

构建非晶态固体的理论体系

(北京大学 朱星 编译自 Emanuela Del Gado. *Physics*, September 10, 2018)

非晶态固体是由原子或者较大颗粒无序堆积而成，但是具有刚性的结构。玻璃、水泥、压实的沙粒，甚至酸奶或者巧克力慕斯都是典型的例子。初看去这些材料好像没有共同点。然而，非晶态固体具有许多共同的力学性能，物理学家多年来一直寻找一种统一的理论，从它们的微结构角度预测其性质。与固体晶体材料不同的是，非晶态材料的刚度与热力学稳定而无内应力的微结构无关。因此，必须探索其他的理论方法。最近，法国巴黎高等师范学院 Eric DeGiuli 向统一理论方向前进了一步。DeGiuli 根据玻璃态和颗粒材料理论，展示了一种用于非晶态固体的普适理论，可以预测应力传递过程。

预测完美固态晶体的力学性质与原子结构关系的方程早已成熟。这些方程可以预测一块固体如何在载荷下变形。而寻找相应的非晶态固体方程相当困难。发展这种理论

的最大障碍是，即使非晶态固体没有承受载荷，其内部总是存在内应力，这是材料在冷却固化过程中形成的。比如，当压实沙粒时，晶粒之间的摩擦力，以及由材料外表面的限制会产生内应力。随着材料本身和变形过程不同，这些内应力可以导致强化(如建筑中的预应力材料)，或者提高韧性。实验上测量内应力的分布非常困难，载荷状态下的应力分布非常复杂，这是由于应力在材料中不同位置具有相关性。为了预测材料在压缩条件下的变形过程需要了解这些相关性。

2009 年 Silke Henkes 和 Bulbul Chakraborty 做出重要的理论突破。他们采用了处理颗粒固体的非平衡统计力学方法来处理压实沙粒等非晶态固体。DeGiuli 的场理论是建立在 Henkes 与 Chakraborty 方程基础上，不但可以应用于颗粒固体，也可以用于非晶态固体。他推导的应力相关方程可以用于二维及三维。

当应用于二维材料时，非晶态固体中的应力表现为长程相关，随着 $1/r^2$ 衰减。在三维条件下，DeGiuli 方程预言应力相关性随 $1/r^3$ 下降。

DeGiuli 等人所展示的长程应力相关性是弹性固体的特征。这种固体通常用弹性理论来描述，即固体中每个微小体的形变都是弹性的。然而，DeGiuli 预言，在应力场中加上两种限制条件即可以得到类似的相关性。首先，材料结构应当是各向同性的，其次，作用于每个小体积的合力和力矩为零，从而导致非晶态固体内的类弹性相关性，而不需要在很小尺度的弹性。这个新理论提供了一种统一的解释，为什么非晶态固体不具备热力学意义上的稳定结构，但在大多数条件下，像晶体材料一样抵抗形变。压实的沙粒是个有趣的例子：当沙粒处于力学平衡状态时，尽管沙粒之间不存在弹性相互作用，但是它具有类似固体的性质。类似地，这种统一理论可以解释为什么弹塑性理论可以很好地应用于非晶态材料。

DeGiuli 所发展的理论可以在更大范围预测应力相关性，比如用来描述非晶态固体承受严重形变，或环境条件改变的响应。然而，场理论是处理连续介质的理论，即仅能应用于尺度远大于颗粒间距的情况。确定这个尺度和确认 DeGiuli 理论有别于现有的连续介质理论将是重要的未来工作。

这一研究结果发表在 *Phys. Rev. Lett.*, 121, 118001(2018) 和 *Phys. Rev. E*, 98, 033001 (2018) 上。



压实的沙粒(左)、巧克力慕斯(中)和混凝土(右)都是非晶态固体，即力学上结实而结构无序的材料。DeGiuli 发展了一种新的理论，解释这种普遍存在材料的强度