准晶数学弹性理论及应用

范天佑 著

北京理工大学出版社

内 容 简 介

本书是研究准晶体数学弹性理论的一本专著，在准晶物理学家工作的基础上发展了准晶数学弹性力学的理论体系、方法论，同时给出了这些理论及方法的若干应用。这些应用主要集中在准晶中某些位错与裂纹问题的数学解方面。

本书与现有准晶弹性问题的其他著作的显著不同是，它把准晶弹性复杂的、数量庞大的方程组简化成一个或少数几个高阶偏微分方程，然后用数学物理或函数论方法对以上偏微分方程的边值问题或初值-边值问题进行求解，得到了许多精确解。同时它也致力于准晶弹性变分问题研究，在此基础上发展了准晶弹性边值问题的数值求解方法。以上这两个特点在某种意义上可以看作是对经典数学弹性理论体系与方法论的继承与发展。

以上成果绝大部分为近年来所得到，其中关于准晶裂纹问题、准晶弹性动力学及其在准晶比热研究中的应用等内容均属于探索性的。

本书可供物理、力学、应用数学、材料科学等领域的科学工作者及高等学校教师、研究生阅读。

图书在版编目(CIP)数据

准晶数学弹性理论及应用/范天佑著．--北京：北京理工大学出版社，1999．12

ISBN 7-81045-618-0

Ⅰ．准…　Ⅱ．范…　Ⅲ．①准晶体-数学模型②准晶体-弹性理论　Ⅳ．O753

中国版本图书馆 CIP 数据核字(1999)第 46853 号

责任印制：刘京凤　责任校对：郑兴玉

北京理工大学出版社出版发行
（北京市海淀区白石桥路 7 号）
邮政编码 100081　电话(010)68912824
各地新华书店经售
北京地质印刷厂印刷

※

850 毫米×1168 毫米　32 开本　9.625 印张　232 千字
1999 年 12 月第 1 版　1999 年 12 月第 1 次印刷
印数：1-1100 册　定价：19.50 元(平装)　30.00 元(精装)

INTRODUCTION IN BRIEF ON THE TEXT

This is a monograph on the mathematical theory of elasticity of quasicrystals, devoted to a development of the theoretical system and methodology of the branch of study. It provides at the mean time many applications of the theory and methods concerning mainy with the analytic solutions of dislocations and cracks in quasicrystalline materials.

A procedure of decomposition and superposition within the monograph is suggested. Huge numbers of complicated equations involving elasticity for one-and two-dimensional quasicrystals may be reduced to a single or a few partial differential equations of higher order by applying this procedure. Besides, an effort has been made to simplify equations of elasticity for three-dimensional cubic quasicrytstals to a single partial differential equation of higher order. Boundary or initial-boundary value problems of the equation or equations are solved through direct and systematic methods of mathematical physics and function theory, and many analytic solutions are given in the text. Meanwhile attention has also been paid to discuss the variation problem and generalized solution (weak solution) of boundary value problems of the elasticity of quasicrystals as well as the numerical implementation of the weak solution. The results mentioned above are collected in the volume. Some among them, e.g. those concerning cracks, elastodynamics and specific heat of quasicrystals have the characters of probe studies

前　言

准晶是1984年发现的固体的一种新结构。以中国科学院院士郭可信、冯端、叶恒强、彭志忠等教授为首的科学工作者在准晶的发现和结构分析方面作了大量具有创造性的贡献，并且从那时起我国凝聚态物理和材料科学工作者一直在开展准晶的实验与理论研究，使我国成为国际准晶科学研究最活跃、成就卓著的国家之一。

准晶的发现突破了原来把固体划分成晶体与非晶玻璃体的传统观念，发现了固体中的一种新的对称性——准周期对称性，在理论上具有重大意义。准晶材料的研制以及准晶材料性能的稳定，使它有可能成为一种新的功能材料与结构材料，因而准晶又具有重要的实际应用前景。它在理论上和实践上的重要意义，不仅吸引了许多物理学、晶体学和材料科学工作者投入其研究与开发，也吸引了一些应用数学和力学工作者投入其研究工作。在应用数学方面，准晶学科促进了离散几何、群表示论和Fourier分析等学科的工作。由于准晶弹性和缺陷以及其它力学性能的研究，也向力学提出挑战，引起了力学工作者的浓厚兴趣。随着准晶逐步作为结构材料而在生产实践中得到使用的阶段的到来，今后其力学性能的研究必将越来越重要。

我国物理学工作者不仅在准晶的发现中作出了重大贡献，而且在准晶的理论（包括弹性与位错理论）方面也作出了许多贡献。武汉大学物理系准晶与衍射理论组丁棣华、王仁卉等教授1993年在《Phys. Rev. B》Vol. 48(pp7003～7010)上发表的准晶弹性的普遍理论，为研究准晶弹性和缺陷理论提供了基础。1994年在《Phys. Rev. B》、1997年在《J. Phys. Condens. Matter》和1997与1998年在《物理学进展》上发表的论文，是对他们1993年那篇论文工作的进

一步发展，对有关领域的研究都很有意义。

在以上工作的推动下，本小组几年来在准晶数学弹性力学方面开展了若干研究，它们涉及准晶数学弹性力学的理论体系、方法论和具体应用。

现在把有关结果加以整理成本书，供国内有兴趣的同志们参考。

书中前四章内容是基础知识，为后面介绍中引用而编写。后十一章的内容就是上面提到的涉及准晶数学弹性力学的理论体系、方法论以及有关应用。这些应用主要为准晶中的某些位错问题与裂纹问题的求解。我们知道，在经典弹性理论专著中一般不讨论位错问题与裂纹问题，它们由位错理论和裂纹理论著作去研究。本书作为准晶弹性理论的著作，主要内容也同样不是准晶位错与准晶裂纹问题，这里介绍它们，仅仅作为准晶数学弹性理论与方法的某些具体应用，而不是专门研究它们。上述内容有些是探索性的，希望引起讨论。

本项工作得到国家教委博士点基金的资助，参加本项工作的有我组已毕业的博士生和正在攻读博士学位的研究生李显方、郭玉翠、吴祥法、杨晓春、孙立飞、周旺民等同志。他们也参加了本稿的打印工作。参加书稿打印的还有张新生、马静娴和孙竹风等同志。

我组在准晶弹性和缺陷方面的研究工作一直得到武汉大学物理系准晶与衍射理论组许多同志的热忱帮助与多方指导。第十五章中涉及统计物理的问题曾同邢修三教授讨论。

对国家教委博士点基金的资助、武汉大学物理系丁棣华、王仁卉等教授的帮助和邢修三教授的讨论表示最衷心的感谢！

由于我们的水平与知识所限，书中肯定会有许多错误与缺点，欢迎广大读者指正。

范天佑

1998年8月

目　　录

第一章 晶 体

1.1 晶体结构的周期性 · 晶胞

按照X射线的衍射图样，我们知道晶体是由离子、原子或分子（它们统称为质点）规则排列组成的。晶体中质点排列呈现在空间中为无限的周期重复。这一性质称为晶体结构的周期性，其严格定义随后将进一步给出。它是晶体的基本特征，而非晶体不具备这一特征。

晶体中质点重心周期排列的骨架称作晶格。重心的位置称为格点，其总体称为点阵。

定义 $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}, \boldsymbol{c}$ 为3个基本平移矢量，用它们去表示理想晶体中质点的排列。当人们从点 $\boldsymbol{r}$ 去观察这种排列，和从另一个点

$$\boldsymbol{r}' = \boldsymbol{r} + l\boldsymbol{a} + m\boldsymbol{b} + n\boldsymbol{c} \tag{1.1-1}$$

去观察，发现质点的排列在各个方向都相同，其中 l, m, n 为任意整数。人们也可以用式(1.1-1)给出的点 $\boldsymbol{r}'$ 的集合定义一个晶格，其中 l, m, n 代表整数的所有值。这样的重复单元叫做晶胞。

晶格的每个格点上附有一群质点（离子、原子或分子），这样一个质点群称为基元。基元与晶格一起组成晶体结构，即

基元 + 晶格 = 晶体结构

晶胞与平移矢量具有不同的选择方式，但它们导致相同的晶格。在固体物理学中，人们选择体积最小的晶胞，被称为元胞。

在任意两个晶胞的对应点，晶体的物理性质相同，也就是说，若以 $f(\boldsymbol{r})$ 代表任一晶体的物理性质，那么

$$f(\boldsymbol{r}') = f(\boldsymbol{r} + l\boldsymbol{a} + m\boldsymbol{b} + n\boldsymbol{c}) = f(\boldsymbol{r}) \tag{1.1-2}$$

这一性质称为晶体的平移对称性。

1.2 晶系·对称操作

晶格的晶胞可以用代表它的平行六面体的三边之长 a,b,c 及其夹角 α,β,γ 去表示。根据边长及其夹角的不同,晶胞有 7 种不同的形式,因而得到相应的 7 种晶系如下:

晶系	晶胞特征
立方	$a=b=c$ $\alpha=\beta=\gamma=90°$
六方	$a=b\neq c$ $\alpha=\beta=90°,\gamma=120°$
四方	$a=b\neq c$ $\alpha=\beta=\gamma=90°$
三方	$a=b=c$ $\alpha=\beta=\gamma\neq 90°$
正交	$a\neq b\neq c$ $\alpha=\beta=\gamma=90°$
单斜	$a\neq b\neq c$ $\alpha=\gamma=90°,\beta>90°$
三斜	$a\neq b\neq c$ $\alpha\neq\beta\neq\gamma$

在每一晶系中,根据其晶胞的面中心或体中心上含不含格点,又可以区分出一种或几种类型。例如,立方晶系可以区分为三种不同的类型,即简单立方、体心立方和面心立方。按照这一分类,七个晶系可以划分成 14 种晶胞,称为 Bravais 晶胞,如图 1.2-1 所示。

晶体具有某些对称性,上一节讲的平移对称性就是其中的一种。晶体的对称性意味着,经过某些操作晶体结构能恢复到原来

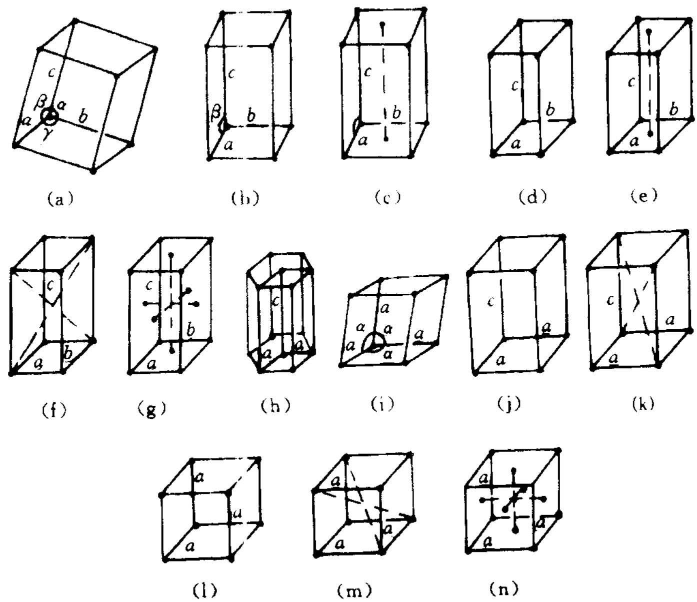

图 1.2-1　十四种晶胞

(a)简单三斜;(b)简单单斜;(c)底心单斜;(d)简单正交;
(e)底心正交;(f)体心正交;(g)面心正交;(h)六方;
(i)三方;(j)简单四方;(k)体心四方;(l)简单立方;
(m)体心立方;(n)面心立方

的状态,这种操作称为对称操作。平移

$$\boldsymbol{T} = l\boldsymbol{a} + m\boldsymbol{b} + n\boldsymbol{c} \tag{1.2-1}$$

是一种对称操作,简称为点阵平移操作。此外,还有转动操作和反映操作,它们属于点操作。

这里特别强调一下晶体的转动或旋转对称操作及晶体的旋转对称性。

围绕一个通过格点的轴进行旋转,当转角为 $2\pi, 2\pi/2, 2\pi/3, 2\pi/4$ 和 $2\pi/6$ 弧度或者是这些值的整数倍,总可以找到与自身重合的点阵。这种操作用 n 表示,则 $n = 1,2,3,4,6$,相应的旋转对

称轴为一重、二重、三重、四重和六重对称轴。相反，转动其它的角度，例如 $2\pi/5$ 或 $2\pi/7$ 弧度，则不可能使点阵复原。可以用分子作成一种晶体，其中单独的分子可以有五重对称轴。图1.2－2给出的图案是特殊设计的五重对称性的一个图形。由图形可见，假如这种周期点阵存在，则这些五边形不能都相互贴紧。这表明，不可能将五重点对称性（其一般意义见下面介绍）和平移对称性结合起来，即在周期结构晶体中不存在五重对称轴。

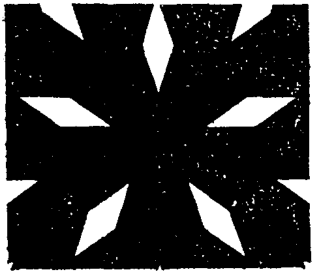

图1.2－2 五重对称性在晶体点阵中不可能存在

以上结果构成如下一条定律：

晶体对称定律 在旋转操作中，n 重对称轴用 n 表示。由于平移对称性的制约，只存在 1，2，3，4 和 6，而 5 以及 $n>6$ 的对称轴不存在。

上面提到旋转是一种对称要素，相应的对称操作是转动。这是一种点对称，其它的点对称有：

对称面，相应的操作是镜面反映，用符号 m 表示；

对称中心，相应的操作是反演，用 I 表示；

旋转反演轴（简称转反轴），相应的操作是旋转与反演的复合，旋转 $2\pi/n$ 继而反演，用 $\bar{n}$ 表示。

对于晶体，点对称操作，只有 8 个是独立的，即

$$1,2,3,4,6,I(=\bar{1}),m(=\bar{2}),\bar{4}$$

它们称为点对称基本对称要素。这些基本对称要素加上它们的相互复合，共可能得到 32 种复合对称要素，相应地有 32 种宏观对称操作集合，即构成 32 个点群。

本书后面的部分并不侧重研究点群，只是在介绍准晶的发现中，要提到点群的概念，这里作一粗浅的介绍。

前面把平移操作用 $\boldsymbol{T}$ 表示，它定义了一个 Bravais 格子，或称为点阵。点阵也可以理解为一种对称要素，相应的操作是平移。此外，螺旋轴作为一种对称要素，相应的操作为旋转与平移的复合。最后，还有滑移面，相应的操作是反映与平移的复合。这三种操作为非点操作。包括这些与平移有关的操作，晶体中的对称运动可以全部分类成 230 个对称运动群，称为 230 种空间群。

1.3 元激发的概念

晶体由质点（离子、原子和分子）组成，每 cm^3 中含有 10^{24} 个质点。在相互作用系统中，关于基态与激发态的讨论，归结为求解极其复杂的多体问题。基态的研究就已经很复杂，为了简化这种讨论，Landau 引进元激发的概念，即考虑基态附近的低能激发。

这一概念在第三章介绍准晶力学性能的研究中也要引用。在那里只考虑了声子与相位子两类低能元激发。

1.4 玻璃体

晶体由于其内部质点（离子、原子或分子）排列的有序，因而表现出较强的对称性，这种性质又称为长程有序。

玻璃态物质是凝聚态物质的一种材料，它在任何温度下都不表现出像结晶过程那样的不连续变化。随其粘性逐渐增大而刚性变得更大。任何液体或过冷液体，当它的剪切粘性系数大于 10^{12} $N\cdot s/m^2$ 时，就称为玻璃体。玻璃体不具有晶体的长程有序性，但像通常的液体一样，在原子间距数量级的范围内，其质点排列有序，所以具有短程有序。

第二章　经典弹性理论基础

像晶体知识对于了解准晶是必要的一样，经典弹性理论对于研究准晶的弹性理论也是必要的。这里给出经典弹性理论的一个基本轮廓，更详细的材料可以在许多专著与教材中查到。为了叙述的简单，将采用张量代数记法，所以在本章第一节先介绍张量基本知识。

2.1　张量知识初步

2.1.1　矢量

一个具有大小与方向的量称为矢量，用 $\boldsymbol{a}$ 表示，以 $a=|\boldsymbol{a}|$ 表示它的大小。矢量 $\boldsymbol{a}$ 与 $\boldsymbol{b}$ 的算术积（点积）$\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}=ab\cos(\theta)$，矢量 $\boldsymbol{a}$ 与 $\boldsymbol{b}$ 的矢量积（叉积）$\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}=\boldsymbol{n}ab\sin(\theta)$，其中 θ 是 $\boldsymbol{a}$ 与 $\boldsymbol{b}$ 的夹角，$\boldsymbol{n}$ 是既与 $\boldsymbol{a}$ 又与 $\boldsymbol{b}$ 相垂直的单位矢量，即 $|\boldsymbol{n}|=1$。

2.1.2　标架，正交标架

为了便于描写矢量和张量，现在引进标架。标架有许多种，例如仿射标架、正交标架等。这里仅介绍正交标架，它是指引进三个互相垂直的单位矢量 $\boldsymbol{e}_1$，$\boldsymbol{e}_2$，$\boldsymbol{e}_3$，并且 $\boldsymbol{e}_1\cdot\boldsymbol{e}_2=0$，$\boldsymbol{e}_2\cdot\boldsymbol{e}_3=0$，$\boldsymbol{e}_3\cdot\boldsymbol{e}_1=0$，以及 $\boldsymbol{e}_3=\boldsymbol{e}_1\times\boldsymbol{e}_2$，则 $\boldsymbol{e}_1$，$\boldsymbol{e}_2$，$\boldsymbol{e}_3$ 称为正交标架的基矢量（有时简称为基）。

在正交标架 $\{\boldsymbol{e}_1,\boldsymbol{e}_2,\boldsymbol{e}_3\}$ 中，任一矢量 $\boldsymbol{a}$ 可以表示成

$$\boldsymbol{a}=a_1\boldsymbol{e}_1+a_2\boldsymbol{e}_2+a_3\boldsymbol{e}_3=(a_1,a_2,a_3)\qquad(2.1-1)$$

2.1.3 坐标变换

考虑另一正交标架 $\{\boldsymbol{e}_1', \boldsymbol{e}_2', \boldsymbol{e}_3'\}$，它可以用老标架 $\{\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{e}_3\}$ 表示。例如从式(2.1－1)可知有

$$\begin{cases} \boldsymbol{e}'_1 = c_{11}\boldsymbol{e}_1 + c_{12}\boldsymbol{e}_2 + c_{13}\boldsymbol{e}_3 \\ \boldsymbol{e}'_2 = c_{21}\boldsymbol{e}_1 + c_{22}\boldsymbol{e}_2 + c_{23}\boldsymbol{e}_3 \\ \boldsymbol{e}'_3 = c_{31}\boldsymbol{e}_1 + c_{32}\boldsymbol{e}_2 + c_{33}\boldsymbol{e}_3 \end{cases} \tag{2.1-2}$$

其中 $c_{11}, c_{12}, \cdots, c_{33}$ 是一些纯量。关系式(2.1－2)又称为坐标变换，也可以用矩阵形式表示为

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{e}'_1 \\ \boldsymbol{e}'_2 \\ \boldsymbol{e}'_3 \end{bmatrix} = [C] \begin{bmatrix} \boldsymbol{e}_1 \\ \boldsymbol{e}_2 \\ \boldsymbol{e}_3 \end{bmatrix} \tag{2.1-2'}$$

其中

$$[C] = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} \\ c_{21} & c_{22} & c_{23} \\ c_{31} & c_{32} & c_{33} \end{bmatrix} \tag{2.1-3}$$

是一个正交矩阵，因而有

$$[C]^{\mathrm{T}} = [C]^{-1} \tag{2.1-4}$$

这里记号“T”表示转置运算，“－1”表示求逆运算。自然有

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{e}_1 \\ \boldsymbol{e}_2 \\ \boldsymbol{e}_3 \end{bmatrix} = [C]^{\mathrm{T}} \begin{bmatrix} \boldsymbol{e}'_1 \\ \boldsymbol{e}'_2 \\ \boldsymbol{e}'_3 \end{bmatrix} = [C]^{-1} \begin{bmatrix} \boldsymbol{e}'_1 \\ \boldsymbol{e}'_2 \\ \boldsymbol{e}'_3 \end{bmatrix} \tag{2.1-5}$$

根据式(2.1－1)可知，在标架 $\{\boldsymbol{e}'_1, \boldsymbol{e}'_2, \boldsymbol{e}'_3\}$ 中

$$\boldsymbol{a} = a'_1\boldsymbol{e}'_1 + a'_2\boldsymbol{e}'_2 + a'_3\boldsymbol{e}'_3 \tag{2.1-6}$$

把式(2.1－5)代入式(2.1－1)，得到

$$\begin{aligned} \boldsymbol{a} = {} & (c_{11}a_1 + c_{12}a_2 + c_{13}a_3)\boldsymbol{e}'_1 + \\ & (c_{21}a_1 + c_{22}a_2 + c_{23}a_3)\boldsymbol{e}'_2 + \\ & (c_{31}a_1 + c_{32}a_3 + c_{33}a_3)\boldsymbol{e}'_3 \end{aligned} \tag{2.1-7}$$

比较式(2.1－6)与式(2.1－7)，得到

$$
\left.\begin{aligned}
a_1' &= c_{11}a_1 + c_{12}a_2 + c_{13}a_3 \\
a_2' &= c_{21}a_1 + c_{22}a_2 + c_{23}a_3 \\
a_3' &= c_{31}a_1 + c_{32}a_2 + c_{33}a_3
\end{aligned}\right\} \tag{2.1-8}
$$

或者用矩阵表示，有

$$
\begin{bmatrix} a_1' \\ a_2' \\ a_3' \end{bmatrix} = [C]\begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{bmatrix} \tag{2.1-8'}
$$

无论是式(2.1-8)或式(2.1-8')都可以写成

$$
a_i' = \sum_{j=1}^{3} c_{ij}a_j = c_{ij}a_j \tag{2.1-9}
$$

在式(2.1-9)的最后一个等式中，把求和号取消了，$c_{ij}a_j$ 中重复下标代表自动求和，今后无论是矢量还是张量，都用这一约定代表求和。

一组数(a_1, a_2, a_3)在坐标变换(2.1-2)下满足关系式(2.1-9)，称为仿射正交矢量。这是矢量的代数学定义，比“具有大小与方向的量”的定义更具有普遍意义。

2.1.4 张量

由坐标基矢量的并矢 $\boldsymbol{e}_i\boldsymbol{e}_j$ 组成的量

$$
A_{ij}\boldsymbol{e}_i\boldsymbol{e}_j
$$

称为二阶张量，记为 $\boldsymbol{A}$，并矢 $\boldsymbol{e}_i\boldsymbol{e}_j$ 称为基张量。注意这里 $\boldsymbol{e}_i\boldsymbol{e}_j$ 既不是矢量点积，也不是矢量叉积，仅仅是一个记号。二阶张量在三维欧氏空间中具有九个基张量，即

$$
\begin{matrix}
\boldsymbol{e}_1\boldsymbol{e}_1 & \boldsymbol{e}_1\boldsymbol{e}_2 & \boldsymbol{e}_1\boldsymbol{e}_3 \\
\boldsymbol{e}_2\boldsymbol{e}_1 & \boldsymbol{e}_2\boldsymbol{e}_2 & \boldsymbol{e}_2\boldsymbol{e}_3 \\
\boldsymbol{e}_3\boldsymbol{e}_1 & \boldsymbol{e}_3\boldsymbol{e}_2 & \boldsymbol{e}_3\boldsymbol{e}_3
\end{matrix}
$$

所以二阶张量可以写成