

菊花石生长几何模型^{*}

赵珊茸 谭 劲 王文魁

(中国地质大学, 武汉 430074)

主题词 菊花石 生长模型 放射状形貌

提 要 通过与 DLA 模型类比, 建立起一个菊花石生长几何模型, 分析了菊花石生长过程中的“间距分叉”现象及花瓣间距 H 的演变规律及速率, 并对比分析了菊花石实际形貌与生长模型形态的异同和原因。

菊花石泛指一切放射状的、形似菊花的矿物集合体, 其中最常见的是泥岩中放射状的红柱石菊花石。但本文所指的菊花石, 是广泛分布于华南栖霞组中的放射状、形似菊花的天青石(或被碳酸盐化成方解石)集合体(见图 1), 作者已对其形貌特点和生长机理做过详细测量和初步分析^[1]。对于这种放射状形貌, 在凝聚态物理和晶体生长领域里已建立起许多生长模型(如 DLA 模型), 并用这些模型分析凝聚和生长过程中的一些理论问题。但是, 有关

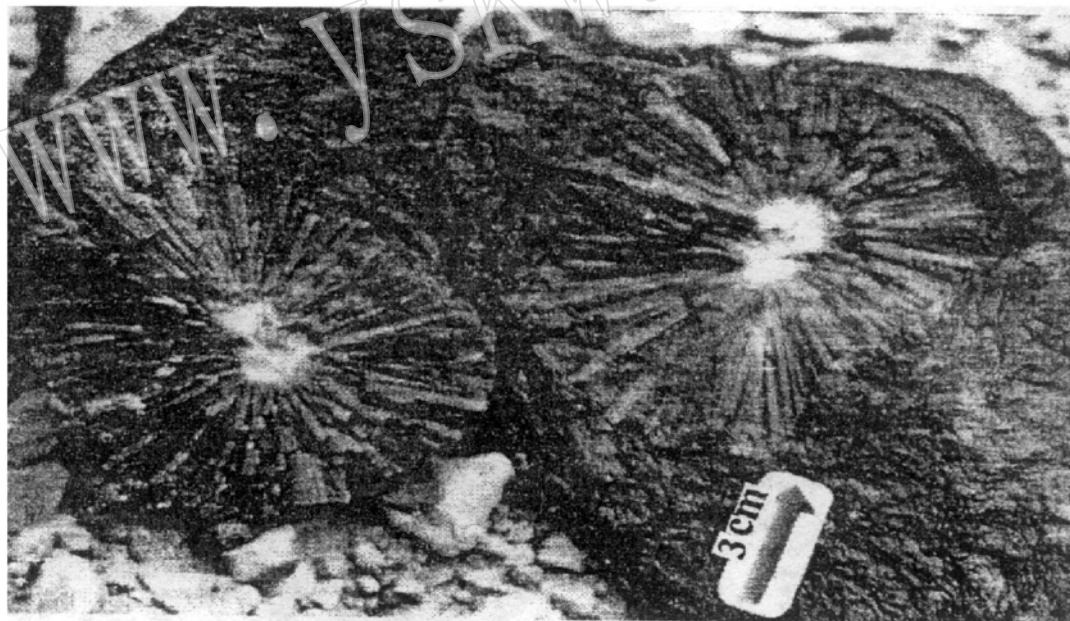


图 1 菊花石(产于湖南浏阳)

Fig. 1 Chrysanthemum stone (from Liuyang, Hunan)

* 国家自然科学基金资助项目(49602030)

第一作者简介 赵珊茸, 女, 1962 年 12 月生, 硕士, 讲师, 从事矿物晶体形貌与生长的教学和科研工作。

收稿日期 1998-06-22, 改回日期 1998-08-31

这些问题目前还没有完善的结论,对实际晶体生长过程也不能给出完备的理论模型^[2]。那么,自然界的沉积环境里形成的放射状菊花石反映出什么样的生长过程?能否为菊花石特殊生长过程建立一个理想化的生长模型?菊花石生长模型与DLA模型有什么异同?本文将对这些问题进行讨论。

1 DLA 生长模型简介

在自然界及实验室中,生长现象到处可见。生长模型就是用来模拟生长过程的特征的模型。由于生长过程非常复杂,任何生长模型都不能全面地概括所有实际生长过程的因素,只能抓住某些可能是最本质的东西^[3]。

在众多的枝状、放射状形态生长模型中,最具有典型意义和引人注目的是受限扩散聚集(Diffusion-Limited Aggregation,简称DLA)模型。该模型由美国密执安大学的T. A. Witten和L. M. Sander于1981年共同提出^[4],模型一问世,就引起了人们的高度重视,原因主要有二:一是它的概念很简单,且易于在计算机上实现,二是它可用于解释自然界一大类分形的形成过程,用计算机按此模型进行模拟的结果与实验数据相吻合。

按照这种模型,取一个二维方形点阵,在点阵中央放置一个静止的微粒作种子微粒。在距种子微粒较远处随机地产生一个微粒,令此微粒在各格点上随机地沿上、下、左、右等方向行走,如果该微粒与种子微粒相碰,则令该微粒附着(凝聚)于种子微粒之上,与之结合形成凝聚集团;如果该微粒行走到二维方形点阵的边界,则令该微粒消失。接着再随机地产生第二个微粒,并重复以上步骤,如此不断进行,于是以种子微粒为中心就会形成不断增长的凝聚集团。用计算机按此模型求得的凝聚集团呈放射枝状(图2)。

产生这种枝状图形的部分原因在于粒子的随机运动轨迹非常曲折,因此,集团外部伸出的分枝获取微粒的概率较大,妨碍了微粒向内部侵入(屏蔽效应),结果,集团就按照向外伸展分枝的构造方式不断生长下去^[4,5]。

这一生长模型虽然简单,但它是远离平衡态的,用数学理论处理还有困难,但却可以进行实验再现,如在硫酸铜溶液中,铜在导线上沉积所形成的图案;将低粘滞性流体以压强压入具高粘滞性流体内部所形成的分枝指状图案等等^[3,5]。

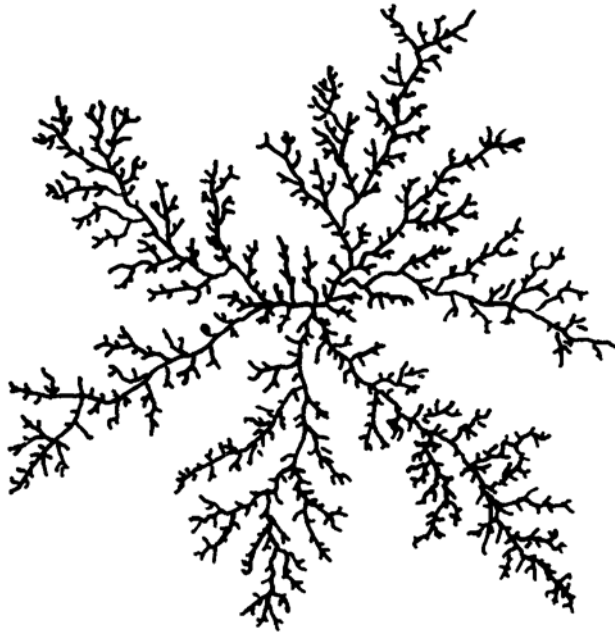


图2 DLA模型图(引自参考文献[4])

Fig. 2 DLA model (from reference[4])

2 理想的菊花石生长几何模型

生长模型的精确定义应由生长法则来规定, 而生长法则是根据具体生长情况, 考虑最本质的影响因素而设计的。为了将生长模型便于在计算机上进行模拟, 大多数生长模型都是几何生长模型, 这意味着将不考虑能量(温度)因素的物理机制, 主要依赖于集团的几何特征^[3]。

菊花石是 SrSO_4 溶液在沉积淤泥中渗滤、迁移、富集而结晶形成, 因此, 淤泥对结晶质 SrSO_4 的扩散作用的阻碍、对天青石晶面生长的阻碍将是菊花石生长过程中最主要的影响因素, 也是菊花石生长模型与 DLA 模型最本质的区别。鉴于此, 作者所设计的菊花石的生长过程(法则)如下:

据文献(I. M. West, 1973)报道, 天青石结晶要求较低的 pH 值和较高的 Eh 值^[6], 当淤泥中某一生物体死亡、分解时, 会放出 NH_3 、 H_2S 等而改变周围环境的 pH 值、Eh 值, 如果正是适合天青石结晶的 pH 值、Eh 值时, 这一生物就会成为菊花石生长的中心^[1]。这一生长中心就相当于 DLA 模型中的种子微粒, 淤泥中的 SrSO_4 结晶质会向生长中心运移、集中而结晶, 这一过程就相当于 DLA 模型中释放粒子而附着于种子微粒或凝聚集团。

但是, 由于受晶体内部格子构造的制约, 天青石只形成许多柱状晶体呈放射状向外生长, 而不会象 DLA 模型中那样形成分枝, 因为晶体要形成分枝状的枝晶, 要求非常大的过冷度或过饱和度和非常快的结晶速率, 这样才会使生长界面失稳而形成分枝, 而在沉积淤泥中, 菊花石的生长速度不可能那么大。

虽然菊花石生长不形成象 DLA 模型中那样的分枝, 但是, 淤泥“阻碍”作用的存在会使柱状晶体与柱状晶体之间形成“间距分叉”现象。这是因为当晶体呈放射状向外生长时, 两柱状晶体的间距会越来越大, 由于淤泥对结晶质扩散作用的阻碍, 两晶体间的结晶质运移到晶体柱面上生长会越来越困难; 又由于淤泥对柱状晶面生长的阻碍(即柱状晶面沿法线方向生长前移会受到前面所堆积的淤泥的阻碍), 柱状晶体也不易沿横向长得太粗, 这时, 两柱状晶体间的结晶质会重新聚集形成另一柱状晶体, 这一现象称“间距分叉”。因此, 与 DLA 模型中的放射分枝状使枝体不断增加相类似, 菊花石以“间距分叉”方式也不断使柱状体数目增加。

根据上述的生长法则, 可以设计出一个理想的菊花石生长几何模型。为了使问题简化和便于表达, 所设计的模型为二维模型, 相当于实际菊花石生长过程的一个横截面。

设原始晶核(可为动物碎屑等杂质)半径为 r , 围绕该核首先长出 x 根晶体, 则晶体之间的间距为 $H = 2\pi r/x$ 。H 决定于两个因素: (1) 结晶质浓度, 浓度越大, 成核率越高, H 就越小; (2) 淤泥阻碍作用的强度, 阻碍作用越强, 晶体越不易长大, 在相同的结晶质浓度下成核率就会越高, H 就越小。随着放射状地往外生长, 花瓣晶体间距会渐渐变大, 假定当花瓣间距增大到 $2H$ 时, 淤泥阻碍作用会使花瓣晶体之间重新聚集形成另一花瓣晶体, 以此类推, 即随着生长半径成倍地增加, 晶体数目也会成倍地增加。如果不考虑每个单晶柱体的宽度, 将其简化为线状体, 则这一生长模型的几何图形如图 3 所示。

这一几何图案的特点是: 虚线所画的每环晶体长度按 2^N ($N = 0, 1, 2, \dots$) 倍增加, 每环晶体数目也按 2^N 倍增加, 第 N 环晶体长度等于 $(N-1)$ 环以内的所有环晶体长度之和。

3 理想生长几何模型与菊花石实际形貌对比

上述几何模型与实际菊花石形态有一个最大的差别,就是实际菊花石中大部分都有花核—花瓣的明显界线,花核内是不规则粒状构造,花瓣是放射状构造,而几何模型中无花核—花瓣界线,都为均匀的放射状构造,其原因是:几何模型中假定在发生“间距分叉”时的晶体间距 H 是保持不变的,在实际生长过程中, H 是从小变大的。因为在整个菊花石生长过程中,结晶质不断向中心聚集,淤泥则不断被外推,因此从中心向外,结晶质浓度会越来越低,这就使“间距分叉”越来越困难,即 H 会越来越大。

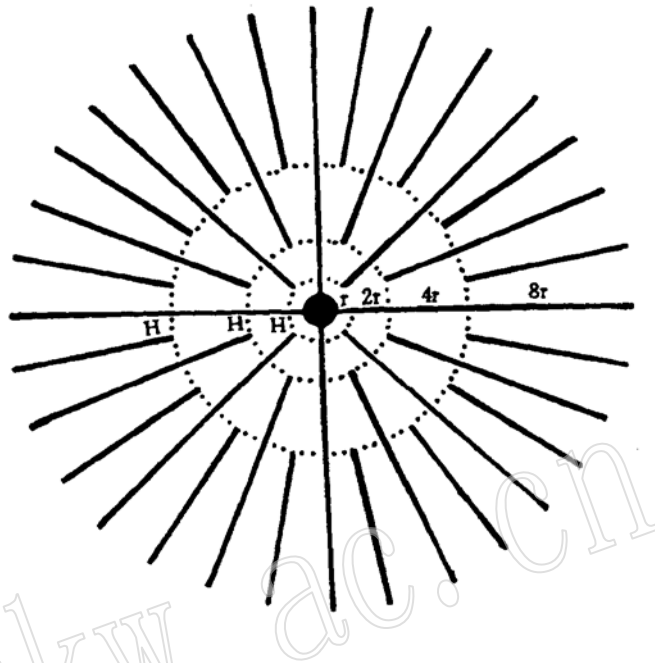


图3 理想的生长几何模型

Fig. 3 The ideal geometric growth model

设 H 有一个临界值 H_0 , H_0 是在某种条件下能阻碍天青石柱面生长的淤泥的最小厚度,当 $H < H_0$ 时,两花瓣柱体间的结晶质是可以互相传输的,这时就可能一个花瓣长大而另一个花瓣溶解消失。也就是说,当 $H < H_0$ 时,两花瓣之间未达到平衡态,这种不平衡就导致不可能形成规则的放射状构造,而只能是不规则粒状集合体,即形成花核。当 $H \geq H_0$ 时,两花瓣柱体就能平衡地、稳定地各自沿柱体向外生长,形成各自独立的花瓣。这就是造成花核—花瓣明显界线的原因。

由实际菊花石形貌测量得知^[1]:在花核—花瓣界线处,花瓣间距基本保持为 $0.5\text{mm} \pm$ 不变,与产地无关,说明 H_0 不随环境变化而变化。但是,菊花石的形态特征值 σ (花瓣长度/花核直径) 是随产地变化的,而 σ 是与 H 的演变速度有关的,即当 H 由小变大至 H_0 时,形成花核—花瓣界线,演变速度越快,到达花核—花瓣界线就越早,花核就越小,即 σ 就越大。不同产地的 σ 值不同,说明 H 的演变速度在不同环境中是不同的。

此外,在实际菊花石生长过程中,一定还经历了几何淘汰律的演化,因为生长到花瓣时,结晶方位已完全相同,所有花瓣都发育同一单形,即斜方柱 $\{011\}$,但此斜方柱从花核处到花边有由细变粗的现象,这可能是因为,在进入花瓣生长阶段后,结晶质浓度已较低,已不可能再发生“间距分叉”现象,但随着放射状向外生长,两花瓣柱体间距变大,导致淤泥对柱体长宽的阻碍作用变小,最后形成花瓣柱体由细变粗的现象^[1]。

另外需指出的是:生长模型的“间距分叉”过程和现象非常规则,实际菊花石生长过程中不可能具有这么规则的过程和现象,但是,它必定经过这种演变,同时伴随有几何淘汰律的演化,最终才可能形成大小均匀、间距均匀、结晶方向相同的花瓣^[1],否则,从

不规则粒状集合体花核表面上长出这样规则的花瓣是不可思议的。

4 修正的生长几何模型 (与 H 的不同演变速度 β 相关)

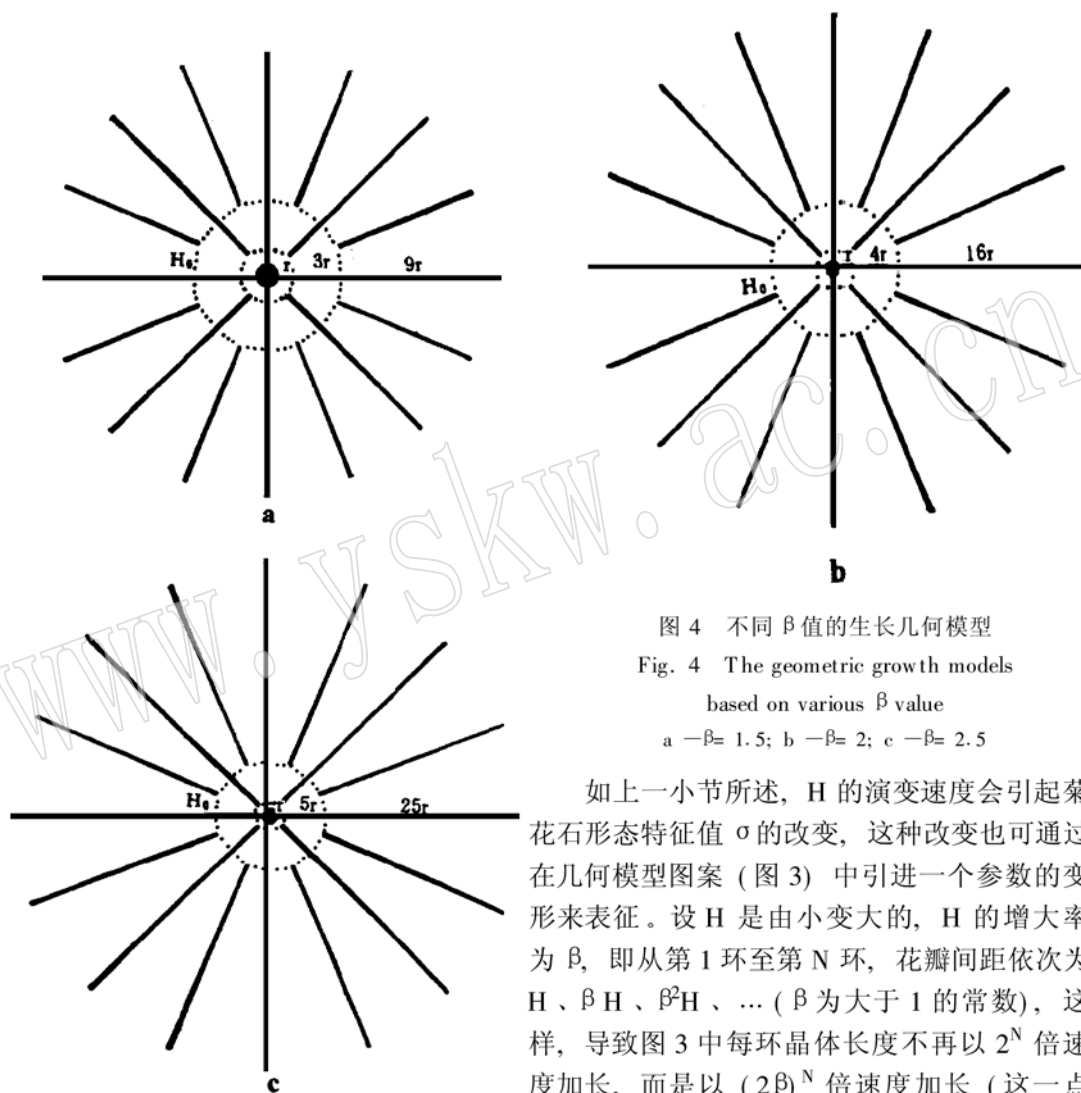


图4 不同 β 值的生长几何模型

Fig. 4 The geometric growth models based on various β value

a $-\beta=1.5$; b $-\beta=2$; c $-\beta=2.5$

如上一小节所述, H 的演变速度会引起菊花石形态特征值 σ 的改变, 这种改变也可通过在几何模型图案 (图 3) 中引进一个参数的变形来表征。设 H 是由小变大的, H 的增大率为 β , 即从第 1 环至第 N 环, 花瓣间距依次为 $H, \beta H, \beta^2 H, \dots$ (β 为大于 1 的常数), 这样, 导致图 3 中每环晶体长度不再以 2^N 倍速度加长, 而是以 $(2\beta)^N$ 倍速度加长 (这一点可以通过半径与弧长成正比的几何关系得以证明), β 的不同数值会导致图 3 的几何模型的不同变形。图 3 是 $\beta=1$ 时的特例。 $\beta=1.5, 2, 2.5$ 的几何模型见图 4。

将最外环视为花瓣, 以内各环视为花核, 即最外环花瓣起始间距为 H_0 , 则在模型中也可求出花瓣长度/花核直径 (σ 值) 为:

将最外环视为花瓣, 以内各环视为花核, 即最外环花瓣起始间距为 H_0 , 则在模型中也可求出花瓣长度/花核直径 (σ 值) 为:

$$\sigma = \frac{(2\beta)^N r}{2 \times [r + (2\beta)^0 r + (2\beta)^1 r + (2\beta)^2 r + \dots + (2\beta)^{N-1} r]}$$

$$= \frac{(2\beta)^N}{2 \times [1 + (2\beta)^0 + (2\beta)^1 + (2\beta)^2 + \dots + (2\beta)^{N-1}]} \quad \dots(1)$$

其中, r 为晶核半径, $(2\beta)^0 r$ 、 $(2\beta)^1 r$ 、 $(2\beta)^2 r$...分别为第1环、第2环、第3环...晶体长度。

当 N 足够大时 (只需大于 5), 上式可简化为:

$$\sigma \approx \beta - 0.5 \quad \dots(2)$$

其中, β 为大于 1 的常数。当 $\beta = 1$ 时, 式 (1) 的值为 $\sigma = 0.5$, 所以式 (2) 应为 $\sigma = \beta - 0.5$ (不管 N 为何值), 但 $\beta = 1$ 时代表 H 保持不变, 无 $H > H_0$ 或 $H < H_0$ 的变化, 即无花核—花瓣界线, 不必用此式求 σ 值。

由此可见, 生长模型中 H 由小变大的临界值 H_0 是形成花核—花瓣界线的关键, 而 H 由小变大的速度 β 决定了形貌中花瓣长度/花核直径比值 σ , 即菊花石实际形貌特征是可以生长模型来解释的。

5 结 论

(1) 菊花石生长模型与 DLA 模型有相似性, 但由于菊花石生长过程中受淤泥阻碍作用及晶体格子构造影响, 不易形成象 DLA 模型中的分枝状, 而出现“间距分叉”现象, 导致菊花石生长模型与 DLA 模型具有本质区别。

(2) 实际菊花石形貌特征可以通过生长模型得以解释, 即: 花瓣间距基本不变是与 H_0 有关, 形貌中花瓣长度/花核直径比值 σ 与 β 有关, 而 H_0 、 β 都是生长模型中引进的重要参数。此外, 实际菊花石的生长过程还经历了几何淘汰律的演化。

最后, 对这一生长几何模型进一步的理论探讨, 如它的分形特点、分维及其在晶体生长行为上的意义、与 DLA 模型的分形特点上的相似性等, 作者将另文讨论。

参 考 文 献

- 1 赵珊茸, 谭 劲, 王文魁. 菊花石形貌测量与生长机制探讨. 矿物岩石, 1998.
- 2 张克从, 张乐惠主编. 晶体生长科学与技术 (上册) (第二版). 北京: 科学出版社, 1997.
- 3 杨展如编著. 分形物理. 上海: 上海科技教育出版社, 1996.
- 4 李后强, 程光铨编. 分形与分维. 成都: 四川教育出版社, 1990.
- 5 Falconer K J. 分形几何——数学基础及其应用. 曾文曲, 刘世耀译. 沈阳: 东北工学院出版社, 1991 年.
- 6 方邨森, 方金满, 袁旭音. 湖南浏阳永和碳酸盐岩中的天青石. 沉积学报, 1988, 6 (3): 11~ 17.

The Geometric Growth Model of the Chrysanthemum Stone

Zhao Shanrong Tan Jin Wang Wenkui
(China University of Geosciences, Wuhan 430074)

Key words: chrysanthemum stone; growth model; radial morphology

Abstract

The growth model of the chrysanthemum stone occurring in Qixia Formation of South China has been studied in this paper. The chrysanthemum stone is composed of celestite, and formed by a core and many petals. The core consists of grain aggregate and the petals are of radial arrangement. Through a comparison with the Diffusion-Limited Aggregation (DLA) model, the authors have established a growth model of the chrysanthemum stone. Due to the resistance of the mud media to the crystal growth and the control role of the crystal structure, there is no branching in the growth model of the chrysanthemum stone, which is different from things of the DLA model. Nevertheless, there exists “branch-between” in the growth model which forms more and more crystal columns, like the branching in the DLA model. As the crystalline substance (SrSO_4) moves toward and condenses at the center, and the mud media are pushed outward, the concentration of SrSO_4 gradually decreases from the center outwards. Hence, the formation of the “branch-between” phenomenon becomes more difficult, and the H (the interval of the crystal columns at the moment of “branch-between”) becomes increasingly larger from the center outwards. There is a critical value H_0 during the change of H . When $H < H_0$, the core is formed; when $H > H_0$, the petals are formed. H_0 is the key to form the boundary of the core and the petal. The change rate of H , defined as β , determines the morphological parameter σ (length of petal/diameter of core). Based on the model, one can obtain the relationship $\sigma \approx \beta - 0.5$. In the real morphology of the chrysanthemum stone, $H_0 \approx 0.5\text{mm}$, which is independent of the occurrence place. However, σ is related to the occurrence place. This indicates that the change rate of H (β) depends on the occurrence place. In addition to the “branch-between” and the evolution of H , there must exist “geometric super-seding” in the growth of the chrysanthemum stone, because all the petals have the same crystal form: $\{011\}$.