arXiv:2601.09827v1 [cond-mat.other] 14 Jan 2026

关键材料评估的熵方法

Alan J. Hurd

美国新墨西哥州洛斯阿拉莫斯，邮政编码 87545，邮政信箱 1663，洛斯阿拉莫斯国家实验室。

贡献作者：ahurd48@msn.com；

摘要

大多数材料关键性评估方法都会对供应风险和社会重要性进行评分。基于市场的标准可为评估提供定量指标。本文提出一种基于地质熵函数的统计方法，可应用灵活的约束，例如经济、国家安全相关或监管方面的约束。作为示例，该方法阐述了特定元素的元素价格与地壳丰度之间的关系，而这两者对供应风险都很重要。该方法或可用于由集体决策产生且呈高度峰值概率分布的参数。

关键词： 关键材料、地质学、供应链、可持续性、量子材料、材料可获得性

1 引言

正如2025年初的地缘政治事件所揭示的，关键材料[1] 的供应风险可能急剧攀升。评估供应链韧性的工具是关键性评估（CA），它会评估化学元素、

[1]本文使用的关键实体术语按集合规模递增的顺序包括 $isotopes \subseteq elements \subseteq minerals \subseteq materials \subseteq commodities$；它们不一定是稳定的、非燃料的、晶态的、固态的，甚至不一定处于凝聚态。关键材料 用作通用标签。在这一非传统约定中， $isotopes$ 主要包括人造元素，例如金同位素（如 ^{198}Au） Tc、Pu和Pm。 $Elements$ 是包括其同位素在内的单核化学元素，例如金（^{197}Au）、天然 He 及其同位素 ^{3}He，以及 ^{4}He。 $Minerals$ 是自然生成的元素、化合物、玻璃和混合物，例如金、汞、斯石英和黑曜石。 $Materials$ 是经过加工的矿物和元素，包括牙科金合金、钢、氮化镓和重水。 $Commodities$ 是市场上交易的任何元素、矿物或材料，例如 ^{3}He、铜、硅和砾石。

矿物或材料的社会重要性和供应风险；重要性和风险都高的元素最为关键。因此，例如，许多稀土元素（如镝）都落在高风险、高重要性象限，这是因为它们在电动汽车和发电机所用高强度磁体的能源安全方面发挥着作用。 Dy 和所有稀土元素的供应风险都很高，这是因为中国在采矿和产品制造方面几乎拥有垄断地位。

美国地质调查局（USGS）最新发布的关键大宗商品清单 [1] 于2025年3月发布，共有84项，其中约30项不是化学元素，而是矿石或加工材料。清单中包括铝、硅、黏土、砾石和沙等大宗高用量材料；这些材料在美国都不存在固有的供应风险，但由于用量大且重要性高，其风险评分超过了风险阈值。

美国官方的关键矿产清单与美国地质调查局的大宗商品清单相互独立，以CA方法为基础 [2], [3]，被视为国内用途的“黄金标准”；美国地质调查局于 2022 [4]对其进行了更新。该清单包含50种矿物和元素。尽管《美国能源法》 2020 [2] 将“关键”定义为“对美国经济或国家安全至关重要”，但该法律的适用范围立即排除了铀、钍和人造钚等燃料矿物。该清单还排除了氦，以及提取其他元素时产生的副产品，除非该副产品在经济上可行。2022年清单未纳入同位素，这并不令人意外。

1.1 关键性评估的熵方法

在约束条件下分析大宗商品价格，一种颇有前景的方法是采用统计变分方法。我们与 Anna University 的 R. Perumal Ramasamy 合作 [5], ，推导出了一个（开采）地质熵的表达式，并用它探索了一系列能够很好拟合现有数据的效用函数。

ECE研究小组联合主席、内华达州州立地质学家 Jonathan Price 整理了大多数天然化学元素的价格—丰度关系[6]。值得注意的是，价格与地壳丰度之间存在一种虽有些噪声、但十分明显的幂律关系。将地壳丰度换算为开采质量后，图1 中的双对数图显示，尽管存在噪声，幂律模式仍跨越数个数量级，并带有一个拐点；这一非凡发现促使我们探寻其根本原因，以此为材料关键性评估提供思路。价格和丰度（或开采质量）只是供应风险的两个因素，通过某种机制将二者联系起来，就能消去一个变量；此类变量还有很多，其他变量或许也可以用熵分析。

经济学家此前已经探索过熵方法。Yakavenko 和 Rosser [7] 研究了价格熵，并将其应用于供需经济学。其基本假设是，市场通过众多参与者的选择探索许多可能的配置，这些参与者从采矿工程师到投资者不等。市场力量作用下选定的若干变量，可能适用于熵相关论证。在此，我们通过探索价格如何根据地壳丰度进行调整，将熵应用于地质组成。

图1 显示价格与开采质量的关系，而开采质量又对应于地壳丰度 $\{p_1,\ p_2,\ ...p_i,\ ...p_N\}$ 其中 $\{n_1,\ n_2,\ ...n_i,\ ...n_N\}$ 其中 $N \approx 100$ 是元素数量

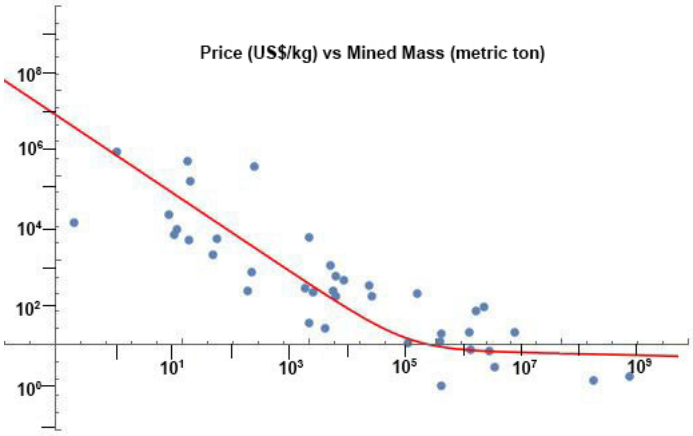

图 1 39 种化学元素的价格（美元/千克）与开采质量（公吨）数据，显示出幂律关系。价格与地壳丰度之间也存在类似的幂律关系。 [Jonathan Price，个人通信]

（或元素类别）。可以选择任一组来构建熵函数；此处我们选择 n_i 。目标是在约束条件下改变 n_i 的分布，以找到价格的最优变化。

我们的基本假设是，数值分布$\{n_i\}$ 在最可能值附近高度集中。理解分布函数 $W(n_i)$ 的一种清晰方式，是考虑一个由区域地质构成的系综，并将可访问（丰度）态的数量 Ω 定义为熵：

$$S_m = -k\ log\ \Omega. \tag{1}$$

尽管 k 通常是玻尔兹曼常数，但鉴于我们讨论的是地质量而非热力学量，我们暂不为其赋值，因为它会与积分常数组合在一起。

按照朗道和栗弗席兹的《统计物理学》，可以迅速地对公式 1 进行合理化处理，并将其化为有用的形式 [8]。

在$\{n_i\}$的相空间中，或者等价地，在（提取出的）质量$\{m_i\}$中，态密度 $\rho(m$预计会尖锐地集中在平均质量$\langle m\rangle$附近，从而使 $W(m)$呈现窄幅尖峰， Δm 如图2所示。

为简化归一化，包围 $W(m)$峰值的方框宽度为Δm。定义 M 为所有元素的总质量后， $W(m)$的归一化和平均质量$\langle m\rangle$为

$$W(\langle m\rangle)\Delta m \equiv 1, \tag{2}$$

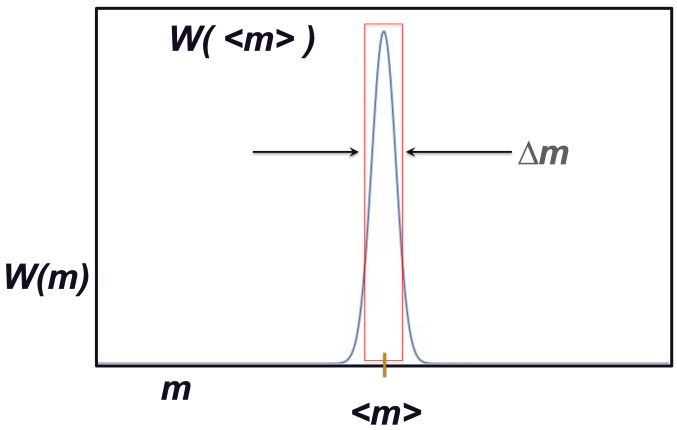

图2 区域地质系综中元素质量的预期分布 m_i

$$\langle m\rangle = \sum_{i=1}^{N} m_i n_i, \tag{3}$$

$$M = N\langle m\rangle. \tag{4}$$

这一推导的下一步是通过其定义，将可及态数 Ω 与态密度 $\rho(m)$联系起来：

$$\rho(m)dm \equiv \frac{d\Omega}{dm}dm \tag{5}$$

在平均质量$\langle m\rangle$处，相空间 Ω 的体积可表示为任意基准值 Ω_0 减去一个微分体积 Δ Ω,

$$\Delta\Omega = \Omega(\langle m\rangle) - \Omega_0 \tag{6}$$

综合各项结果,

$$S_m = k\log\Delta\Omega \tag{7}$$

$$= k\log\frac{1}{n(\langle m\rangle)} \tag{8}$$

$$= -k\log n(\langle m\rangle) \tag{9}$$

$$= -k\langle\log n(m)\rangle \tag{10}$$

$$= -k\sum_{i=1}^{N} n_i\log n_i \tag{11}$$

方程11 是使用变分法求极值的起点。熵 S_m 单独来看并没有太大用处，直到我们对元素总数和现实世界的经济学施加约束。加入经济学约束之前，不妨先思考一下 S_m 的含义，此时元素丰度分布仍未受到约束。

首先，考虑地质组成仅由一种元素构成的情况 $n_0 = 1$。方程11 得出 $S_m = -kn_0 \log n_0 = 0$。这种地质组成可视为可能的最有序状态。也许这种情况唯一的实例就是中子星！

怎样的地质组成最无序？我们使用拉格朗日乘子 [9]，并对元素数量施加约束

$$\sum_{i=1}^{N} n_i = 1, \tag{12}$$

以最大化熵，得到

$$n_i = 1/N \tag{13}$$
$$S_m = Nk \log N. \tag{14}$$

最无序的地质组成中，分布里的各元素所占比例相等。

虽然可以探讨其他简单的地质组成，但更值得研究的是一项基本的经济约束，即有限预算约束。

$$\sum_{i=1}^{N} m_i p_i = T, \tag{15}$$

其中，常数 T 表示可用于采矿、提取、精炼和加工的货币总额。

为求得 S_m 满足约束方程 12 和 15 的极值，我们采用拉格朗日乘子法 [9]。当该量的微小变化为零时，极值即出现

$$U_m = S_m + \alpha N + \beta T, \tag{16}$$

其中，U_m 是效用函数，α 和 β 是待确定的拉格朗日乘子。下标 m 提醒我们，我们选择通过改变分布 $\{m_i\}$或等价地改变 $\{n_i\}$来求极值。

$$0 = \delta(U_m) \tag{17}$$
$$= \delta(S_m + \alpha N + \beta T) \tag{18}$$

$$= \sum_{i=1}^{N} [(-k(1+\log n_i)\delta n_i + \alpha m_0 \delta(n_i p_i) + \beta \delta n_i] \tag{19}$$

利用变化量 δn_i 彼此独立且很小这一事实，可得到一个简单的微分方程，以及价格 $p(n)$ 的解

$$\alpha m_0 (p(n) + \frac{dp(n)}{dn}) = -\beta + k(1+\log n) \tag{20}$$

$$p(n) = \frac{c}{n} + \eta(\log n - \lambda) \tag{21}$$

其中， c 和 η 是通过拟合数据确定的常数。方程21 立即表明， p 随 n^{-1} 成比例变化，这与小 n时的数据一致。对39种元素的拟合结果见图1。

能够将价格与地壳丰度或采矿产量联系起来，在因缺乏定量数据而转向定性分析进行关键性评估时很有帮助。找出市场中的潜在机制，对于更深入地理解关键性行为也很重要。尽管所提出的熵量是随机变量，因为它们源自熵概率分布，但它们并非随时间变化的动态预测因子；通过深入研究，例如考察价格数据时间序列，或许可以解释价格冲击等转变，或关键性的演变。目前，本研究旨在以先前的工作 [7]为基础，探究能否识别出潜在的市场机制。

1.2 致谢与资助

若没有 Anna University 的 R. Perumal Ramasamy 在学术上的重要贡献，本文便无从完成；他是参考文献21的合著者，本文部分内容对此作了总结。这篇综述源自材料研究学会2025年春季会议。谨向我的同事及经常合作的作者、来自 Stanford University 和 KITECH 的 Min-ha Lee 致谢，他组织了此次研讨会，并指定我担任特邀演讲人。本研究部分由美国能源部通过洛斯阿拉莫斯国家实验室提供支持。洛斯阿拉莫斯国家实验室由 Triad National Security, LLC 代表美国能源部国家核安全管理局运营（合同编号 89233218CNA000001）。

参考文献

[1] 美国地质调查局工作人员：《2025年矿产商品摘要》。技术报告，美国地质调查局（2025年）。https://doi.org/10.3133/mcs2025[2] 美国国会：《2020年能源法》。技术报告，美国政府（2020年）[3] Nassar, N.T., Fortier, S.M.：《2021年美国关键矿产审查与修订的方法论和技术投入》。技术报告，美国地质调查局（2020年）

[4] Applegate, J.D.: 《2022年关键矿产最终清单》。技术报告，美国地质调查局（2022年）[5] Ramasamy, R.P., Hurd, A.J.: 《以最小努力原则评估元素价格作为可持续性指标》。能源与可持续性材料研究 **8**, 16（2021年）https://doi.org/10.1557/s43581-020-00001-5[6] Jaffe, R.L., Price, J.: 《能源关键元素：为新兴技术保障材料》。技术报告，美国物理学会（2011年）[7]Yakavenko, V.M., Rosser, J.B.: 《货币、财富与收入的统计力学》。《现代物理评论》**81**, 1703（2009年）https://doi.org/10.1103/RevModPhys.81.1703[8] Landau, L.D., Lifshitz, E.M.: 《统计物理学》。培格曼出版社，纽约州埃尔姆斯福德（1978年）[9] Forray, M.J.: 《科学与工程中的变分法》。麦格劳-希尔图书公司，纽约市（1968年）

2 作者贡献

本研究仅由唯一作者 AJH 完成。在“熵方法”部分，合作者 R. Perumal Ramasamy 的贡献已在参考文献21 中予以适当引用；将该部分扩展以发展地质熵（21中未报告）则是 AJH 的工作。

3 利益冲突

不适用。

4 数据可用性

表1 列出了本研究使用的网站，以及为核查其可用性而访问这些网站的日期。此列表并非旨在涵盖所有来源，因为网上还有许多其他矿物和元素信息来源。

关键元素的网络资源			
元素	机构	网站	访问日期
all	U.S. 地质调查, 矿物商品概览	$https://www.usgs.gov/centers/-national-minerals-information-center$	2025年9月2日
all	《CRC化学与物理手册》, 第97版	$https://mathguy.us/BySubject/Chemistry/CRC-Handbook-of-Chemistry-and-Physics-97.pdf$	2025年9月2日
He	Sigma-Aldrich	$http://www.webelements.com/helium/$	2025年9月2日
C, U	US 能源信息行政管理	$https://www.eia.gov/nuclear/$	2025年9月2日
Nd	Statista: 亚洲人金属, Stormcrow	$https://www.statista.com/outlook/-io/mining/base-metals/asia$	2025年9月2日
REE	Argus Media (原名 metal-pages.com)	$https://www.argusmedia.com/en/commodities/metals$	2025年9月2日
Sm	Inframat先进材料-als	$http://www.advancedmaterials.us/-62R-0801.htm$	2025年9月2日
U	世界核能协会	$http://www.worldnuclear.org/info/-inf23.html$	2025年9月2日
U	Costmine Intelligence	$http://www.infomine.com/-investment/historicalcharts/-showcharts.asp?c=uranium$	2025年9月2日

表1 本研究所用元素的网络资源。REE 表示稀土元素。