639–7647
- 183 Picard G, Ajdari A, Lequeux F, et al. Elastic consequences of a single plastic event: A step towards the microscopic modeling of the flow of yield stress fluids. *Eur Phys J E*, 2004, 15: 371–381
- 184 Sun B, Yu L, Wang G, et al. Chaotic dynamics in shear-band-mediated plasticity of metallic glasses. *Phys Rev B*, 2020, 101: 224111

185 Hu H Y. Applied Nonlinear Dynamics (in Chinese). Beijing: Aviation Industry Press, 2000 [胡海岩. 应用非线性动力学. 北京: 航空工业出版社, 2000]

## Plastic event evolution and nonadjacent interaction of amorphous alloys under dynamic loading

TANG XiaoChang<sup>1,2\*</sup>, DENG JieRen<sup>1</sup>, MO YongHui<sup>1</sup>, MENG LingYi<sup>1</sup> & YAO XiaoHu<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup> Department of Engineering Mechanics, South China University of Technology, Guangzhou 510640, China;

<sup>2</sup> The State Key Laboratory of Nonlinear Mechanics, Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080, China

\*Corresponding authors (TANG XiaoChang, email: [tangxc@scut.edu.cn](mailto:tangxc@scut.edu.cn); YAO XiaoHu, email: [yaoxh@scut.edu.cn](mailto:yaoxh@scut.edu.cn))

Seeking order in chaos and perceiving truth in ambiguity is the lifelong pursuit of many amorphous material researchers. Amorphous alloys are a new class of metal materials achieved using modern metallurgical techniques and entropy regulation, which maintains a liquid-disordered structure by inhibiting the crystallization of alloy melts. They have great potential in strategic core fields, such as national defense and military, aerospace, and rail transit, owing to their superior overall performance. Researchers are primarily concerned with the dynamic mechanical response and damage evolution process of materials under complex loads because these disciplines require equipment to withstand continuous impact loads. The purpose of this paper is to investigate the research and development of plastic event evolution and interaction in amorphous alloys in terms of dynamic loading. A deeper understanding of new phenomena and mechanisms arising in amorphous systems under dynamic stresses can be achieved by elucidating the response of basic units to the external environment and their correlation with macroscopic statistics. The ultimate goal of micro and macromechanism research is to elucidate the direction of technological development and examine the regulatory space underlying phenomena and mechanisms.

**amorphous alloys, damage evolution, numerical simulation**

**PACS:** 62.20.-x, 62.30.+d, 62.50.+p, 62.80.+f

**doi:** [10.1360/SSPMA-2023-0301](https://doi.org/10.1360/SSPMA-2023-0301)