阻塞相变:无序体系的一阶相变*

邓越1,2 潘登1 金瑜亮1,2,3,†

- (1 中国科学院理论物理研究所 北京 100190)
- (2 中国科学院大学物理科学学院 北京 100049)
- (3 国科温州研究院 温州 325001)

1 阻塞相变背景介绍

在颗粒物质、胶体、泡沫、细胞等无序非平 衡体系中,从流体态到非晶固态的转变过程被称 为"阻塞相变"^[1-8]。这类体系粒子之间的相互 作用能量比热运动能量高很多个数量级,因此可 以等效地认为处于零温状态。不同于常见的液固 相变,阻塞相变是由于体积分数(而非温度)变化 导致的,是一种非平衡相变。当体积分数超过阻 塞相变体积分数 φ_{J} 时,粒子间由于相互接触形成 稳定的力学网络,从而成为固态(图1)。在快速 压缩的过程中,三维(单分散)体系的 $\varphi_{J} \approx 0.64$ ^[9], 而二维(双分散)体系的 $\varphi_{J} \approx 0.84$ ^[10]。近年来的研 究发现, φ_{J} 还会和压缩速率等制备过程相关^[11]。 阻塞相变前后体系的结构都是无序的,明显不 同于液体的结晶过程。

理解阻塞相变的物理本质是统计物理中有挑 战性的问题。甚至其中的一些基本问题,例如它



2024-09-17收到

† email: yuliangjin@mail.itp.ac.cn DOI: 10.7693/wl20241006 CSTR: 32040.14.wl20241006

究竟是一阶相变还是二阶相变,都一直存在争议。 在阻塞相变附近,体系似乎同时具有一阶和二阶 相变的特征。在准静态压缩或剪切的过程中,作 为序参量的粒子平均配位数(平均接触数) $Z \pm \varphi_1$ 处不连续地从Z=0跳跃到 $Z_{iso}=2d$,其中 $Z_{iso}=2d$ 是d维空间具有刚性的最小配位数,称为等静 定(isostatic)配位数——从这一角度,阻塞相变具 有一阶相变的典型特征。另一方面,阻塞相变也 呈现二阶相变的特征,体现为如下多种发散的长 度尺度。(1)由过剩接触数ΔZ=Z-Z_{iso}决定的等静 定关联长度随体系趋近于相变点而发散, $l^* \sim \Delta Z^{-1} \sim (\varphi - \varphi_1)^{-1/2} [12, 13]$ 。当体系的尺度小于 l^* 时,边界上的力学扰动将导致失稳。(2)在 φ_1 处, 单粒子接触数Z的空间分布具有超均匀性(空间密 度涨落小于随机分布的情形)^[14, 15],其对应的超均 匀关联长度在相变点发散, $\xi_{I} \sim \Delta Z^{-\nu_{I}}$ (其中 ν_{I} 为对 应的指标)。(3)在阻塞相变发生前,体系处于全阶 复本对称破缺(微观构型组成的相空间具有分形结 构)的Gardner相^[16, 17]。Gardner相的临界性也在阻

> 塞相变中体现,即粒子的笼振动动力学 (caging vibrational dynamics) 行为具有长 程关联,对应了发散的笼关联长度, $\xi_{G} \sim \infty$ 。(4)在流变学模拟中,非阻塞流体 的黏度在趋近相变点的过程中发散,对应 了发散的流变学关联长度, $\xi_{R} \sim (\varphi_{J} - \varphi)^{-v}$, 其中 $v = 1^{[18]}$ 。

> 为了澄清阻塞相变的物理本质,有 限尺寸的标度分析尤为重要。近期,我 们通过系统的有限尺寸标度研究发现,

^{*} 国家自然科学基金(批准号: 12161141007; 11935002; 11974361; 12047503)、中国科学院(批准号: ZDBS-LY-7017; KGFZD-145-22-13)、国科温州研究院(批准号: WIUCASQD2023009)资助项目

在准静态加载的条件下,阻塞相变既不是普通的一阶相变,也不是普通的二阶相变,而是一种无序一阶相变(first-order transition with quenched disorder)^[19]。

2 无序一阶相变及其标度行为

平衡态体系符合涨落耗散定理。例如,在 伊辛模型中,表征涨落的非连接磁化率 χ_{dis} = $N(\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2)$ 和表征响应的连接磁化率 χ_{con} = $d\langle m \rangle/dh$ 相等, $\chi_{dis} = \chi_{con} = \chi$,其中*m*为磁化强 度(序参量),*h*为外磁场,*N*为自旋数(体系大小)。 有限尺寸标度理论给出,在二阶相变处 $\chi \sim N^{\gamma'(dv)}$, 其中 γ 和 v 都是临界指标;而在一阶相变处, $\chi \sim N^{[20]}$ 。

上述有限尺寸标度在零温(或低温)无序体系 中不再成立。当温度足够低时,无序涨落的影响 超过了热涨落,涨落耗散定理不再满足。在有限 大体系中,相变点本身(如阻塞相变的 φ_{i}^{N})由于无 序的存在而有一个分布 $\rho(\varphi_{i}^{N})$,从而改变了有限 尺寸标度。这类体系的一阶相变称为"无序一 阶相变"。在无序一阶相变附近,非连接磁化率和 连接磁化率满足标度关系, $\chi_{dis}\sim\chi_{con}^{2}\sim N$ 。这一特有

3 零温准静态加载下的阻塞相变是无 序一阶相变

从统计物理的角度研究阻塞相变的性质,首 先需要定义一个统计系综。在文献[19]的颗粒模 型模拟工作中,我们首先用无热准静态循环剪切 的方法制备了一个非平衡统计系综。在不同的体 积分数 φ 以及循环强度(最大应变) ymax 下,经过多 次循环后,体系会"吸收"到一个固定的构型 (称为可逆相),或者在不同构型间持续演化(称为 不可逆相),如图2(a)所示。在不可逆相中,每次 循环结束后收集样本,发现粒子的轨迹呈现类似 扩散运动的行为,如图2(b)所示。这意味着即使 在零温状态下,通过循环剪切这种外力加载的方 式,非平衡颗粒系统也可以有效地遍历相空间, 从而定义一个统计系综。更细致的分析发现,这 一系综中包括了四种状态,除了前文提到的非阻 塞态、(过)阻塞态,还存在部分结晶态和易碎态 (fragile state),如图2(c)所示。其中阻塞态和易碎 态的区别在于,前者存在所有方向都发生渝渗的 力网,而后者的力网只在单一方向发生渝渗。力 学稳定性分析发现,部分结晶态和易碎态在力学 微扰下会变成非阻塞态。这意味着在严格的准静



图2 (a)颗粒物质无热准静态剪切相图; (b)不可逆相中的粒子轨迹(插图为均方位移,实线代表 均方位移和时间成正比的扩散行为); (c)四种典型的构型; (d)二维阻塞相变附近(*φ*≈0.844)配位数 的概率分布(所有部分结晶态和易碎态都统计为非阻塞态)



图3 阻塞相变的磁化率 (a) 非连接磁化率 χ_{dis} ; (b) 连接磁化率 χ_{con} ; (c) χ_{dis}/χ_{con}^2 的有限 尺度标度行为。其中 φ_1^∞ 为热力学极限下的阻塞相变体积分数。黑色实线为理论值,黑 色虚线和红色虚线分别表示在极值附近的零阶近似和最低阶展开理论结果

态极限下(剪切速率严格趋于零),该系综只会包括非阻塞态和阻塞态,其概率分布如2(d)所示。

上述统计系综的非连接磁化率 χ_{dis} 和连接磁 化率 χ_{con} 满足一定的有限尺寸标度,如图3(a),(b) 所示,即 $\chi_{dis}/N \pi \chi_{con}/N^{1/2}$ 都可以写成 $(\varphi - \varphi_1^{\infty})N^{1/2}$ 的函数,其中 φ_1^{∞} 为热力学极限下的阻塞相变密 度,N为粒子数。模拟数据与假设 $\rho(\varphi_1^N)$ 为高斯 分布推导的磁化率理论结果一致。特别是,在阻 塞 相变附近(图3(c)的极小值),磁化率具有 $\chi_{dis} \sim \chi_{con}^2 \sim N$ 的标度行为,从而为阻塞相变是无序

参考文献

- [1] Liu A J, Nagel S R. Nature, 1998, 396:21
- [2] Torquato S, Stillinger F H. Reviews of Modern Physics, 2010, 82: 2633
- [3] van Hecke M. J. Phys. Condens. Matter, 2010, 22:033101
- [4] Liu A J, Nagel S R. Annual Review of Condensed Matter Physics, 2010,1(1):347
- [5] Baule A, Morone F, Herrmann H J et al. Reviews of Modern Physics, 2018, 90:015006
- [6] Charbonneau P, Kurchan J, Parisi G et al. Annual Review of Condensed Matter Physics, 2017, 8:265
- [7] Behringer R P, Chakraborty B. Reports on Progress in Physics, 2018,82:012601
- [8] Pan D, Wang Y, Yoshino H et al. Physics Reports, 2023, 1038:1
- [9] Makse H A, Johnson D L, Schwartz L M. Phys. Rev. Lett., 2000, 84:4160
- [10] O'hern C S, Silbert L E, Liu A J et al. Phys. Rev. E, 2003, 68: 011306
- [11] Chaudhuri P, Berthier L, Sastry S. Phys. Rev. Lett., 2010, 104: 165701

一阶相变的观点提供了直接 的证据。无序一阶相变理论 也可以解释先前报道的快速 压缩淬火系综的数据^[23]。因 此,在无热(无序涨落主导)、 准静态加载(不存在部分结 晶态、易碎态等不稳定瞬态) 的条件下,阻塞相变是无序 一阶相变的结论可能具有普 遍性。

4 展望

除了颗粒体系,无序一阶相变也可能出现在 其他非平衡体系,如活性物质等。该研究为理解 液体和非晶固体之间的转变提供了新的视角,凸 显了无序的存在可以改变标准相变的标度率,其 方法有望拓展到其他无序非平衡相变的研究。

致 谢 感谢中国科学院理论物理研究所的高性能计算平台的支持。

- [12] Wyart M, Nagel S R, Witten T A. Europhysics Letters, 2005, 72:486
- [13] Silbert L E, Liu A J, Nagel S R. Phys. Rev. Lett., 2005, 95: 098301
- [14] Hexner D, Liu A J, Nagel S R. Phys. Rev. Lett., 2018, 121: 115501
- [15] Hexner D, Urbani P, Zamponi F. Phys. Rev. Lett., 2019, 123: 068003
- [16] Charbonneau P, Kurchan J, Parisi G et al. Nat. Commun., 2014, 5:3725
- [17] Berthier L, Charbonneau P, Jin Y et al. Proc. Natl. Acad. Sci. USA, 2016, 113:8397
- [18] Olsson P, Teitel S. Phys. Rev. Lett., 2007, 99:178001
- [19] Deng Y, Pan D, Jin Y. Nat. Commun., 2024, 15:7072
- [20] Binder K. Ferroelectrics, 1987, 73:43
- [21] Ozawa M, Berthier L, Biroli G et al. Proc. Natl. Acad. Sci. USA, 2018,115:6656
- [22] Zhang K, Li X, Jin Y et al. Soft Matter, 2022, 18:6270
- [23] O'Hern C S, Langer S A, Liu A J et al. Phys. Rev. Lett., 2002, 88:075507