

李 梧◎著

准晶与声子晶体 研究中的解析解

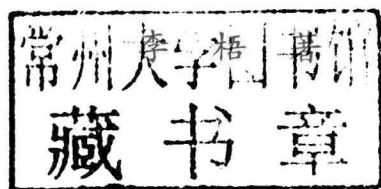
ZHUNJING YU SHENGZIJINGTI
YANJIUZHONG DE JIEXIJIE



知识产权出版社
Intellectual Property Publishing House

国家基金项目编号:11402158

准晶与声子晶体研究中的解析解



知识产权出版社

全国百佳图书出版单位

图书在版编目(CIP)数据

准晶与声子晶体研究中的解析解/李梧著. —北京:知识产权出版社, 2016. 6

ISBN 978-7-5130-3550-7

I. ①准… II. ①李… III. ①准晶体—研究 ②声子—晶体—研究 IV. ①O7

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2015)第 115368 号

内容提要

本书首先介绍准晶与声子晶体的发现及其概念,然后阐述其弹性性质,接着给出了一些常见准晶与声子晶体中的缺陷问题的解析解法,得到解析解。采用与经典弹塑性研究类似的处理方式,最后探讨了准晶弹塑性变形的一些简化模型,得到了这些模型中准晶在变形时的一些断裂参量,可能为相位子场在准晶变形中的作用做出定量分析。

责任编辑:刘晓庆 于晓菲

责任出版:孙婷婷

准晶与声子晶体研究中的解析解

ZHUNJING YU SHENGZI JINGTI YANJIU ZHONG DE JIEXIJIE

李 梧 著

出版发行:知识产权出版社 有限责任公司

网 址: <http://www.ipph.cn>

电 话: 010-82004826

<http://www.laichushu.com>

社 址: 北京市海淀区西外太平庄 55 号

邮 编: 100081

责编电话: 010-82000860 转 8363

责编邮箱: yuxiaofei@cnipr.com

发行电话: 010-82000860 转 8101/8029

发行传真: 010-82000893/82003279

印 刷: 北京中献拓方科技发展有限公司

经 销: 各大网上书店、新华书店及相关专业书店

开 本: 720mm×960mm 1/16

印 张: 11.25

版 次: 2016 年 8 月第 1 版

印 次: 2016 年 8 月第 1 次印刷

字 数: 162 千字

定 价: 45.00 元

ISBN 978-7-5130-3550-7

出版权专有 侵权必究

如有印装质量问题,本社负责调换。

序 言

准晶与声子晶体都是近些年发现的功能材料,由于它们的性质优良,其相关研究受到国内外越来越多学者的关注。在这一背景下,作者将准晶与声子晶体研究领域小组人员得到的最新解析解进行整理,集结成书。

准晶与声子晶体的出现使得其在固体缺陷、应用数学、断裂力学等领域的研究逐渐活跃起来。本书仅收录一些新近得到的成果,该成果获得所需要的基础知识,如弹性力学、复变函数等,读者可以查阅相关书籍。本书包括两部分:第一部分介绍了采用复变函数法对准晶的缺陷与裂纹问题做的一点工作,由于准晶塑性变形的本构关系尚未建立,我们也采用经典弹性中的一些简化模型来研究其塑性性质,得到了一些相关参量,希望能为准晶断裂力学的建立做出一点贡献;第二部分首先介绍声子晶体和其研究方法,主要叙述平面波展开法,然后给出带基底层状声子晶体的解答。内容安排如下:第1章与第2章主要介绍准晶和声子晶体的概念及其研究现状;第3章到第7章讲述它们的解析解法以及所得结果。

目前国内外关于准晶与声子晶体的专著并不多,主要侧重于它们的物理性质方面,本书侧重于它们的解析方法研究方面。书中既关注了国内学者的工作,也关注了国外学者的工作,由于国内外学者对准晶力学的贡献是多方面的,限于篇幅和著者的学识水平,我们只介绍著者熟悉的若干领域内国内外学者的创造性工作。对于国内外学者的其他方面的工作,感兴趣的读者可以查阅他们的专著。

本书的出版得到了国家自然科学基金委的资助(批准号:11402158)。在此,感谢国家自然科学基金委、太原理工大学、北京理工大学及其所有帮助过我们的朋友们。

由于作者水平有限,书中难免有不妥之处,欢迎广大读者批评指正。

作者

2016年3月

目 录

第 1 章 引 论	1
1.1 准晶的发现	1
1.2 准晶的结构分类与描述简介	4
1.3 声子晶体概念的提出	8
第 2 章 准晶与声子晶体弹性及其研究进展	10
2.1 准晶弹性理论来源	10
2.2 准晶弹性广义胡克定律	15
2.3 边界条件和初始条件的提法	19
2.4 复变函数方法在材料弹性理论中应用	20
2.5 准晶弹性研究现状	23
2.6 声子晶体理论基础与研究现状	30
第 3 章 一维准晶弹性缺陷问题及其解答	34
3.1 引言	34
3.2 一维六方准晶三维弹性及其化简	35
3.3 一维六方准晶反平面问题中的 Griffith 裂纹	41
第 4 章 二维准晶平面问题及其解答	48
4.1 十次对称二维准晶平面问题的应力势函数与基本解	49

4.2 十次对称二维准晶平面问题椭圆孔边一段受均衡压应力作用	60
4.3 十次对称二维准晶平面问题中一些常见裂纹的复势	66
第 5 章 三维准晶弹性问题的复变函数解法	77
5.1 三维二十面体准晶基本公式	77
5.2 三维准晶椭圆孔边一段上受均布压力	91
5.3 三维二十面体准晶反平面问题控制方程	95
5.4 带 V 型缺口的二十面体准晶反平面问题实例	98
第 6 章 准晶非线性变形效应的初步探讨	102
6.1 准晶裂纹的断裂力学准则	102
6.2 准晶塑性变形行为—前人的探索工作	106
6.3 准晶反平面 Dugdale 模型问题	109
6.4 二维十次对称准晶平面 Dugdale 模型问题	119
6.5 三维二十次面体准晶平面中心 Griffith 裂纹 Dugdale 模型	132
第 7 章 声子晶体研究方法及其应用	138
7.1 声子晶体波动方程的的平面波展开	139
7.2 覆盖在基底上层状声子晶体带结构实例	145
参考文献	157

第 1 章 引 论

1.1 准晶的发现

直至 20 世纪 80 年代,人们把固体材料分为两大类:一类是晶体,晶体中原子排列是有规则的,主要体现在原子排列有周期性,或者长程有序性;另一类是非晶体,与晶体具有很强的周期对称性或者说规律性不同,非晶体没有任何长程对称性或长程有序性,原子混乱排列。德国科学家在 1850 年就总结出晶体的平移周期性,即晶体中原子的三维周期排列方式可以概括为 14 种空间点阵。受这种平移对称约束的影响,晶体的旋转对称只能有 1、2、3、4、6 种旋转轴。这种限制就像生活中不能用正五边形拼块铺满地面一样,晶体中原子排列是不允许出现 5 次或 6 次以上的旋转对称性的。

1984 年前后以色列学者 Shechtman 在骤冷形成的微米尺寸的 Al-Mn 合金微粒的电子衍射图样中发现其具有正二十面体相的五重旋转对称性(图 1.1),并且确证这些合金相是具有长程定向有序而没有周期平移有序的一种封闭的正二十面体相,并称为准晶体^[1]。几乎与此同时,中国科学院沈阳金属所的郭可信院士小组也独立发现了 Ti-V-Ni 急冷合金具有二十面体准晶相^[2]。随后,在其他一些合金中,具有十次^[3]、十二次^[4]和八次^[5]旋转对称轴的电子衍射图的准晶相也被相继发现。由此可见准晶体是一种介于晶体和非晶体之间的固体。它们具有完全有序的结构,然而又不具有晶体所应有的平移对称性,因而可以具有晶体所不允许的宏观对称性。准晶是具有准周期平移格子构造的固体,其中的原

子常呈定向有序排列,但不作周期性平移重复,其对称要素包含与晶体空间格子不相容的对称(如五次对称轴)。不仅如此,在 V-Ni-Si 合金中还发现了具有立方对称性的晶体^[6,7],到目前为止,已有上百种合金中都被观察到准晶相^[8],它们大部分都是 Al 基于二元素或三元素合金或者都是与 Al 相类似的 Ga 及 Ti 元素的合金^[9],并且还有很多新的准晶在不断地被发现。早期发现的准晶是亚稳态的,不适合进行一些力学性能测试,对其研究以微观结构和形成机制为主。现在,在 Al-Li-Cu、Al-Cu-Fe 和 Al-Cu-Co 等合金系中已发现了大量热力学稳定的准晶^[10],而且,人们可以通过普通的凝固方法制备出高质量、大单晶准晶^[11]。因此,对稳定的准晶结构内部沿不同方向可以做力学性能和实验分析及测量等。准晶作为轻质量、高强度和适宜在中温状态下工作的材料,正在成为功能材料和结构材料,具有很好的应用前景。

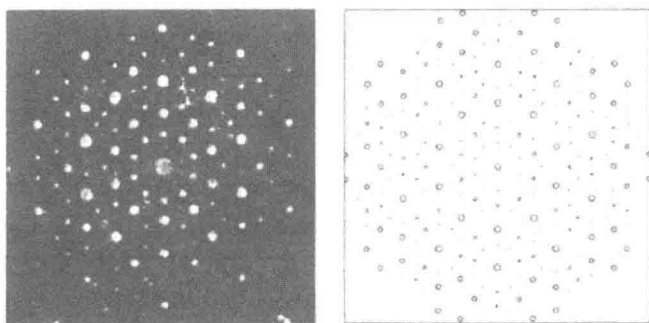


图 1.1 Shechtman 实验中的 Al-Mn 合金电子衍射图

以上的这些戏剧性发现突破了具有几个世纪历史的晶体学基本定律,5 次对称性和准晶的发现对传统晶体学产生了强烈的冲击,它为物质微观结构的研究增添了新的内容,为新材料的发展开拓了新的领域。2009 年 7 月 15 日,据美国 *Science* 杂志在线新闻报道,自从科学家在 25 年前首次制造出这种物质以来,他们一直在思考自然界是否也有能力形成这种物质^[12]。为了找到答案,研究人员在那些包含有形成准晶的物质——铝、铜和铁的岩石中展开了搜索。一个计算机程序最终帮助科学家缩小了范围——他们在一种名为 khatyrkite 的岩石中

找到了准晶(图 1.2)。这使得准晶是一种真实存在的物质这一概念被人们接受。在 2011 年,美国科学家首次在软物质和胶体中发现了这种晶体相^[13]。



图 1.2 自然界中发现的物质——准晶

我国科学工作者在准晶的发现中做出了突出的贡献。除了郭可信院士领导的准晶研究小组在国际上一直处于领先地位外,王宁等^[5]在 Cr-Ni-Si 合金中首次报道了八次对称二维准晶的发现;张泽院士等^[14]独立地在急冷条件下复杂晶体生成及其特殊衍射现象探索中,发现 Ti-Ni-V 五次对称准晶,将晶体中衍射衬度理论方法引入准晶缺陷研究,在 Al-Cu-Co 十次对称准晶中发现位错,系统研究了五次对称准晶位错布氏矢量,为准晶缺陷研究提供了新方法和新理论;中国科学院冯国光等在急冷 Al-Fe 合金中发现十次对称准晶相^[15];陈焕等^[16]在合金 V-Ni-Si 中发现十二次对称准晶。除了三维准晶和二维准晶之外,冯端^[17]、何伦雄等^[18]、杨文革等^[19]也分别制备和发现了一些稳定的一维准晶。

准晶的发现改变了人们对固体结构的认识,开辟了固体结构研究的新领域,揭示了一种新对称性——准周期对称性的存在,是物理学的重大发现,极大地深化了人们对晶体学、凝聚态物理的认识。

2011 年诺贝尔化学奖授予准晶的发现者以色列科学家 Shechtman。瑞典皇家科学院的公报称,准晶的发现冲击了传统晶体学中的基本概念,使得人们重新审视了“晶体”这个固体理论中的基本概念。在目前发现的 200 余种准晶中,二维和三维准晶是目前发现最多的两大类,分别有 60~70 种和 100 多种。准晶的优良性质,如低传导率、良好的抗氧化性等使得它有广泛的应用前景。因此,

关于准晶的研究工作方兴未艾。

1.2 准晶的结构分类与描述简介

如上述所说,准晶与周期晶体不同。根据其特有的对称性,它们属于一类非周期晶体。准晶这种独特特点起源于它们特殊的原子构造。这种结构的特点可以由衍射模式来解释。只不过准晶的这种衍射模式和晶体不同。与其他非周期晶体类似,准周期性产生新的自由度,可以有下面的解释。在固态物理和晶体学中,Miller 指数(h, k, l)被用来描述晶体的结构。这些指数能解释所有晶体的衍射谱。晶体最大的特点是具有周期结构,组成晶体的粒子在空间规则排列。此重复的单元称为晶胞。两个晶胞对应点的物理性质完全相同,这种性质称为平移对称性,当围绕晶胞的任何一个点的一个轴旋转,转角为 $\frac{2\pi}{1}, \frac{2\pi}{2}, \frac{2\pi}{3}, \frac{2\pi}{4}, \frac{2\pi}{6}$ 或这些角的整数倍时,总可以复原,这一性质称为晶体的取向对称性。注意在上述 $\frac{2\pi}{n}$ 中 n 代表对称轴旋转次数, $n=1, 2, 3, 4, 6$,在晶体中未发现 $n=5$ 和 $n>6$ 的情形,这是因为取向对称性受到平移对称性的制约,若 $n=5$ 和 $n>6$,则破坏了平移对称性,因而不能构成晶体。

在晶体中,基矢量的数目 N 等于其维数 d ,即 $N=d$ 。然而由于准晶的准周期性,Miller 指数不能使用,相应地需要采用六个指数($n_1, n_2, n_3, n_4, n_5, n_6$)。这样,就需要引入高维(包含四维、五维、六维)空间来刻划准晶的对称性。物理上三维空间中的准晶可以看作数学上的高维空间中的晶格的投影。四维、五维和六维空间中的周期晶格向物理空间的投影分别产生一维、二维和三维准晶。六维空间采用记号 E^6 表示,它包含两个子空间:一个为物理空间,称为平行空间,记号为 $E^3_{\parallel}$;另一个称为矢量空间,称为垂直空间,记号为 $E^3_{\perp}$;因此,有

$$E^6 = E^3_{\parallel} \oplus E^3_{\perp} \quad (1.2.1)$$

其中, $\oplus$ 为数学上的直和。

对于一维、二维和三维准晶,物理空间上的维数为 $d=3$,基矢量的数目 $N=$

4, 5, 6, 因此 $N > d$, 这和晶体是不一样的。

描述准晶的对称性最合适的方法为群论表示法^[20]。

一维准晶有 31 个点群, 包括 6 个晶系和 10 个 Laue 类, 其中所有的点群为合晶点群, 见表 1.1。

表 1.1 一维准晶点群

晶系	Laue 类	点群
Triclinic(三斜)	1	$\bar{1}, 1$
Monoclinic(单斜)	2	$2, m_h, 2/m_h$
	3	$2_h, m, 2_h/m$
Orthorhombic(正交)	4	$2_h 2_h 2, mm 2, 2_h mm_h, mmm_h$
Tetragonal (四方)	5	$4, 4, 4/m_h$
	6	$4 2_h 2_h, 4m, 4_h/m, mm$
Rhombohedral (三方)	7	$3, 3$
	8	$3 2_h, 3m, 3m$
Hexagonal (六方)	9	$6, 6, 6/m_h$
	10	$6 2_h 2_h, 6mm, 6m 2_h, 6/m_h mm$

二维准晶有 57 个点群, 其中包括 31 个合晶点群, 而其他 26 个为非合晶点群, 见表 1.2。

表 1.2 二维准晶点群

晶系	Laue 类	点群
Pentagonal(五角)	11	$5, 5$
	12	$5m, 5 2, 5m$
Decagonal(八角)	13	$8, 8, 8/m$
	14	$8mm, 8 2 2, 8m 2, 8/mmm$
Octagonal(十角)	15	$10, 10, 10/m$
	16	$10mm, 10 2 2, 10m 2, 10/mmm$

续表

晶系	Laue 类	点群
Dodecagonal(十二角)	17	$12, \overline{12}, 12/m$
	18	$12mm, 1222, \overline{12}m2, 12/mmm$

三维准晶有 60 个点群,包括:32 个晶体学点群和 28 个非合晶点群,即二十面体点群($235, \overline{m}35$)和 26 个具有 5 重、8 重、10 重和 12 重对称性($5, \overline{5}, 52, \overline{5}m, 5m$ 和 $N, \overline{N}, N/m, N22, Nmm, \overline{N}m^2, N/mmm, N=8, 10, 12$)的点群,这 26 个点群已经由表 1.2 列出。

准晶的特殊结构导致了它们具有一些新物理性质。准晶的力学性能,特别是其弹性性质,引起了各地学者的极大兴趣。其热力学性质也受到人们的广泛重视,其热传导性能比传统金属要差。在准晶的这些特殊性质中,首先是其弹性,第二是电性。其 Hall 效应也激起人们的研究兴趣。近年来,准晶——光子晶体的研究变成一个热点,有进一步深入研究的趋势。自从准晶被发现以来,其电学结构及其相关课题也是研究热点。由于不具有周期性,固体物理中的 Bloch 定理和 Brillouin 区概念就不能应用到准晶的研究中来。但是采用一些简单的模型和数值模拟,人们能获得准晶的电能谱。对于一些准晶材料,如 Al-Cu-Li、Al-Fe 等,当能量超出费米能时,会有隙隙出现。

按照在三维空间中原子排列的不同方式或者根据物理空间中材料呈现准周期性的维数,准晶可以分为一维准晶、二维准晶和三维准晶三大类。所谓一维准晶,指的是原子在二维上是周期分布的,在另外一维上才是准周期分布的。二维准晶是指在三维空间的一个方向原子排列是周期的,而在垂直这个方向的平面内是准周期排列的,发现的二维准晶有十次准晶、十二次准晶、八次准晶和五次准晶等四类。三维准晶是指在三维空间中的任何一个方向,原子排列都是准周期的。如二十面体准晶就是三维准晶,它又可分为简单二十面体准晶和面心二十面体准晶。在目前发现的准晶中,约有 200 多种,其中 100 余种为二十面体准

晶,70余种为十次对称准晶。因此这两大类准晶在整个准晶系中占有重要地位。另外值得注意的是,二维准晶和平面准晶是两种不同的准晶。二维准晶就如前面所述,是一种具有二维准周期平面的三维结构,另一个方向是周期性的。而平面准晶是一种二维结构,平面内原子排列是准周期的,没有第三维方向。

为了更好地描述准晶的结构特征,目前已有很多种方法,如 Penrose 拼砌法、网格法、覆盖描述法、对偶网格法、自相似交换法和高维投影法等十多种方法构造准周期点阵,其中 Penrose 拼砌法和高维投影法被广泛应用。

20 世纪 70 年代,英国数学物理学家 Penrose 尝试用非周期的方法来铺砌平面,他用两种菱形(内角分别为 36° 和 144° 、 72° 和 108°)按一定的比例镶配在一起,在无穷的铺砌中,两种菱形数目之比等于黄金分割值。Penrose 拼图具有一般晶体点阵的长程取向排列,但无周期平移序,而具有准周期平移序,出现晶体中禁止的五次对称轴。图 1.3 所示的平面拼砌就具有五重取向序。可以看出,拼砌具有局域同构性。接着 Levine 和 Steinhardt 提出了一种 3 维的 Penrose 结构,这种结构已证明与准晶体有密切的关系。随着具有 8、10、12 次对称轴的准晶物质的发现,人们开始设计出具有 8、10、12 次对称轴的 Penrose 拼图,并用这些拼图解释不同的准晶结构。下面选取几种不同对称性的准晶,介绍其对应的 Penrose 拼图。

(1)用八次对称性 Penrose 拼图有关的菱形(内角分别为 45° 和 135° 与正方形)拼出了具有 2 次和 4 次对称性的 Penrose 拼图。

(2)用十次对称性 Penrose 拼图有关的菱形(内角分别为 36° 和 144° 、 72° 和 108°)拼出了具有 2 次和 5 次对称性的 Penrose 拼图。

(3)用十二次对称性 Penrose 拼图有关的菱形(内角分别为 30° 和 150° 、 60° 和 120° 以及正方形)拼出了具有 2 次、3 次、4 次、6 次对称性的 Penrose 拼图。

(4)对于三维二十面体准晶,其结构模型和 Penrose 拼图与二维准晶结构模型和 Penrose 拼图明显不同。英国的 A. L. Mackay 将二维 Penrose 图形推广到三维空间,构造了具有二十面体对称的三维 Penrose 拼砌,两个基本拼砌单元的

角度 α 分别为 $\arctan 2 (= 63.43^\circ)$ 、 $180^\circ - \arctan 2 (= 116.57^\circ)$ 的扁的、厚的两种菱面体(通常为 Ammann 菱面体),这些菱面体的顶点构成了三维二十面体准点阵(图 1.4)。

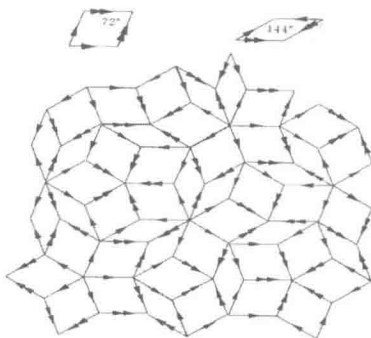


图 1.3 由两种菱形所构成的 Penrose 拼图

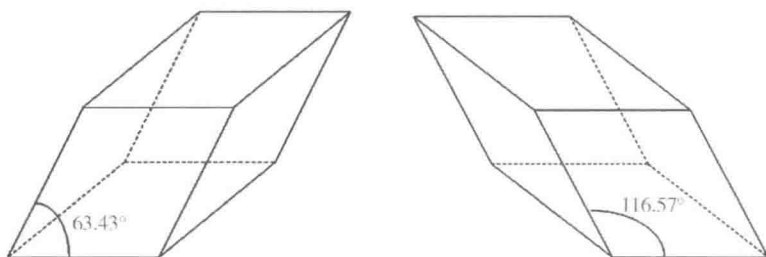


图 1.4 用来构造 Penrose 拼砌模型的两菱面体

1.3 声子晶体概念的提出

对弹性波在周期介质中的研究有近 100 年的历史,但是声子晶体概念的提出只有 20 多年的历史。1993 年 M. S. Kushwaha 等类比电子晶体第一次明确地提出了声子晶体的概念,并且对一种复合介质进行了平面波计算获得了剪切极化方向的弹性波禁带^[21]。声子晶体有这样的特点:当弹性波的频率落在禁带范围内时,弹性波被禁止传播;当存在缺陷时,弹性波会被局限在缺陷处或者沿

缺陷传播,因此对声子晶体进行设计可以认为调节波的流动^[22,23]。无论是二维的还是三维的复合介质,只有在一定的条件下才能产生声子带隙,这些条件包括两种组元的质量密度 ρ 之比、波速(纵波波速 C_l 和横波波速 C_t)之比、两组元在复合材料中各占的体积比、晶格结构(排列和组元的形状)等,都会对声子的带结构造成影响。理论和实验都发现了在声子晶体中能带结构和带隙的存在。

在声子晶体中,密度和弹性常数不同的材料按周期结构复合在一起,互不连通的材料称为散射体,连通为一体的材料称为基体。按周期结构的维数可分为一维、二维和三维声子晶体。一维声子晶体一般为杆状或层状周期结构,是声子晶体的特殊情形。二维声子晶体一般为柱状散射体材料中心轴线均平行于空间某一个方向、并将其埋入基体材料中所形成的周期结构,散射体可以为空心的或者实心的,横截面通常是圆形或者正方形的。散射体的排列方式可以是正方形排列、三角形排列等。三维声子晶体一般针对球形散射体埋入某一基体材料中所形成的周期点阵结构,周期点阵结构形式可以是体心立方结构、面心立方结构、简单立方结构等。按散射体和基体组元材料的数目分类,可以分为二组元、三组元声子晶体等。而按照组元材料的属性分类,可分为固/固、固/液、固/气声子晶体等。理想型声子晶体模型一般认为在非周期方向上具有无限尺寸,这种假设只有在弹性波长远小于非周期方向尺寸的才合理。

自声子晶体概念提出以来,人们预计声子晶体带隙、缺陷态等特性使得其在高精密无振动环境方面、声功能器件方面、减振降噪方面具有潜在的应用可能性。声子晶体的弹性波带隙特性可用于减振:一方面可为高精密系统提供一定频率范围内的无振动加工环境,保证高精度的要求;另一方面可以作为特殊精密仪器或者设备提供一定频率范围内的无振动工作环境,提供工作精度和可靠性,同时延长使用寿命。噪声在声子晶体中同样以弹性波传播,利用声子晶体的带隙特性,可以设计出隔声降噪材料。这种材料既可以隔声,也可以在噪声处控制噪声。在声功能器件方面,利用声子晶体的缺陷态特性,可以设计出高效、低耗声滤波器。

第 2 章 准晶与声子晶体弹性及其研究进展

2.1 准晶弹性理论来源

准晶属于凝聚态物理的范畴而不是传统的固态物理,虽然后者来源于前者。在凝聚态物理学发展中,相变和对称性破缺形成其核心理念和原则。准晶的弹性形变现象,在理论上和经典弹性理论有很大的不同,它必须借助 Landau 对称性破缺理论。Anderson 曾经把 Landau 对称性破缺理论用于晶体,准晶发现后,研究者又把它推广到准晶。在这方面的首创工作当属 Bak^[24,25]、Levine 与 Lubensky 等^[26,27]。在 Shechtman 发现准晶之后,Bak^[24]立即发表了其弹性理论,在其中他采用了物理和数学中三个重要的结果,核心就是朗道元激发理论和凝聚物质的对称性破缺。

根据物理学家的理解,准晶弹性的朗道密度波描述是一个自然的选择,Bak 也指出,理想情况下,想要用第一原理计算来解释这个结构需要考虑构成原子的实际电子性质,这样的计算目前几乎不可能。因此他建议采用朗道的唯象理论^[24,25]于结构转型,即对称性破缺序参量描述的凝聚相,能被转化为一个有充分平移和旋转对称性流体的对称群的不可约表示。

系统经历相变时一般伴随对称性的改变,Landau 唯象理论第一步就是引入序参量来定量描述有序程度或者对称性。利用唯象的 Landau 理论,准晶的序参量是密度(波),将密度(波)在高维倒格矢空间进行展开。借助于高温无序的各向同性液晶相的研究方法,低温 d -维准晶能表示为一个扩展的傅里叶级数