

准晶体中的结构缺陷

——相位子场面面观

丁 棣 华

(武汉大学物理系材料物理研究室, 武汉 430072)

本文首先用高维投影法和密度波法简明地讨论了相位子场的来由及性质, 然后介绍了准晶体中一种特殊的结构缺陷: 错排, 最后讨论了准晶体中位错的基本特征。通篇强调了相位子场在准晶的弹性及缺陷中的重要作用。

1984年准晶体问世, 旋即以它特有的结构特征——具有传统晶体学所不允许的旋转对称性和缺乏平移周期性——引起了物理学家、材料科学家乃至数学家的浓厚兴趣。它的出现不仅将人们对物质结构的认识推向一个更深的层次, 而且也给凝聚态物理领域增添了新的勃勃生机。几年来, 各国学者在研究准晶体的理想完整结构模型的同时, 还对它的结构不完整性, 即可能存在的结构缺陷, 从理论研究和实验观察两方面进行了积极的探索, 并取得了很大进展。准晶体的缺陷理论已初露端倪, 它给有序介质的缺陷理论开拓了新的领域。

大家知道, 任何类型的结构缺陷, 如晶体中的点缺陷、位错及堆垛层错, 都导致晶体点阵的某种方式的畸变, 从而在晶体中出现一定的弹性场。缺陷的弹性模型是缺陷理论的基本内容, 所以在讨论任何材料的结构缺陷时, 都必须了解该材料的弹性性质。准晶体也不例外。研究表明, 准晶体的弹性行为是独特的。与晶体相比, 一个关键差异在于: 准晶体的弹性场除熟知的位移场 u (亦称为声子场) 之外, 还有一个附加的弹性位移场 w , 称为相位子 (phason) 位移场。这两个场的性质截然不同。正是由于相位子场的出现, 才使得准晶体的弹性行为、缺陷类型、组态及性质都别具特色。所以, 要了解准晶体的缺陷, 就得先了解相位子场。它几乎无处不在。它就像一把钥匙, 只有掌握了它, 才

有可能去打开准晶体的缺陷知识的大门, 才有可能去探讨其方方面面。

我们的讨论就从相位子场开始。

一、描述准晶体弹性的两类变量: 声子位移场与相位子位移场

如果将一种正方形(拼块)在平面按周期排列(拼砌), 则构成一个最简单的二维周期点阵[见图 1(a)]. 设每个阵点都相对原来的平衡位置偏移一个微量 u . 当每个阵点的 u 的大小、方向不相同, 点阵被畸变[见图 1(b)]. 采用连续介质模型, 则畸变导致该弹性体内存在一个弹性位移场 $u(r)$. $u(r)$ 完全描述了该弹性体的弹性形变。图 2(a) 是近几年广为谈论的 Penrose 拼砌的局部图样。它是由胖、瘦两种菱形四边形拼块按某种匹配规则在平面拼砌而成的。它代表了一种二维准周期结构, 阵点即拼块的顶点。如果对它也进行上面的讨论, 则畸变了弹性体内同样出现一个位移场

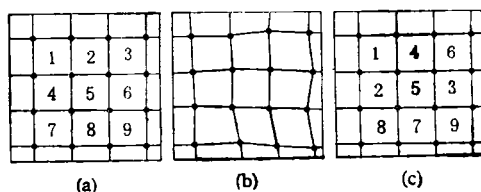


图 1 (a) 二维正方格子; (b) 点阵畸变;
(c) (a) 中方块的重排

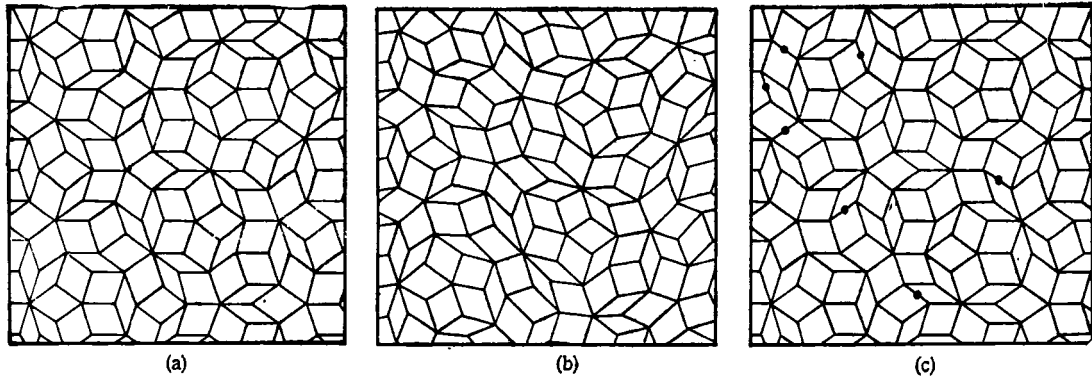


图2 (a) 完整的 Penrose 拼砌的局部图案; (b) 声子场对 (a) 的影响; (c) 相位子场对 (a) 的影响

u [见图 2(b)]. 按这种思路引进的这两个位移场在本质上没有什么区别, 它们(或相应的应变场)都描述了弹性体的弹性行为。

然而, 有悖常规的是: 仅仅只有 u , 并不能给出图 2(a) 这类准周期结构的弹性行为的完全描述。

对于晶体, 我们从不考虑下述情况: 将图 1(a) 的正方形拼块的位置进行调换, 或说重新排列, 得到一个新的网格如图 1(c) 所示。显然, (c) 与 (a) 毫无区别。这种重排并没有给我们增添任何新信息。所以, 不予考虑是理所当然的。可是, 对于由两种拼块按准周期排列形成的图 2(a), 如果出现拼块的重排, 后果就完全不一样了。图 2(c) 是 (a) 的拼块经过某种重排后的拼砌图案。初略一看, 直接的感觉是拼块的分布变了。但这还不是问题的关键。关键的区别在于: 重排将导致个别地点出现拼块的邻接违反构成原来完整拼砌的匹配规则。图 2(c) 中的圆点, 标记该棱线两边的拼块相邻是不符合匹配规则的 (详见缺陷部分的叙述和图 4)。由于出现了原来的平衡稳定结构所不允许的拼砌, 结果导致了局域的能量扰动, 并对系统的弹性能作出贡献。这意味着它是准周期结构物体的弹性行为的另一种表现形式。而且, 传统的弹性变量, 即实空间的位移场 u 已无法描述这类弹性行为。它必须由另外的弹性变量来描述。这就是出现在与实空间相关的补空间中的附加位移场 w 。

准确地说, 就弹性而言, 准晶体与晶体有相同的一面: 都存在由原子偏离平衡位置的小振动而引起的格波。而波数 $q \approx 0$ 的低频、长波长声学波的极限, 就是连续介质的弹性波。格波的量子称为声子, 它属于典型的低能、长波长元激发。所以, 描述连续介质弹性形变的位移场 u 也称作声子场。准晶体与晶体不同的一面是: 准周期结构晶体还存在另一类低能、长波长元激发^[1,2], 其激发单元称为相位子。上述附加位移场 w 亦称作相位子场。不过, u 和 w 都属于空间变化缓慢的、与平移对称破缺相关的流体动力学变量。只有将这两类变量联合才能给出准晶体弹性行为的完全描述。

下面我们再简要地从准晶理论上进一步说明相位子场的来由与特征。

构造准周期结构最常见的方法是所谓投影法^[3-6](关于投影法的基本理论请阅读参考文献 [7], 这里不再重复详谈)。为了构造一个 d 维准周期结构, 首先考虑 N 维 ($N \geq d$) 空间 R^N 中一个 N 维超立方点阵 Z^N , 并引入一个直角坐标系 Q , 它的正交归一基矢是

$$\{e_1, e_2, \dots, e_N\}. \quad (1)$$

在 Q 系中, Z^N 的阵点的位矢是 \tilde{r} 。再引入另一直角坐标系 E , 其正交归一基矢是

$$\{E_1^{\parallel}, E_2^{\parallel}, \dots, E_d^{\parallel}, E_{d+1}^{\perp}, E_{d+2}^{\perp}, \dots, E_N^{\perp}\}. \quad (2)$$

E 和 Q 由一个正交矩阵 T 关联。图 3(a) 示意了 $N=2$ 时(构造一维准周期结构)两坐标系之

间的关系。必须强调的是：(a) 中的 θ 角的选择应满足 $\tan\theta$ 等于一个无理数的条件，否则将得到周期结构。由(2)式中 E_{\parallel}^{\dagger} 所撑开的子空间称为平行空间 P_{\parallel} ，即准晶体所存在的实空间；由(2)式中 E_{\perp}^{\dagger} 所撑开的子空间称为垂直空间，亦称补空间，用 P_{\perp} 标记。 R^N 是这两个子空间的直和：

$$R^N = P_{\parallel} \oplus P_{\perp}. \quad (3)$$

根据变换矩阵 T ，我们可以得到 N 维位矢 \tilde{r} 分别在 P_{\parallel} 和 P_{\perp} 中的投影是： r^{\parallel} (d 维矢量) 及 r^{\perp} ($N-d$ 维矢量)，且有

$$\tilde{r} = r^{\parallel} \oplus r^{\perp}. \quad (4)$$

由于 \tilde{r} 是 Z^N 阵点的位矢，投影法的目的是希望 r^{\parallel} 就是拼砌图案中拼块顶点(阵点)在 P_{\parallel} 中的位矢。然而问题并没有这样简单。当 r 向 P_{\parallel} 投影得到 r^{\parallel} 的同时，还向 P_{\perp} 投影得到 r^{\perp} 。投影法要求：只有当与 r^{\parallel} 相关的 r^{\perp} 落在 P_{\perp} 中某个特定区域时，这样的 r^{\parallel} 才是顶点的位矢。这样的顶点才构成准周期点阵。这个约束条件用下述等效表达更为直观。图 3(a) 中两条虚线所夹的区域称为条带 (Strip)。它是将一个正方形沿平行于 E^{\parallel} 轴的方向移动时所经历的区域。推广到 N 维情况则是：一个 N 维超立方单胞平行于 d 维子空间 P_{\parallel} 移动时所经历的区域。上述约束条件现在可表达为：只有位于条带内的 Z^N 的阵点的位矢 \tilde{r} 在 P_{\parallel} 中的投影 r^{\parallel} 才是构成完整拼砌的各顶点的位矢。这时，相应的 r^{\perp} 均自动地满足了落在 P_{\perp} 中某特定区域的条件。可见，并不是 Z^N 的所有阵点都有投影资格。

若 Z^N 发生畸变，则各阵点都有一个微小偏移量 \tilde{u} 。于是阵点的新位矢 $\tilde{r}' = \tilde{r} + \tilde{u}$ 。 \tilde{u} 的出现给原来的完整拼砌的影响可从两方面进行分析。

首先， P_{\parallel} 中拼砌的各顶点相应地也相对各自原来的位置有一偏移量 u 。因为新位矢 r' 向 P_{\parallel} 投影得到的顶点的新位矢是 $r^{\parallel} + u$ 。由偏离了原位置的顶点连接而成的拼块不再规则，形状、大小均发生了变化。 \tilde{u} 在 P_{\parallel} 的投影 u ，不言而喻，就是声子位移场。图 2(b)

就是单独考虑声子位移场时的拼砌图案。

其次， \tilde{u} 的出现将改变条带中阵点的组成。由于 Z^N 畸变了，它的阵点偏离了原来位置，于是出现三种可能情况：(1) 阵点仍留在条带内，它们继续参与投影， P_{\parallel} 中的对应顶点依然存在；(2) 阵点被移出条带范围，失去投影资格， P_{\parallel} 中原来对应的顶点消失；(3) 原不属于条带内的阵点进入该条带内而取得参与投影的资格，于是在 P_{\parallel} 中将出现新添的顶点。顶点的部分更换自然导致拼块的重排。图 2(c) 示意了这种重排。显然，拼块并未畸变，这种行为与声子场 u 无关。

还可以从另一个等效的角度来讨论 \tilde{u} 的上述影响。阵点的新位矢 $\tilde{r}' = \tilde{r} + \tilde{u}$ 向补空间 P_{\perp} 投影后得到的矢量是 $r^{\perp} + w$ 。原来的 r^{\perp} 已落在 P_{\perp} 中某个要求的特定区域。添加 w 后，也可能出现三种情况：(1) $r^{\perp} + w$ 仍属于该特定区域，则与之对应的 P_{\parallel} 中的位矢 $r^{\parallel} + u$ 仍代表拼砌的顶点；(2) 添加 w 后，使得 $r^{\perp} + w$ 超出了该特定区域，导致对应的 $r^{\parallel} + u$ 已不再代表拼砌图案中阵点的位矢，顶点消失；(3) 原来并未落在某特定区域的 r^{\perp} ，因添加 w 后而进入该区域，结果导致在 P_{\parallel} 中出现一个新的顶点。由此可见， \tilde{u} 在补空间中的投影 w 完全控制了 P_{\parallel} 空间中顶点的改组。所以，我们说，相位子位移场 w 描述了拼块重排这种特殊形式的弹性行为。

以上的分析导致下面的数学表达式：

$$\tilde{u} = u \oplus w, \quad (5)$$

\tilde{u} 是 R^N 中的 N 维矢量， u 与 w 分别是直和子空间 P_{\parallel} 与 P_{\perp} 中的 d 维与 $N-d$ 维矢量。

大家知道，存在一个与 R^N 对应的倒易空间，以及与 Z^N 对应的倒易点阵。该倒易点阵也是 N 维超立方点阵。所以，有 N 个 N 维的、互相正交的倒格矢 G_n 。 G_n 在 P_{\parallel} 和 P_{\perp} 的投影分别用 G_n^{\parallel} 及 G_n^{\perp} 标记。它们在子空间的分布取决于变换矩阵 T 。例如，对二维 Penrose 拼砌，五个 G_n^{\parallel} 在二维子空间的分布是：由正五边形的中心指向五个顶点，组成一簇(五) G_n^{\parallel} 矢，类似于(4)式，有

$$\mathbf{G}_n = \mathbf{G}_n^1 \oplus \mathbf{G}_n^2, \quad n = 1, 2, \dots, N. \quad (6)$$

对准晶体弹性及位错等缺陷的理论研究大都采用密度波描述法^[1,2,8,9]。简单地说,就是将系统的质量密度函数看作是几个平面(密度)波的叠加。例如,描述一个五维超立方结构的五维密度,可视为五个平面密度波的叠加。相应的五个五维正交波矢就是上面的 \mathbf{G}_n ($n = 1, 2, \dots, 5$)。投影到二维子空间 $P_{//}$ 中,五个波矢 \mathbf{G}_n^1 组成一簇星矢量,两个相邻波矢交角均为 $\frac{2}{5}\pi$ 。相应的五个密度波就描述了二维 Penrose 结构。

由一般的波动理论可知,附加的位移场将导致波的相位的改变。相位的变化决定于波矢与位移的点乘积:

$$\phi_n = \mathbf{G}_n \cdot \hat{\mathbf{u}} - \mathbf{G}_n^1 \cdot \mathbf{u} + \mathbf{G}_n^2 \cdot \boldsymbol{\omega}. \quad (7)$$

略去较复杂的理论分析过程,仅由上式的直观分析可知,声子场 \mathbf{u} 和相位子场 $\boldsymbol{\omega}$ 都将引起密度波相位的改变。研究表明^[2]: 声子场 \mathbf{u} 导致密度波的波阵面弯曲(对应拼块的形变); 而相位子场 $\boldsymbol{\omega}$ 将导致波阵面之间的相对移动。在移动中与其他波阵面切割但不改变波阵面的形状(对应拼块重排)。

二、准晶特有的结构缺陷: 错排

错排 (Mistake), 顾名思义,是在理想完整

拼砌中的某些局域,出现违反某种确定的排列规则的现象。这类缺陷在准晶体中普遍存在,且与相位子直接相关。

1. 一维 Fibonacci 序列中的错排

如果将两种长度的线段,如 L (较长)和 S (较短),按一定次序沿一个取向首尾相接排列,则构成某种一维结构。图 3(a) 中示意了一种一维结构。它的最基本特征是缺乏平移对称性。构成这种结构的两种基本线段的长度之比是一个无理数,或说它们无公度。虽然它没有平移周期性,但它具有自相似性。该结构遵守自相似变换^[6]:

$$\begin{bmatrix} L \\ S \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} L \\ S \end{bmatrix}. \quad (8)$$

上式亦称为放大-缩小规则。按 (8) 式表示,由 L 开始,经 $L \rightarrow LS \rightarrow LSL \rightarrow LSLLS \rightarrow LSLLSLSL \rightarrow \dots$,即可生成图中的序列,并可无限地延伸下去。若选取 $L/S = (1 + \sqrt{5})/2 = 1.618\dots \equiv \tau$,即黄金分割比,则该序列称为 Fibonacci 序列。它代表一种一维准周期结构。

出现在这种准周期结构中的错排,最简单的情况是拼块 L 和 S 被互相替代,出现 SS 或 LLL 这样不允许的拼砌组态^[12],因为这种组态违反自相似规则。图 3(b) 用箭头指出了错排 SS 的位置,并说明了 SS 产生的原因: 条带弯曲了。根据前面的分析,条带弯曲将导致投

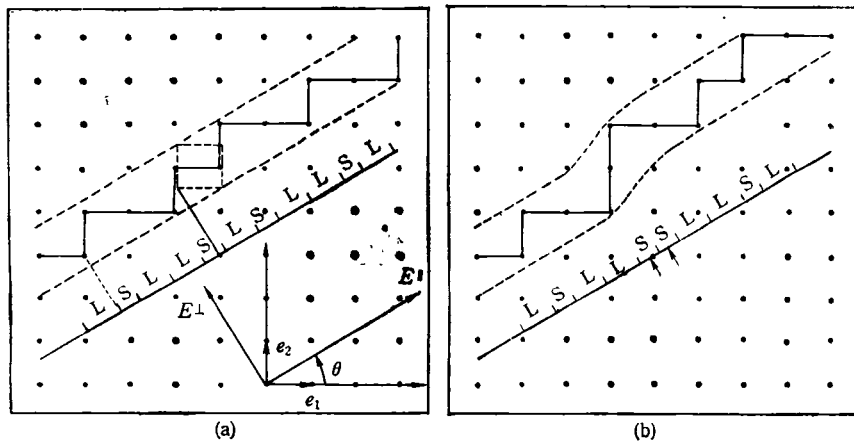


图 3 (a) 由二维正方点阵投影得到一维 Fibonacci 序列, 右下角示意坐标系 Q 与 E 之间的关系; (b) 条带的弯曲导致错排组态 SS。

影阵点变更。等效地,设该处条带依旧,代之以阵点偏移,则由于投影资格的转移而达到同样的效果。毋庸多说,错排这类结构缺陷总是伴随着一个相位子位移场。

2. Penrose 拼砌中的错排

前面曾提到,在图 2(a)的完整 Penrose 拼砌中,所有拼块的邻接都服从一套确定的匹配规则。图 4(a)示意了这套规则:按图示规律给两种拼块的每条棱画上半边空心或实心箭头。当任何两个拼块(不管同类与否)相邻排列时,凡两条重合的棱恰好拼成一个完整的空心或实心箭头,则这种拼砌符合匹配规则。否则就是错排。

图 4(b)是取自完整 Penrose 拼砌中的一部分,暂且将它称做一条“节虫”(worm)。它可视为两种六边形 L 和 S 沿一个取向的拼砌。其中 L 是由两胖一瘦、S 是由两瘦一胖的菱形四边形构成。完整的 Penrose 拼砌中包含无数条相交的节虫。按图 4(a)给定的规则,在图 4(b)中画出了两拼块相邻时,重叠的棱都拼出一个完整的空心或实心箭头,处处符合匹配规则。读者可自行给未画箭头部分按图 4(a)的规则添补上空心或实心半边箭头,可证明确实处处符合匹配规则。还可将此方法应用到图 2(a)。

现在,若将节虫中的一段绕水平轴“翻转”

180°,如将图 4(b)中的 AB 段翻转 180°就得到图 4(c)的一条节虫。图中示意了在已翻和未翻部分的交界处,相邻拼块的棱重叠后不能拼成一个完整的箭头。长箭头 2 所指处的两个半边箭头虽然都是空心,但指向相反,所以该处违反了匹配规则,错排即出现在这里。同样,在另一端交界处,拼块的邻接也是违反匹配规则的。如箭头 1 所指处。为了简洁起见,用一实心圆点标记该处两条重叠的棱不能拼出一个完整的箭头。凡有圆点,即表明该处出现错排。图 2(c)、图 5 及图 6 中出现圆点的地方都是错排。只要按图 4(a)的规则给图中的拼块添上半边箭头,就可发现,凡圆点处均不能拼出完整的箭头。

我们再仔细考查一下翻转的含义。例如用 S 标记的六边形,胖菱形原来位于 S 的下部,翻转后位于 S 的上部。六边形内部拼块的这种重排,实际上只需将中心附近的顶点向下移动一小段距离就可实现。我们可从两方面来进一步理解这种移动。第一,从投影法的观点来看,顶点的这种移动意味着旧顶点消失,新顶点产生。这正是高维空间的超立方点阵发生畸变、阵点投影资格发生转移的表现。可见,拼块的重排及错排的出现乃是相位子位移场的行为。第二,从实空间中原子的排列的角度考虑,顶点的移动改变了拼砌图案,这意味着缀饰拼砌图案

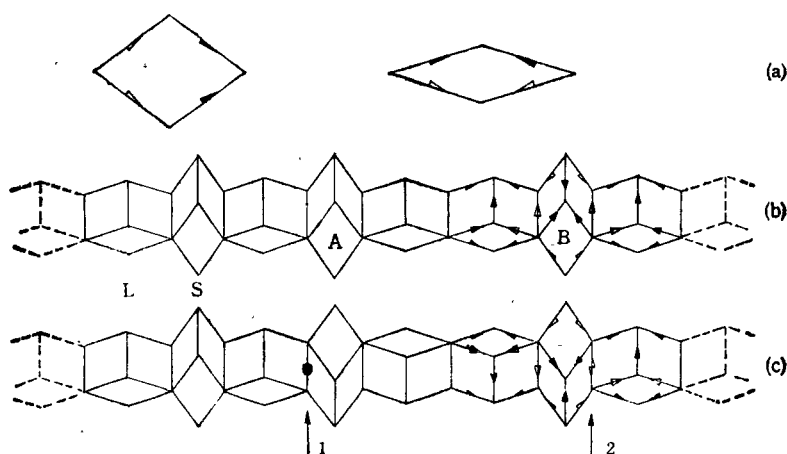


图 4 (a) 拼块的匹配规则; (b) 由两类六边形构成的一条节虫; (c) 一段节虫翻转后,在箭头 1,2 处出现错排

的原子必需有局域的移动,而这种移动已不属于对平衡位置的微小偏移.所以,相位子场不同于传播型的声子场,它属于扩散型,这是二者在动力学上的本质区别.因此,相位子场对外应力的响应十分缓慢.有文献估计,其时间将以月、年乃至地质年代计算^[11].

错排的一个重要性质是:错排处拼块的拼砌组态,在原来的完整拼砌图案中是找不到的,或者说是:它与原来的完整拼砌不属于同一局域同晶类(local isomorphism class).

错排这种缺陷可以通过节虫的翻转沿节虫运动:当翻转段越来越长时,错排越来越远;当翻转段变短时,错排靠近,直至湮灭^[10].自然,运动是通过扩散进行的.

对于三维准晶体,一条节虫推广为由厚的和扁的平行六面体构成的拼砌层.一段节虫的翻转推广为某个局域拼砌层的翻转.这时,错排将出现在这个局域的周界,形成一个闭合的错排环.

三、准晶体中位错的基本特征

位错是分别出现在二维和三维准晶体中的拓扑稳定的点和线缺陷.下面主要介绍它不同于晶体中位错的一些基本特点,并略去数学处理的细节.

1. 高维的 Burgers 矢量(简称为柏矢)

柏矢是描述位错的最重要的特征矢量.晶体中位错的柏矢是晶体点阵的平移矢量.然而准周期结构缺乏这样的矢量.因此,首先遇到一个基本问题是,如何定义准晶体中位错的柏矢,或说如何表达位错条件.

在晶体中,一条刃位错线就是被插入的(或抽走的)半无限原子面的边界线.在密度波描述中,例如对二十面体三维准晶^[13],如果将六个密度波中的一个或几个半无限波面(层)抽走,或插入,那么,这半无限波层的边界线就是一条位错线.显然,这将导致波阵面畸变,从而导致与坐标有关的相位变化 $\Delta\phi_n$. 设 c 是绕该位错线的一条闭合路径.沿 c 将各点的相位变化

累加起来,按上面的位错定义,其和应是 2π 的整数倍^[13]:

$$\oint_c d\phi_n = 2\pi P_n, \quad (9)$$

式中 P_n 为任何整数.根据前面对 ϕ_n 和 \hat{u} 的关系的讨论,由(7)式和(9)式可引出一个推论:满足相位改变量为 2π 的整数倍的位移矢量就是柏矢 b .从弹性场的角度看,位错导致形变并引入位移场 $u \oplus w$. 于是下面的表达式^[10]

$$\oint_c d(u \oplus w) = b \quad (10)$$

与(9)式等价.它也代表了位错条件与晶体中的表达式 $\oint du = b$ 相似.不过,(10)式的柏矢是高维空间超立方点阵的平移矢量.对三维二十面体准晶, b 是六维矢量.对二维 Penrose 拼砌, b 是五维矢量.

由(10)式可引出一个结论:准晶体中任何一条位错的柏矢必须有一个在补空间的分量.不存在 $u = 0$ 或 $w = 0$ 的柏矢^[9].这个结论意味着准晶体中的位错不对应半无限原子面的插入(或抽走).任何位错的弹性位移场,除了声子位移场之外,总还伴随一个相位子位移场. u, w 互相连锁,后者以错排形式出现.

2. 手续特殊的 Volterra 过程^[10]

理论上,在晶体中构造一条位错,总是采用有名的 Volterra 过程完成的.该过程的基本要点是^[10]:取一中空圆柱体(连续介质),想像地沿径向从一边将其切割,割口至轴线为止.于是出现上下两个切口表面.施加外力,迫使两切口表面刚性地相对平移一个矢量 b .若相对平移是相向而行,为避免重叠而应抽走厚度为 b 的材料;若背向而行,为避免裂缝而应塞入厚度为 b 的相同材料.然后再将切口表面重新粘合.撤去外力让其弹性松弛.该圆柱体处于存在内应力的状态;轴线就是一条位错线,它起到内应力源的作用.对于晶体,这个过程有两点必须强调:第一,切口上下两侧表面上阵点的排列必须全同.这样,重新粘合后,这个想像的过程将不会在切口面上留下任何痕迹.否

则,该切口面也会成为内应力源。第二,两侧表面刚性地相对移动的位移矢量必须是一个点阵平移矢量。

对于准周期结构,第二点显然无法满足。解决的办法是将该过程移到高维空间的超立方体中去执行。因为它具有平移对称性。

例如,我们要在二维 Penrose 拼砌中构造位错,可以将五维超立方体切开并移走一个四维超平面。根据投影法的基本理论,这对应于二维 Penrose 拼砌中移去一条弯弯曲曲的小道(trail),如图 5(a)中一条空白带所示。从超立方点阵的角度看,切口两侧的四维超平面的阵点排列是全同的。然而从投影法的角度看,由于我们并不关心整个侧表面,而只关心属于条带的那部分表面(条带隐埋在超立方体内,也同时被切开而露出两个侧表面)。由于条带具有无理数斜率,属于条带的两个侧表面上阵点的分布是不全同的。可见,若继续执行 Volterra 过程,其结果是:当图 5(a)的小道两边粘合时,因不符合匹配规则而形成一条错排线。所以,简单地将 Volterra 过程照搬到高维中去进行是不行的。虽然满足了第二点要求,但不满足第一点要求。

看来,如要继续在高维空间正确执行这个过程,必须解决一个新问题:如何使条带的切口两侧表面上的点阵全同。其方法是将其中一个侧表面施行相应的平移对称操作(操作元素自然包含该位错的柏矢)。不严格地说,就是将

条带的一个侧面在切口侧面上移动到所含阵点的排列与条带的另一侧表面全同为止。该侧面位置的突变导致条带畸变。为了使畸变能在整个条带中连续平滑地过渡,需将整个条带绕位错芯(如一个奇异的三维空间)作适当的弯曲变形。图 5(b)是在采取这个特殊手续后再移走一条(实际是不同取向的两条)小道所得的拼砌图。它的特点是将小道两边粘合时,处处满足匹配规则,从而不留下可识别的痕迹。图 5(c)是正确执行上述 Volterra 过程后,在 Penrose 拼砌中构造的柏矢为 $[-1,1,0,0,0]$ 的位错。切口面已完全不可辨认了。

如果读者已对第一节中叙述的相位子的理解无误,并对错排也已了解,那么现在就容易想到:尽管这个特殊手续似乎难以捉摸,条带弯曲的作用也只不过是阵点的投影资格进行了重新调整。于是一个自然的结论是:位错的相位子位移场 w 也由此而引入。所以,图 5(b)与(a)的一个重要区别在于:出现了一些标记错排的实心圆点。图中用阴影标识了一条节虫。圆点两边的节虫段相对翻转了 180° 。圆点位于交界处的棱上,表明该棱不能拼出一个完整的箭头。从图 5(b)到(c),仅仅是将空小道两边移拢并粘合,这个过程导致声子位移场 u 的引入。所以,我们说,要在准晶体中构造一个位错,必须执行上述的完整的 Volterra 过程。同时,也等于向准晶体中引进了两个耦合在一起的(或说互相连锁的)声子弹性场和相位子弹性场。

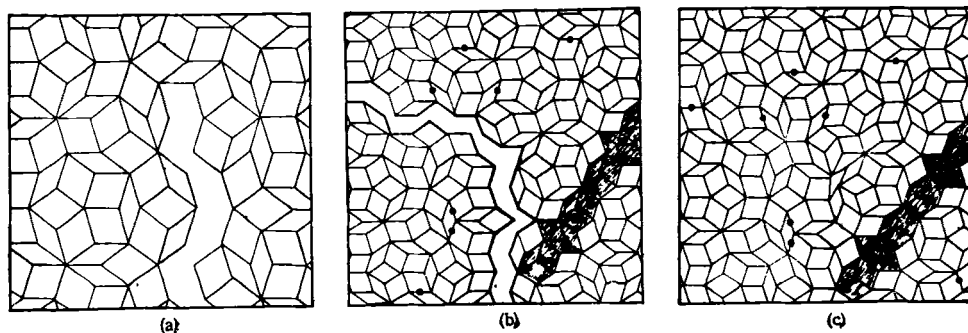


图 5 (a) 直接将 Penroses 拼砌中的一条小道移走; (b) 采用特殊手续的 Volterra 过程后, 一条小道被移走, 切口面尚未粘合; (c) 切口面粘合后, 包含 $b = [-1, 1, 0, 0, 0]$ 的位错的 Penrose 拼砌

缺少哪一方,都不是完整的 Volterra 过程,自然也不足以构成位错。

3. 移动艰难的位错

当位错向前运动时,相应的弹性场也将跟随其向前运动。与晶体相比,准晶体中位错的运动要困难得多,或说可动性低得多。这是十分明显的。因为它自身多了一个沉重的负担:拖着一个与声子场连锁、且要通过扩散才能运动的相位子弹性场。位错向前移动时,一方面由于芯部的移动有可能产生新的错排;另一方面,原来的错排也将随之转移,其机制可以是节虫段的相继翻转。图 6(a)和(b)清楚地展示了两条位错在分离过程中错排的产生和移动^[40]。例如,图 6(a)中标号为 1 的圆点在图 6(b)中已移动到了标号为 2 的位置。这是因为用阴影线标识的节虫段相继翻转 180° 所致。

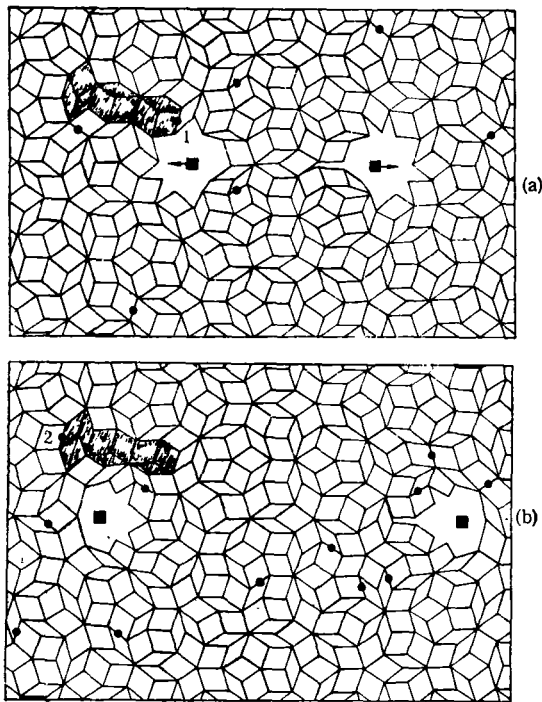


图 6 两个很靠近的位错 (a) 互相远离(b),相应的声子场和相位子场随之移动

人们估计,准晶体中位错运动的难易程度

可与晶体中刃位错的攀移相当。所以,准晶的屈服极限将急剧增高。

迄今为止,对准晶体的缺陷的研究仅经历几个春秋,正所谓方兴未艾。虽然对基本概念的研究已取得了很大进展,但许多方面还带有局部的性质,离对全貌的认识尚距离较远。关于缺陷的分类、原子模型、能量、相互作用及对性能的影响等诸多方面,都有待于人们从理论和实验两方面进行深入研究。我国科学工作者在准晶体领域的研究工作已跻身于世界先进行列,不仅在发现新型准晶体结构方面已取得了世界同行公认的结果^[15],而且在准晶体的结构缺陷研究方面,如对位错^[6]、层错^[17]的实验观察,也取得了重要进展。

作者感谢王仁卉教授、杨顺华教授在本文撰写中所提供的宝贵意见和帮助。

- [1] T. C. Lubensky et al., *Phys. Rev. B*, 32(1985), 7444.
- [2] J. E. S. Socolar et al., *Phys. Rev. B*, 34(1986), 3345.
- [3] M. Duneau and A. Katz, *Phys. Rev. Lett.*, 54(1985), 2688.
- [4] M. V. Jaric, *Phys. Rev. B*, 34(1986), 4685.
- [5] D. Levine and P. J. Steinhardt, *Phys. Rev. B*, 34(1986), 596.
- [6] J. E. S. Socolar and P. J. Steinhardt, *Phys. Rev. B*, 34(1986), 617.
- [7] 姜小龙等, *物理*, 16(1987), 405.
- [8] P. Bak, *Phys. Rev. B*, 32(1985), 5764.
- [9] D. Levine et al., *Phys. Rev. Lett.*, 54(1985), 1520.
- [10] J. Rohsung and H. R. Trebin, *Defects in Quasicrystals*, in *Introduction to the Mathematics of Quasicrystals*, Edited by M. V. Jaric, Academic Press Inc., (1989), 184.
- [11] P. J. Steinhardt and S. Ostlund, *The Physics of Quasicrystals*, World Scientific Publishing Co., Singapore, (1987).
- [12] J. P. Lu and J. L. Birman, *Phys. Rev. Lett.*, 57(1986), 2706.
- [13] T. C. Lubensky et al., *Phys. Rev. B*, 33(1986), 7715.
- [14] 杨顺华, *晶体位错理论基础*, 第一卷, 科学出版社, (1988).
- [15] 郭可信, *物理*, 20(1991), 11.
- [16] Z. Wang et al., *Phys. Rev. Lett.*, 66(1991), 2124.
- [17] M. Dai et al., *Phil. Mag. Lett.*, 64(1991), 21.