
基于原子尺度模拟的非晶态固体变形物理

王云江, 张猛, 戴兰宏

中国科学院力学研究所非线性力学国家重点实验室, 北京, 100190

E-mail: yjwang@imech.ac.cn

晶体材料由于具有周期性的原子排列, 其塑性变形可以用缺陷(点缺陷、位错、晶界等)的热力学和动力学物理规律描述。而以金属玻璃为代表的一类非晶态固体具有短程有序、长程无序的原子排列结构特征。非晶态物质空间构型的复杂性, 造成我们对其基本变形单元和变形物理认识上的困难。本研究将从原子尺度的计算机模拟出发, 基于经典过渡态理论并结合相应实验, 讨论金属玻璃变形过程中的基本热力学和动力学问题。主要包括: (1) 金属玻璃变形的热力学和动力学参量确定, 以及他们之间的关联。(2) 讨论玻璃变形的多层激活和时间尺度问题。(3) 基于基本物理规律, 构建玻璃强度随温度的变化的本构方程。