

真实自回避行走中晶体生长界面结构的分形行为

彭年¹, 刘永顺¹, 聂保锋², 刘宁强²

(1. 首都师范大学 资源环境与旅游学院, 北京 100037; 2. 中国地质大学 地球科学与资源学院, 北京 100083)

摘要: 晶体生长过程实际上就是生长基元从周围环境中不断地通过界面而进入晶格座位的过程。一般认为, 研究生长基元以何种方式以及如何通过界面进入晶格座位是晶体生长界面结构研究中的关键。在生长基元以分子或者原子的微粒子形式在生长环境中进行无规游走的前提下, 本文运用真实自回避行走(TSAW)模型, 通过重整化群思想来研究晶体生长界面结构的分形行为。研究发现: 晶体生长界面结构的分形行为与生长基元的游走路径形态密切相关, 并且在理想状况下真实自回避行走与标准 Koch 曲线的分形维极为接近。

关键词: 真实自回避行走; Koch 曲线; 分形维数; 重整化; 晶体生长

中图分类号: O781

文献标识码: A

文章编号: 1000-6524(2007)05-0449-04

The fractal behavior of interfacial structure of crystal growth on the basis of the true self-avoid walk model

PENG Nian¹, LIU Yong-shun¹, NIE Bao-feng² and LIU Ning-qiang²

(1. College of Resources, Environment and Tourism, Capital Normal University, Beijing 100037, China; 2. School of Earth Sciences and Resources, China University of Geosciences, Beijing 100083, China)

Abstract: Crystal growth is a process in which the growth elements from the ambience cross the interface and enter crystal lattices. In general, the entry of the growth elements into the crystal lattice through the interface constitutes a key problem in the study of interfacial structure of crystal growth. It is held in this paper that the growth elements (molecules or atoms) walk at random in ambience. On the basis of the true self-avoid walk (TSAW) model and the principle of renormalization, the authors studied fractal behavior of interfacial structure of crystal growth. It is found that fractal behavior of interfacial structure of crystal growth has a close relationship with the shape of the walking route of the growth elements, and that there exists a close similarity in fractal dimension between TSAW and standard Koch curve under the ideal condition.

Key words: true self-avoid walk; Koch curve; fractal dimension; renormalization; crystal growth

晶体生长界面动力学研究的目的是探索各种条件下的生长机制和研究晶体生长速率与生长驱动力之间的关系(张克从等, 1997)。晶体生长界面动力学取决于生长机制, 而生长机制又取决于生长过程中的界面结构, 因此生长界面动力学规律与界面结构是密切相关的。在理论研究上前人做了大量工作, 提出了4种理论模型(Hartman, 1973; Brice, 1973)。

分形几何学在应用到生长界面动力学之前已在其他自然科学领域得到了广泛的应用(Berry *et al.*, 1980; Mandelbrot, 1982; Montroll and Shlesinger, 1983)。20世纪80年代彭志忠教授率先在世界上明确提出将准晶态研究与分形几何学结合起来, 并首次提出了准晶体的微粒分数维模型(彭志忠, 1985)。此后分形几何学与结晶学之间的结合迅速发

收稿日期: 2007-04-09; 修订日期: 2007-06-21

基金项目: 国家青年自然科学基金项目(40002006 A0472039)

作者简介: 彭年(1977-), 男, 博士, 主要从事地球化学动力学和地质系统复杂性研究, E-mail: cnucug@126.net.

展起来,研究内容包括结晶形态方面,如各种晶体中的分形研究(Verheijen,1992;黄晖等,2004),离子聚合物的分形现象(Wu,1997);分析模型和理论方面,如分子动力学(Zheng,1998;Henkel,2002;Pleimling and Roach,2005),扩散限定聚集(DLA)模型的分形生长(Fowler and Roach,1996;Meakin,1998)等。

本文考虑在扩散界面中,生长基元以分子或者原子团的微粒子形式在生长环境中由随机游走的液相转变为晶相的过程。在生长基元以分子或者原子的微粒子形式在生长环境中进行无规游走的前提下,运用分形几何学理论和真实自回避行走(TSAW)模型,通过重整化群思想来研究晶体生长界面结构的分形行为,得到了真实自回避行走与 Koch 曲线之间的内在联系。

1 真实自回避行走(TSAW)与 Koch 曲线

真实自回避行走是一个简单的动力生长模型,它随时随地都尽可能地回避自己走过的格点。真实自回避行走是无规行走。真实自回避行走各步的权重不尽相同,它是根据到达各格点后下一步所可能行走的路径来决定,受到自身“历史”的约束(杨展如,1996)。

瑞典数学家科赫构造了一种“妖魔曲线”(Koch,1904),被称为 Koch 曲线,其构造过程如下(图 1):取 1 条欧氏长度为 L_0 的直线段,将其 3 等分,保留两端的线段,将中间的 1 段改换成夹角为 60° 的两个等长的直线。将长度为 $L_0/3$ 的 4 个直线段分别进行 3 等分,并将它们中间的 1 段均改换成夹角为 60° 的两段长为 $L_0/9$ 的直线段,得到 $n=2$ 的操作。重复上述操作直至无穷,便得到一条具有自相似结构的折线,这便是本文所说的 Koch 曲线。

图 2 左是显微镜下雪花晶体的斑图,被称作分形雪花,可以用 Koch 曲线来模拟(图 2 右):1 个等边三角形,经过不断地划分,形成更多的细节,每一部分和整体都很相似。随着划分,边长会逐渐趋向于无穷大,而面积却趋近一个常值。

Koch 曲线的分形维计算公式为:

$$d_f = -\lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{\ln N(\delta)}{\ln(\frac{1}{\delta})} = -\lim_{n \rightarrow +\infty} \frac{\ln(4^n)}{\ln[\frac{1}{(\frac{1}{3})^n}]} = \frac{\ln 4}{\ln 3} \approx 1.2618$$

其中, δ 为覆盖线元标度, $N(\delta)$ 是覆盖次数。

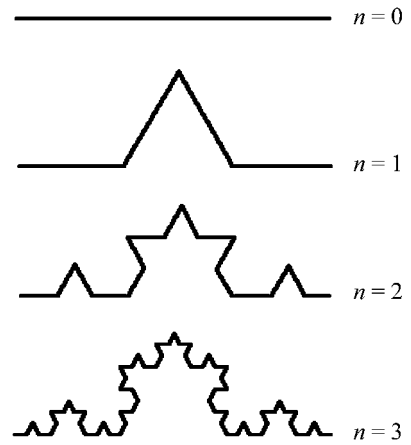


图 1 Koch 曲线
Fig. 1 Koch curve

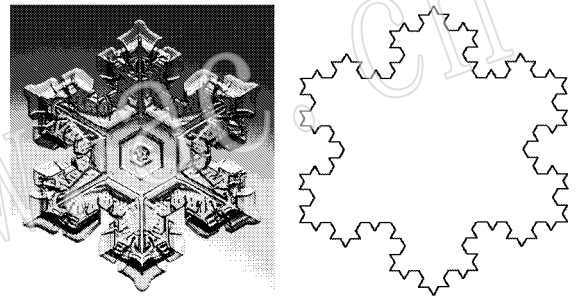


图 2 分形雪花
Fig. 2 Fractal snowflake

2 正三角格点 TSAW 的重整化

显微镜下观察落入溶液中的一粒花粉,会看见它不间断地做无规则运动。无规粒子的轨迹,由各种尺寸的折线连成。只要有足够的分辨率,就可以发现原以为是直线段的部分,其实由大量更小尺度的折线连成。这是一种处处连续、但又处处不可导的曲线。由此启发,重整化群的标度变化可以用来研究无规运动的生长基元按照某种特定模式自发聚集过程。本文假定,扩散界面由许多微粒子生长基元层构成,并按照真实自回避游走模式进行粒子的自发聚集。

重整化群变换是空间长度的标度变换,实质是放大尺度的变换,既通过“粗粒化”过程以减少系统的自由度,其物理背景是系统发生相变时,对临界行为起到决定作用的不是小尺度行为,而是大尺度行为(文志英,2000)。下面用重整化的思想来处理真实自回避行走中的生长基元游走行为。

标度不变性是重整化群的基础。考虑到晶体生长系统中微粒子生长基元层到达某晶格位置的概率在标度变换前后的一致性,在正三角格点的平面中,取重标因子 $b=2$ 进行“粗粒化”标度变换(也称 RG 变换)来考察微粒子到达概率(图 3)。令相邻点间微粒子的散逸率为 p 和 p' 。

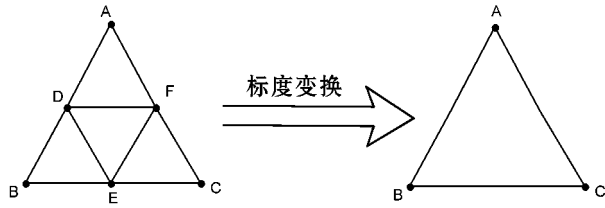


图 3 “粗粒化”重标变换

Fig. 3 “Coarsegraining” rescaling transformation

为使问题简单化,仅考虑图 3 中 B 点到达 A 点概率即可。通过分析, B 点的粒子共有 10 种路径(图 4)途经三角形域而到达 A 点。分别取变化前后的第 1 种路径予以说明。

变化前的 $B \rightarrow D \rightarrow A$ 途径: $B \rightarrow D$ 到达概率为 $1/2k$, $D \rightarrow A$ 到达概率为 $1/3k$, 其中 $k=1-p$; 变化后的 $B \rightarrow A$ 途径: $B \rightarrow A$ 到达概率为 $1/2k'$, 其中 $k'=1-p'$ 。

分析得到重整化群代数方程(重标因子 $b=2$):

$1/2k' + 1/2k'^2 = 1/6k^2 + 18/k^3 + 1/24k^4 + 1/12k^5 + 1/12k^4 + 1/12k^5 + 1/12k^3 + 1/24k^4 + 1/18k^3 + 1/18k^4$ 整理得: $18k' + 18k'^2 = 6k^2 + 7k^3 + 8k^4 + 6k^5$ 。令 $k'=R(k)$, $R(k)$ 为作用参数 k 和 k' 之间的非线性变换群, 求出 $R(k)$ 变换中的实不动点 k^* , 使得 $k^* = R(k^*)$ 。将其代入上式得: $k_1^* = 0, k_2^* = -1.0374, k_3^* = 1.1484$ 。

得到以上 3 个不动点后,需进一步确定其中一个为临界点 k_c 。先对变换群函数 $R(k)$ 求导,得: $R'(k) = (12k + 21k^2 + 32k^3 + 30k^4) / (36k' + 18)$ 。然后分别将 $k_1^* = 0, k_2^* = -1.0374, k_3^* = 1.1484$ 带入导函数中,得: $R'(k)|_{k_1^*} = 0, R'(k)|_{k_2^*} = -0.4740, R'(k)|_{k_3^*} = 2.3949$ 。易知 k_3^* 为不稳定不动点。

由于考虑到临界点为不稳定不动点 $k_c = k_3^*$, 故取 $\lambda = R'(k)|_{k_c} = 2.3949$, 进而得 $d_f = \frac{\ln \lambda}{\ln b} = \frac{\ln 2.3949}{\ln 2} = 1.2599$ 。这个结果与 Koch 曲线分形维数 1.2618 相比误差仅为 0.3%。

3 结论

自然界中,分形无处不在。已经有很多证据说明晶体生长(图 5),甚至在纳米级的尺度(图 6)都能发现分形行为的存在。本文认为晶体生长界面结构

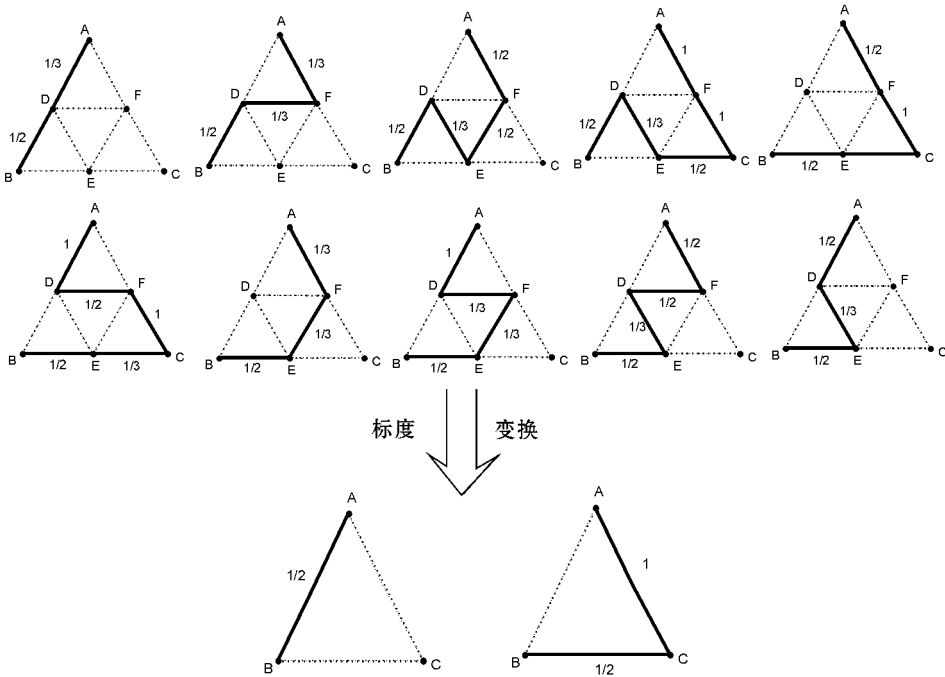


图 4 TSAW 过程的重整化

Fig. 4 Renormalization of the course of TSAW

的分形行为与生长基元的游走路径形态密切相关。通过重整化处理发现 TSAW 过程的分形维数与标准 Koch 曲线的分形维数极为接近,且基于正三角格点的 TSAW 分形维数明显优于已有结果。在正方形网格模型中,重标因子 $b=2$ 时, $d_f=1.415$; 重标因子 $b=3$ 时, $d_f=1.419$ (杨展如, 1996)。本文认为标准 Koch 曲线是 TSAW 的一种特殊生长模式, 这为研究矿物晶体的随机生长问题提供了一个可行的途径。

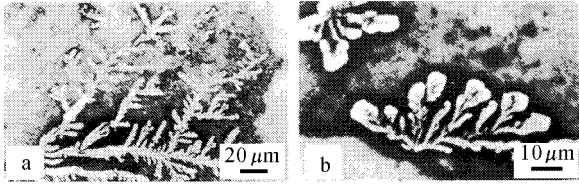


图 5 低浓度的 NaCl 溶液形成的两种斑图 (据葛副鼎等, 1998)

Fig. 5 Patterns formed by NaCl crystallites of low concentration NaCl solution (after Ge Fuding *et al.*, 1998)

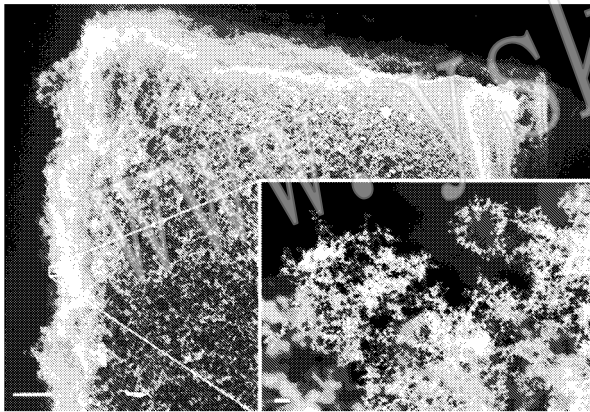


图 6 纳米泡沫的分形结构 (据 Rode 等, 2000)

Fig. 6 Fractal structure of nano-foam (after Rode *et al.*, 2000)

References

- Berry M V and Lewis Z V. 1980. On the Weierstrass-Mandelbrot fractal function [J]. *Proc. R. Soc. London*, 370A: 459~484.
- Brice J C. 1973. *The Growth of Crystal from Liquid* [M]. Amsterdam: North-Holland Publishing Company.
- Fowler A D and Roach D E. 1996. A model and simulation of branching mineral growth from cooling contacts and glasses [J]. *Mineralogical Magazine*, 60: 595~601.
- Ge Fuding and Zhu Jing. 1998. SEM observation of fractal patterns formed with NaCl crystallite [J]. *Journal of Chinese Electron Microscopy Society*, 17(6): 744~747 (in Chinese).
- Hartman P. 1973. *Crystal Growth, an Introduction* [M]. Amsterdam: North-Holland Publishing Company.

- Henkel M. 2002. Phenomenology of local invariance: From conformal invariance to dynamical scaling [J]. *Nucl. Phys. B*, 641: 405~486.
- Huang Hui, Xu Jingjun and Kong Yongfa *et al.* 2004. Observation of fractal geometry in lithium niobate crystal [J]. *Journal of Synthetic Crystals*, 33(4): 647~650 (in Chinese).
- Koch H von. 1904. Sur une courbe continue sans tangente, obtenue par une construction géométrique élémentaire [J]. *Archiv für Matemat. Astron. och Fys.*, 1: 681~702.
- Mandelbrot B B. 1982. *The Fractal Geometry of Nature* [M]. San Francisco: Freeman W H.
- Meakin P. 1998. *Fractal, Scaling and Growth Far From Equilibrium* [M]. Cambridge: Cambridge University Press.
- Montroll E W and Shlesinger M F. 1983. Maximum entropy formalism, fractals, scaling phenomena, and 1/f-noise: A tale of tails [J]. *J. Stat. Phys.*, 32: 209~230.
- Peng Zhizhong. 1985. The principle of constructing of quasi-crystals and fractal dimension model of particulate substances [J]. *Earth Sciences*, 10(4): 159~174 (in Chinese).
- Pleimling M and Gambassi A. 2005. Corrections to local invariance in the nonequilibrium dynamics of critical systems: Numerical evidences [J]. *Phys. Rev. B* 71, 180401(R): 1~4.
- Rode A V, Gamaly E G and Luther-Davies B. 2000. Formation of cluster-assembled carbon nano-foam by high-repetition-rate laser ablation [J]. *Appl. Phys.*, A 70: 135~144.
- Verheijen M A. 1992. Growth and morphology of C₆₀ crystals [J]. *Chem. Phys. Lett.*, 191: 339.
- Wen Zhiying. 2000. *Mathematical Foundations of Fractal Geometry* [M]. Shanghai: Shanghai Scientific and Technological Education Publishing House (in Chinese).
- Wu Y G. 1997. Formation and growth of fractal patterns in high energy P-implanted silicon and N+ Zn-implanted SiO₂/GaAsP during thermal annealing [J]. *China Science (Series C)*, 40(4): 647~650.
- Yang Zhanru. 1996. *Fractal Physics* [M]. Shanghai: Shanghai Scientific and Technological Education Publishing House (in Chinese).
- Zhang Kecong and Zhang Lehui. 1997. *The Science and Technic of Crystal Growth* [M]. Beijing: Science and Technic Publishing House (in Chinese).
- Zheng B. 1998. Monte carlo simulations of short-time critical dynamics [J]. *Int. J. Mod. Phys. B*, 12(14): 1419~1484.

附中文参考文献

- 葛副鼎, 朱静. 1998. NaCl 溶液结晶时形成的枝叉状形态 [J]. *电子显微学报*, 17(6): 744~747.
- 黄晖, 许京军, 孔勇发, 等. 2004. 铌酸锂晶体中的分形几何观察 [J]. *人工晶体学报*, 33(4): 647~650.
- 彭志忠. 1985. 准晶体的构筑原理及微粒分维结构模型 [J]. *地球科学*, 10(4): 159~174.
- 文志英. 2000. *分形几何的数学基础* [M]. 上海: 上海科技教育出版社.
- 杨展如. 1996. *分形物理学* [M]. 上海: 上海科技教育出版社.
- 张克从, 张乐惠. 1997. *晶体生长科学与技术* [M]. 北京: 科技出版社.