

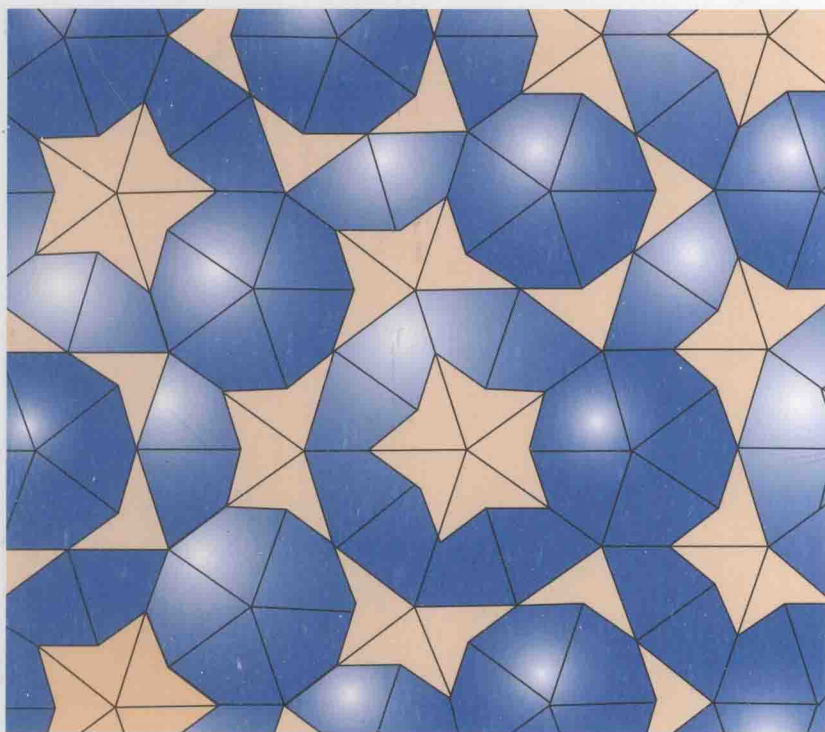
“十二五”国家重点出版物出版规划项目

固体与软物质准晶

数学弹性与相关理论及应用

Mathematical Theory of Elasticity and Relevant Topics of Solid and
Soft-Matter Quasicrystals and Its Applications

范天佑 著



 北京理工大学出版社
BEIJING INSTITUTE OF TECHNOLOGY PRESS

“十二五”国家重点出版物出版规划项目

固体与软物质准晶 数学弹性与相关理论及应用



范天佑 著

 **北京理工大学出版社**
BEIJING INSTITUTE OF TECHNOLOGY PRESS

图书在版编目 (CIP) 数据

固体与软物质准晶数学弹性与相关理论及应用 / 范天佑著. —北京: 北京理工大学出版社, 2014. 9

ISBN 978-7-5640-9024-1

I. ①固… II. ①范… III. ①准晶体-弹性理论 IV. ①O753

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2014) 第 057314 号

出版发行 / 北京理工大学出版社有限责任公司

社 址 / 北京市海淀区中关村南大街 5 号

邮 编 / 100081

电 话 / (010)68914775(总编室)

82562903(教材售后服务热线)

68948351(其他图书服务热线)

网 址 / <http://www.bitpress.com.cn>

经 销 / 全国各地新华书店

印 刷 / 北京地大天成印务有限公司

开 本 / 710 毫米×1000 毫米 1/16

印 张 / 30

字 数 / 534 千字

版 次 / 2014 年 9 月第 1 版 2014 年 9 月第 1 次印刷

定 价 / 149.00 元

责任编辑 / 王玲玲

莫 莉

文案编辑 / 王玲玲

责任校对 / 周瑞红

责任印制 / 王美丽

前言

《准晶数学弹性理论及应用》于 1999 年出版，其英文版《Mathematical Theory of Elasticity and Its Applications》于 2010 年由我国科学出版社和德国 Springer 出版社共同出版，英文版比 1999 年的中文版补充了许多新内容。英文版出版后，国内读者建议出相应的中文版。现在的中文版即在英文版的基础上补充了正文共 5 章和主附录 III，介绍新近发现的软物质准晶和相关的内容，以及有关数学内容的补充推导。

固体准晶于 1982 年 4 月发现，1984 年 11 月才得以报道。当时，与晶体学关系最密切的晶体化学、结构化学、物理化学工作者和凝聚态物理学工作者，对此最敏感，确实既惊又喜。在理论物理学多个领域有重大贡献的若干物理学家，在准晶发现后不久，就指出准晶的重要性，倡导大家研究准晶。2011 年，固体准晶的发现被授予诺贝尔化学奖。以上事实表明，准晶的意义不仅在于它是一种新结构，或一种新材料，还向我们展示了做出创新贡献的科学工作者所具有的洞察力。

准晶发现一经报道，就有大批成果涌现出来，这说明准晶及其分支学科的诞生和发展有其历史必然性。实际上，在 20 世纪 80 年代已经具备了研究准晶的物理学和数学的若干基础。例如统计物理学和凝聚体物理学中的 Landau 对称性破缺原理已经成熟，无公度相理论从 20 世纪 60 年代起便已发展起来，几何学中的非周期对称性（包括 Penrose 准周期对称性，即 Penrose 拼砌的离散几何学）研究在 1964 年以后方兴未艾，代数学中的群论早就成熟。所以瑞典晶体物理学和理论物理学家 P. Bak 率先根据无公度相理论中的相位子概念和 Landau 对称性破缺与元激发原理，提出准晶存在声子和相位子两种元激发，固体准晶弹性的物理基础得以建立，并且引发了一个研究热潮。Penrose 拼砌成了固体准晶（同时也是软物质准晶）的几何理论。群论和群表示理论帮助科学工作者完成准晶分类和确定已发现的各固体准晶系的全部独立非零弹性常数等工作。很显然，准晶弹性的物理基础是凝聚态物理学而不是经典力学。若干

物理学家指出, 20 世纪物理学有三个主旋律, 即量子化、对称性和相位。准晶中的声子和相位子就是量子化的产物, 它们虽然不能等同于单个原子和单个分子, 但是属于 Landau^①对大量原子集体激发的量子力学描述的“准粒子”。而对对称性和相位对准晶的重要性就更明显了。Anderson 把 Landau 理论用于晶体, 从序参量的相位定义了声子。Bak 等发展了 Landau-Anderson 的理论, 把序参量的相位推广到高维空间, 因而定义了相位子。准晶与晶体的不同, 准晶内不同晶系的区别, 都是由对称性来区分的。这些事例说明准晶及其弹性属于现代物理学的主旋律领域。虽然本书并不进一步讨论准晶物理学, 但是认识以上物理思想, 对我们会有帮助。

固体准晶弹性的物理基础建立以后, 有一个发展方向同经典弹性的发展道路相类似, 即同数学物理建立密切关系, 只有依据强有力的数学物理, 才能把前述物理思想和物理理论转化成偏微分方程, 按照理论和应用的需要, 把物理问题转换成偏微分方程的边值问题或初值-边值问题, 讨论问题的适定性和可解性, 并且用解析方法(尤其是复分析)和数值方法, 得到数学解, 才能为科学和工程服务。本书的工作主要限于这一讨论。

对于已经习惯了研究二元与三元合金固体准晶的工作者来说(2009 年报道发现了天然准晶, 所以固体准晶并不局限于人工研制的合金系), 20 年后在液晶、胶体和聚合物中发现了准晶, 可能是又一个惊喜。这些准晶可以称为软物质准晶。软物质包括液晶(单体液晶和聚合液晶)、聚合物、胶体、泡沫、表面活性剂、乳状液和生物大分子等。软物质态甚至被称为物质的第四态, 与固态、液态和气态并列。软物质准晶是物理学、化学中的软物质和准晶这两个分支的交叉学科, 这无疑大大扩充了准晶的研究范围, 并突显了准晶的重要性。为了研究软物质准晶, 今天可能面临当初研究固体准晶相类似的形势。鉴于固体准晶研究中, 声子和相位子元激发奠定了固体准晶弹性研究的基础, 对软物质准晶的弹性-流体-动力学, 或广义流体动力学, 是否可以用声子、相位子和流体声子这三种元激发作为它的基础? 按照《统计物理学 II》^①, 认为流体声波就是一种声子, 即流体声子。采用声子、相位子和流体声子研究软物质准晶, 借鉴液晶的研究成果, 借鉴固体准晶广义流体动力学的研究成果, 这是我们的尝试。这种尝试提出了软物质的一种数学模型和相应的数学理论, 以便定量描写它们的运动。运动方程的建立要用到主附录 III 中介绍的方法。这些方程的求解又和数学物理紧密结合, 希望为科学与工程服务。众所周知, 固体准晶广义

① Landau L D and Lifshitz E M, 1980, Theoretical Physics, Vol 9, Lifshitz E M and Pitaevskii L P, Statistical Physics, Part 2, Butterworth-Heinemann, Oxford; 中文译本, Landau L D, Lifshitz E M, 理论物理学, 第九卷, Lifshitz E M, Pitaevskii L P, 统计物理学, II, 王锡绶译, 高等教育出版社, 2011, 北京。

流体动力学的研究存在巨大的困难，因而发展迟缓，现在把它推广到软物质准晶，困难将更大，能否取得进展，要靠大家努力。

由于内容的扩充，新版书名也由《准晶数学弹性理论及应用》改为《固体与软物质准晶数学弹性与相关理论及应用》。

感谢国家自然科学基金委（通过项目 11272053、10672022、10372016 和 K19972011）和德国洪堡基金会（Alexander von Humboldt Foundation）多年的资助，邢修三、应隆安、叶其孝、高歌、马中骥、胡承正等同志就书中涉及的统计物理、数学物理、流体物理、群论、准晶等领域有关问题的讨论与帮助，本小组过去和现在学生们——特别是中南大学李显方同志——的贡献和协助。感谢德国著名衍射实验与理论和准晶专家 Prof. U. Messerschmidt（Max-Planck Institut fuer Mikrostrukturphysik, Halle）赠送刚出版的专著，对本书的新版很有帮助，同时感谢美国著名液晶、准晶和软物质专家 Prof. T. C. Lubensky（University of Pennsylvania）的讨论，对理解凝聚态物理学的 Poisson 括号方法很有帮助。

虽然新版修改了过去版本中的疏漏之处，但是还会留下许多错误，又因为加进了很不成熟的软物质准晶的内容，尤其是现在提出的一些观点、方程和方法，是不成熟的，书中缺点与错误一定很多，希望广大读者批评指正！

范天佑

2014年6月1日

符号表

$\mathbf{r}(x_1, x_2, x_3) = \mathbf{r}(x, y, z)$ —— 矢径

D —— 区域

S —— 区域的边界

S_u —— 给定位移的边界

S_σ —— 给定应力的边界 (或 S_i —— 给定面力的边界)

ρ —— 质量密度

p —— 流体压力

$\mathbf{u}(u_1, u_2, u_3) = \mathbf{u}(u_x, u_y, u_z)$ —— 声子场

$\mathbf{w}(w_1, w_2, w_3) = \mathbf{w}(w_x, w_y, w_z)$ —— 相位子场 (或称第二相位子场——仅在讨论十八次对称准晶时用此名称)

$\mathbf{V}(V_1, V_2, V_3) = \mathbf{V}(V_x, V_y, V_z)$ —— 流体速度场 (或流体声子场)

$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$ —— 声子应变张量

$w_{ij} = \frac{\partial w_i}{\partial x_j}$ —— 相位子应变张量 (或称第二相位子应变张量——仅在讨论十八次对称准晶时用此名称)

$\dot{\xi}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial V_i}{\partial x_j} + \frac{\partial V_j}{\partial x_i} \right)$ —— 流体声子变形速度张量

σ_{ij} —— 声子应力张量

σ'_{ij} —— 流体声子应力张量

H_{ij} —— 相位子应力张量 (或称第二相位子应力张量——仅在讨论十八次对称准晶时用此名称)

C_{ijkl} —— 声子弹性系数张量

K_{ijkl} —— 相位子弹性系数张量 (或第二相位子弹性系数张量——仅在讨论十八

次对称准晶时用此名称)

R_{ijkl} ——声子-相位子耦合弹性系数张量 (或 $\mathbf{u}-\mathbf{w}$ 耦合弹性系数张量)

η ——流体第一黏性系数

ζ ——流体第二黏性系数

Γ_u ——声子耗散系数

Γ_w ——相位子耗散系数 (或第二相位子耗散系数——仅针对十八次对称准晶用此名称)

$\mathbf{v}(v_1, v_2, v_3) = \mathbf{v}(v_x, v_y, v_z)$ ——第一相位子场 (仅针对十八次对称准晶用此名称)

$v_{ij} = \frac{\partial v_i}{\partial x_j}$ ——第一相位子应变张量 (仅针对十八次对称准晶用此名称)

τ_{ij} ——第一相位子应力张量 (仅针对十八次对称准晶用此名称)

r_{ijkl} ——声子-第一相位子耦合弹性系数张量 (或 $\mathbf{u}-\mathbf{v}$ 耦合弹性系数张量, 仅针对十八次对称准晶用此量)

目 录

第 1 章 晶体	1
1.1 晶体结构的周期性, 晶胞 (元胞)	1
1.2 三维晶格的种类	2
1.3 对称性和点群	3
1.4 倒格子	5
1.5 第一章附录 若干基本概念	6
参考文献	11
第 2 章 经典弹性理论的框架	12
2.1 一些基本概念复习	12
2.2 弹性理论的基本假定	15
2.3 位移与变形	15
2.4 应力分析和运动方程	17
2.5 广义 Hooke 定律	18
2.6 弹性动力学, 波动	21
2.7 小结	22
参考文献	22
第 3 章 准晶及其性质	23
3.1 准晶的发现	23
3.2 准晶的结构与对称性	26
3.3 准晶物理性能的简单介绍	27
3.4 一维、二维和三维准晶	28
3.5 二维准晶和平面准晶	29
参考文献	29

第 4 章 固体准晶弹性的物理基础	34
4.1 固体准晶弹性的物理基础	34
4.2 变形张量	35
4.3 应力张量和运动方程	37
4.4 自由能和弹性常数	38
4.5 广义 Hooke 定律	40
4.6 边界条件和初始条件	41
4.7 准晶相关常数的简短介绍	42
4.8 小结和边值或初值-边值问题的数学可解性	42
4.9 第 4 章附录: 基于 Landau 密度波理论的准晶弹性物理基础的描述	44
参考文献	47
第 5 章 一维准晶弹性理论及其化简	51
5.1 六方准晶的弹性	52
5.2 把弹性问题分解成平面和反平面弹性问题的叠加	54
5.3 单斜准晶系的弹性	56
5.4 正交准晶系的弹性	59
5.5 四方准晶系的弹性	60
5.6 一维六方准晶空间弹性问题和解的表示	61
5.7 一维准晶弹性的其他结果	63
参考文献	63
第 6 章 二维准晶弹性及其化简	65
6.1 二维准晶平面弹性基本方程: 五次和十次对称晶系中的点群 $5m$ 和 $10mm$ 情形	69
6.2 基本方程组的化简: 位移势函数法	74
6.3 基本方程组的化简: 应力势函数法	77
6.4 点群 $5, \bar{5}$ 五次和点群 $10, \bar{10}$ 十次对称准晶平面弹性	79
6.5 点群 $12mm$ 十二次对称准晶平面弹性	83
6.6 点群 $8mm$ 八次对称准晶平面弹性, 位移势	86
6.7 点群 $5, \bar{5}$ 五次和点群 $10, \bar{10}$ 十次对称准晶弹性的应力势	91
6.8 点群 $8mm$ 八次对称准晶弹性的应力势	93
6.9 准晶的工程弹性与数学弹性	96

参考文献	99
第 7 章 应用 I —— 一维和二维准晶中的若干位错和界面问题及其解答	101
7.1 一维六方准晶中的位错	102
7.2 点群 $5m$ 和 $10mm$ 对称准晶中的位错	103
7.3 点群 $5, \bar{5}$ 五次对称和点群 $10, \bar{10}$ 十次对称准晶中的位错	109
7.4 点群 $8mm$ 八次对称准晶中的位错	114
7.5 点群 $12mm$ 十二次对称准晶中的位错	116
7.6 准晶和晶体的界面问题	117
7.7 位错塞集、位错群和塑性区	121
7.8 总结和讨论	121
参考文献	121
第 8 章 应用 II —— 一维和二维准晶中的孔洞和裂纹问题及解	124
8.1 一维准晶中的裂纹问题	125
8.2 一维准晶中有限尺寸构型的裂纹问题	130
8.3 点群 $5m$ 和 $10mm$ 准晶中的 Griffith 裂纹问题——位移函数法	135
8.4 点群 $5, \bar{5}$ 及 $10, \bar{10}$ 准晶中的椭圆孔及裂纹问题——基于应力势的方法	140
8.5 二维八次对称准晶的椭圆孔/裂纹问题	146
8.6 二维五次和十次对称准晶带椭圆孔/裂纹的弯曲试样的近似分析解	147
8.7 二维五次和十次对称准晶带裂纹的有限高度狭长体的分析解	150
8.8 二维十次对称准晶单边裂纹有限宽度试样的精确分析解	152
8.9 一维六方准晶的三维椭圆盘状裂纹的摄动解	154
8.10 其他一维、二维准晶裂纹问题	157
8.11 裂纹顶端的塑性区	158
8.12 第 8 章附录 1: 第 8.1 节中解的推导	158
8.13 第 8 章附录 2: 第 8.9 节中解的进一步推导	160
参考文献	164
第 9 章 三维准晶弹性理论及其应用	167
9.1 二十面体准晶弹性的基本方程和材料常数	168
9.2 二十面体准晶反平面弹性问题和准晶-晶体界面问题	172

4 ■ 固体与软物质准晶数学弹性与相关理论及应用

9.3	假设声子-相位子不耦合的二十面体准晶平面弹性	177
9.4	二十面体准晶的声子场-相位子场耦合的平面弹性问题—— 位移势函数方法, 六重调和方程	179
9.5	二十面体准晶的声子场-相位子场耦合的平面弹性问题—— 应力势函数方法	181
9.6	二十面体准晶中的直位错	183
9.7	二十面体准晶中的 Griffith 裂纹——Fourier 分析	187
9.8	二十面体准晶中的椭圆缺口/Griffith 裂纹——复分析	194
9.9	立方准晶的弹性理论——反平面和轴对称变形及三维裂纹问题	200
	参考文献	203
第 10 章 准晶弹性和缺陷动力学		206
10.1	基于 Bak 的论点的准晶弹性动力学	207
10.2	某些准晶的反平面弹性动力学	207
10.3	反平面弹性的运动螺型位错	209
10.4	反平面弹性 III 型运动 Griffith 裂纹	212
10.5	二维准晶简化型弹性-流体-动力学, 基本解	215
10.6	二维准晶的简化型弹性-流体-动力学及其在断裂动力学 中的应用, 数值分析	220
10.7	三维二十面体准晶简化型弹性-流体-动力学及其在断裂 动力学中的应用, 数值分析	228
10.8	第 10 章附录: 有限差分格式的细节	232
	参考文献	237
第 11 章 准晶弹性的复分析方法		240
11.1	一维准晶反平面弹性问题中的调和方程及准双调和方程	240
11.2	点群 $12mm$ 二维准晶平面弹性问题的双调和方程	241
11.3	四重调和方程的复分析方法及其在二维准晶中的应用	241
11.4	六重调和方程的复分析方法及其在三维二十面体准晶中的应用	253
11.5	准四重调和方程的复分析	263
11.6	结论与讨论	263
11.7	第 11 章附录: 复分析基础知识	264
	参考文献	271

第 12 章 准晶弹性的变分原理和数值分析与应用	273
12.1 二十面体准晶弹性问题的基本方程	274
12.2 准晶弹性静力学的广义变分原理	275
12.3 二十面体准晶弹性的有限元方法	278
12.4 数值分析算例	282
12.5 结论与讨论	288
参考文献	288
第 13 章 准晶弹性解的某些数学原理	290
13.1 准晶弹性解的唯一性	290
13.2 广义 Lax-Milgram 定理	291
13.3 三维准晶弹性的矩阵表示	295
13.4 准晶弹性边值问题的弱解	298
13.5 弱解的唯一性	299
13.6 结论与讨论	302
参考文献	303
第 14 章 固体准晶的非线性性能	304
14.1 准晶塑性变形性能	305
14.2 准晶可能的塑性本构方程	307
14.3 非线性弹性和求解公式	309
14.4 基于某些简单模型的非线性解	309
14.5 基于广义 Eshelby 理论的非线性解	315
14.6 基于位错模型的非线性分析	318
14.7 结论与讨论	322
14.8 第 14 章附录: 若干数学细节	323
参考文献	327
第 15 章 固体准晶断裂理论	330
15.1 准晶线性弹性断裂理论	330
15.2 建议的标准试样裂纹扩展力和它的临界值 G_{IC} 的测量	333
15.3 非线性断裂理论	335
15.4 动态断裂理论	337
15.5 固体准晶材料断裂韧性和有关力学性能的测量	338

参考文献	341
第 16 章 固体准晶广义流体动力学简介	343
16.1 固体的黏性	344
16.2 晶体广义流体动力学方程, 对称性破缺	345
16.3 固体准晶广义流体动力学方程	346
16.4 一个没有解决的困难问题	347
16.5 数值计算举例	347
16.6 结论与讨论	348
16.7 第 16 章附录: 有关热力学公式介绍	349
参考文献	350
第 17 章 可能的十八次对称的固体准晶及相关理论探索	351
17.1 “六维埋藏空间”或“六维镶嵌空间”概念	351
17.2 十八次对称固体准晶的弹性理论	352
17.3 十八次对称固体准晶的弹性-流体-动力学	355
17.4 十八次对称准晶的弹性和动力学问题的分析解	356
17.5 十八次对称准晶的位错	358
参考文献	360
第 18 章 软物质准晶的概况	361
18.1 软物质准晶的发现	361
18.2 软物质准晶的特点	363
18.3 软物质准晶的研究内容	363
18.4 软物质材料的初步介绍	365
参考文献	367
第 19 章 一类软物质的可能的数学模型	369
19.1 软物质概况再介绍	369
19.2 一类软物质材料的数学模型	370
19.3 一类软物质的弹性-流体-动力学	371
19.4 简化情形——不可压缩假定	373
19.5 软物质流体动力学——改进的模型	375
19.6 软物质中声音的传播	375

19.7 边界条件和边值问题的可解性讨论	376
19.8 第 19 章附录: 经典流体力学简介	376
参考文献	378
第 20 章 软物质准晶理论探索与应用和可能的应用	380
20.1 十二次对称软物质准晶	380
20.2 十八次对称软物质准晶	384
20.3 软物质准晶的位错解	386
20.4 软物质准晶的比热	388
20.5 软物质准晶的 Stokes-Oseen 流, 交替近似解	389
20.6 软物质准晶的动力学——对冲击载荷的瞬态响应, 有限差分 分析	397
20.7 线性化静力学解的积分表示	402
20.8 可能的五次与十次对称软物质准晶及其广义流体动力学	404
20.9 结论与讨论	405
参考文献	406
第 21 章 结束语	408
参考文献	409
主附录 某些数学补充材料	413
附录 I 与复分析有关某些补充计算	413
AI.1 解 (8.2-19) 的补充计算	414
AI.2 解 (11.3-54) 的补充计算	415
AI.3 点群 $5m$, $10mm$ 和 $10, \overline{10}$ 二维准晶平面塑性的广义内聚力模型 复分析的补充推导	417
AI.4 关于积分 (9.2-14) 的计算	419
AI.5 关于积分 (8.8-9) 的计算	420
参考文献	423
附录 II 对偶积分方程和某些补充计算	423
AII.1 对偶积分方程	423
AII.2 对偶积分方程 (8.3-8) 和 (9.7-4) 的解的详细推导	430
AII.3 对偶积分方程的解 (9.8-8) 的推导	432
参考文献	433

附录III 凝聚态物理学的 Poisson 括号方法、Lie 群和 Lie 代数方法及其 在固体准晶和软物质准晶的应用	435
AIII.1 凝聚态物理学的 Poisson 括号	435
AIII.2 有关公式和变分计算	437
AIII.3 有关动力学方程的推导	438
AIII.4 Lie 群概念和有关公式的推导	442
参考文献	445
索引	447

第 1 章

晶 体

本书主要讨论准晶的弹性与缺陷和一部分流体动力学问题。由于准晶和晶体存在内在的联系，因此，本章介绍晶体的基本知识，并对凝聚态物理学的对称性破缺原理和群论基本概念做初步介绍，这对我们学习后面的论题有帮助。

1.1 晶体结构的周期性，晶胞（元胞）

基于 X 射线的衍射图像，人们知道晶体由粒子（即原子、离子和分子）在空间规则排列而成。这种排列是一个最小单位的无限重复，形成完整晶体的周期性，这个最小单位称为晶胞（或元胞）。上述质点的重心的周期排列称为晶格。这样，不同晶胞的对应点具有相同的性质。这些点的位置，在以 $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3$ 为标架的坐标系中可以用矢径 $\mathbf{r}$ 和 $\mathbf{r}'$ 代表，又 $\mathbf{a}, \mathbf{b}$ 和 $\mathbf{c}$ 是三个不共线的矢量（矢量的严格数学定义参考第 2 章），则

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} + l\mathbf{a} + m\mathbf{b} + n\mathbf{c} \quad (1.1-1)$$

其中 $\mathbf{a}, \mathbf{b}$ 和 $\mathbf{c}$ 是描写完整晶体质点排列的平移性质的基矢； l, m 和 n 是任意整数。如果晶体的物理性质可以用函数 $f(\mathbf{r})$ 描写，那么上面说到的不变性可以用下面数学公式表示

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

这个公式是晶体平移对称性或平移不变性的数学描写，因为这种不变性是通过平移操作实现的，故称为平移不变性。

式 (1.1-1) 代表一种平移变换，而式 (1.1-2) 表示晶格在这种变换下的不变性。变换 (1.1-1) 的集合（全体）构成平移群。群的数学概念见本章的附录。