

2+1 维刻蚀模型生长表面等高线的共形不变性研究*

寻之朋[†] 唐刚[‡] 夏辉 郝大鹏 宋丽建 杨毅

(中国矿业大学理学院物理系, 徐州 221116)

(2014 年 3 月 11 日收到; 2014 年 4 月 7 日收到修改稿)

为了更全面、有效地研究刻蚀模型 (etching model) 涨落表面的统计性质, 基于 Schramm Loewner Evolution (SLE $_{\kappa}$) 理论, 对 2 + 1 维刻蚀模型饱和表面的等高线进行了数值模拟分析. 研究表明, 2 + 1 维刻蚀模型饱和表面的等高线是共形不变曲线, 可用 Schramm Loewner Evolution 理论进行描述, 且扩散系数 $\kappa = 2.70 \pm 0.04$, 属 $\kappa = 8/3$ 普适类. 相应的等高线分形维数为 $d_f = 1.34 \pm 0.01$.

关键词: 刻蚀模型, Schramm Loewner Evolution 理论, 共形不变性

PACS: 05.40.-a, 68.35.Ct

DOI: 10.7498/aps.63.150502

1 引言

远离平衡条件下的表面界面粗化生长现象涉及到科学技术发展的许多领域. 因此, 在过去的二三十年, 凝聚态与统计物理学领域的物理工作者从实验和理论 (包括解析和数值) 方面对该现象进行了广泛的研究, 并且目前已经取得了许多有价值的成果^[1-8]. 研究表明, 粗化生长表面呈现出动力学标度行为, 这种标度行为满足标准的 Family-Vicsek (F-V) 动力学标度规律^[5]. 该标度规律通过一系列具有物理意义的标度指数, 包括生长指数 β 、粗糙度指数 α 和动力学指数 $z = \alpha/\beta$, 对生长表面的动力学行为及所属的普适类进行细致的描述.

动力学标度理论的核心是标度变换不变性, 是描述表面界面粗化生长的基本理论. 除此之外, 粗糙表面等高线的共形不变性也是表征其标度性的有效方法, 其分形特性、共形不变性与粗糙表面的标度不变性密切相关. 粗糙表面生长作为

一种复杂的随机性、非线性现象, 它的等高线的共形不变性可用随机性的 Schramm-Loewner evolution (SLE $_{\kappa}$)^[9-12] 来描述.

SLE 理论于 2000 年首次完整提出, 是专门用来刻画简单曲线 (单联通) 共形不变性的有力工具. 把具有共形不变性的二维随机曲线 $\gamma_t(z)$ 通过共形变换

$$g_t(\gamma_t(z)) = \xi_t, \quad (1)$$

映射为一维的随机布朗运动, 表征布朗运动位移的驱动函数 ξ_t 的统计方差是扩散时间的线性函数, 即共形变换函数 $g_t(z)$ 和驱动函数 ξ_t 满足

$$\frac{dg_t(z)}{dt} = \frac{2}{g_t(z) - \xi_t}, \quad (2)$$

$$\langle \xi_t \rangle = 0, \quad \langle \xi_t^2 \rangle = \kappa t, \quad (3)$$

κ 是比例系数 (也称扩散系数), 表征了随机曲线的动力学特征, 是曲线随机性的度量. 这个理论对自然界表面生长过程的普适类、随机性和分形特性给出了完整的描述, 并给出了曲线分形维数和扩散系

* 中央高校基本科研业务费专项资金 (批准号: 2012QNA42) 和国家自然科学基金 (批准号: 11247249, 11304377, 11304378) 资助的课题.

[†] 通讯作者. E-mail: zpxun@cumt.edu.cn

[‡] 通讯作者. E-mail: gangtang@cumt.edu.cn

数的联系

$$d_f = 1 + \kappa/8, \quad (4)$$

从而把物理过程的随机性和曲线的分形维数有效的联系起来, 并通过单一的扩散系数 κ 的值对自然界的随机过程重新进行普适类的划分^[10]

$\kappa = 2$: Loop-Erased Random 模型;

$\kappa = 8/3$: Self-Avoiding Walks 模型, Kardar-Parisi-Zhang 方程生长表面等高线;

$\kappa = 3$: Ising 模型中的集团边界;

$\kappa = 4$: 粗化相变的 Body-centered Restricted Solid-on-solid 模型, 高斯型自由场中的水平截线, XY 模型中的 K-T 相变;

$\kappa = 6$: Percolation 模型的集团边界;

$\kappa = 8$: Uniform Spanning Trees 模型的边界.

基于共形不变性的 SLE 理论近年来成为人们研究的热点. 2006 年 Bernard 研究了 2 维 Navier-Stokes 湍流系统中涡线的共形不变性^[13], 又研究了准地转湍流系统中等温线的共形不变性^[14]. 随后人们又研究了自旋玻璃的磁畴壁^[15,16], 随机波函数的节线^[17,18] 和 WO_3 表面的等高线^[19] 的共形不变性. 最近, 这种理论方法被成功地运用到了表面界面生长领域. Saberi 等^[20] 指出, 2+1 维饱和 Kardar-Parisi-Zhang (KPZ) 表面的等高线是共形不变曲线, 并且属于 $\text{SLE}_{8/3}$ 普适类. 该结论后来被 Schramm 和 Sheffield^[21] 的工作所证实, 他们研究了二维离散高斯自由场的等高线并发现该等高线是统计上的共形不变曲线. 唐刚课题组对受限固-固 (restricted solid-on-solid, RSOS) 模型^[22] 和 Wolf-Villain 模型^[23] 饱和表面的等高线进行了数值模拟研究, 并且发现这两个生长模型饱和表面的等高线也具有共形不变性^[24,25]. 最近, Saberi 及其合作者又对 2+1 维 KPZ 方程生长表面进行了 SLE 理论分析, 并且预测了其生长表面等高线的扩散系数和分形维数分别为 $\kappa = 8/3$, $d_f = 4/3$ ^[26]. 以上取得的研究成果表明 SLE 理论已成为研究粗糙表面标度性质的一个十分有效的方法.

刻蚀模型^[27] 是描述表面界面粗化生长过程的重要理论模型之一, 该模型可用来描述晶体的溶解或者解吸附过程, 其动力学行为得到了研究人员广泛的关注并已经取得了一些显著的成果^[27-30]. 但这些工作都集中于通过表面宽度或者高度差关联函数来计算其动力学标度指数. 由于该模型的

重要性, 很有必要对该模型生长表面的形貌具有更全面的了解. 因此, 为了更加深入全面的研究刻蚀模型生长表面的形貌及动力学行为, 本文基于新颖的 SLE 理论对 2+1 维刻蚀模型饱和表面的等高线进行数值分析. 计算结果显示, 2+1 维刻蚀模型饱和表面的等高线是共形不变曲线, 其扩散系数为 $\kappa = 2.70 \pm 0.04$, 属 $\kappa = 8/3$ 所描述的普适类. 相应的分形维数为 $d_f = 1.34 \pm 0.01$.

2 模拟结果分析与讨论

由 Mello 等提出的刻蚀模型^[27] 被用来描述生长表面的腐蚀过程或解吸附过程, 但其规则是通过与之相反的生长过程来定义的, 如图 1 所示. 该模型 1+1 维下的生长规则可用如下的式子来描述:

- 1) 在 t 时刻, 随机的选择表面上一个格点 $i = 1, 2, \dots, L$;
- 2) $h_i(t+1) = h_i(t) + 1$;
- 3) 如果 $h_{i-1}(t) < h_i(t)$, 则 $h_{i-1}(t+1) = h_i(t)$;
- 4) 如果 $h_{i+1}(t) < h_i(t)$, 则 $h_{i+1}(t+1) = h_i(t)$.

该生长规则可直接推广到 2+1 维. 在数值模拟过程中, 我们共产生了 300 个 2+1 维刻蚀表面, 基底尺寸为 $L \times L = 1024 \times 1024$. 每个表面生长的时间足够长, 使得生长过程都能够达到饱和. 表面的平均生长高度设置为 0, 大于平均值的高度为正, 小于平均值的高度为负. 这种操作对计算结果并不会产生影响. 然后分别提取了生长表面上包含大于 2048 个格点的等高线 2000 多条, 以及包含大于 4096 个格点的等高线近 1000 条.

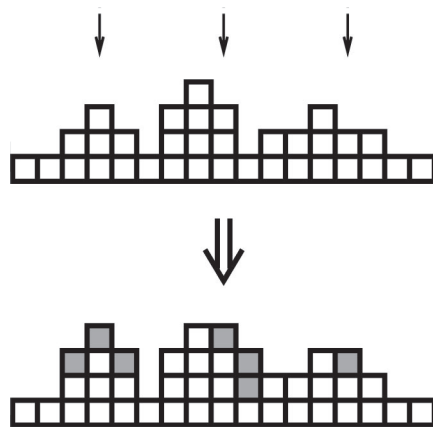


图 1 1+1 维刻蚀模型生长规则

首先利用数盒子方法计算了等高线的分形维

数. 两条对应格点大小不同的等高线计算得到的相应的平均分形维数均为 $d_f = 1.34 \pm 0.01$, 如图 2(a) 和 (b) 所示. 我们同样采用尺码法计算了该分形维数, 所得到的结果与数盒子方法在误差范围之内是相等的.

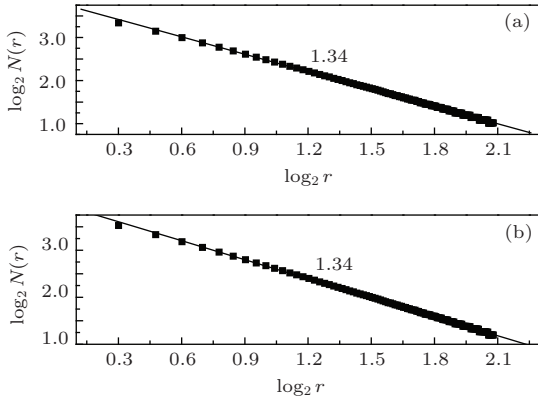


图 2 利用数盒子方法计算得到的等高线的分形维数 (a) 是包含大于 2048 个格点的等高线的盒子数 $N(r)$ 与盒子尺寸 r 的双对数曲线; (b) 是包含大于 4096 个格点的等高线的盒子数 $N(r)$ 与盒子尺寸 r 的双对数曲线

为了分析饱和和刻蚀表面的等高线是否为共形不变曲线, 我们首先利用共形变换函数将二维的曲线映射为一维的随机布朗运动曲线. 为了更加明显的揭示等高线的标度行为, 本文采用文献 [20] 中所提到的方法对粗糙表面的等高线集合进行了识别. 具体方法为, 对从粗糙表面提取的等高线集合的每一条, 任给一条水平直线与等高线 γ_i 相交, 截取该直线上方的部分作为新的等高线, 它与该水平线的交点作为新等高线的端点. 由于等高线有开线和闭线两种, 对于开线, 其交点就是起点; 对于闭线, 交点分别为新等高线的起点和终点. 这样就得到了经过识别的新的等高线的集合. 为了使得到的结果不依赖于等高线的长度, 需要对等高线进行重新标度. 对等高线点的坐标除以因子 N^{1/d_f} 实现归一化

$$z''_n = \frac{z'_n}{N^{1/d_f}}, \quad (5)$$

上式 d_f 为对应的等高线的分形维数. 为了进行共形变换, 还需要对所得到的等高线进行上半平面化. 借助于共形映射函数 $\phi(z)$,

$$\phi(z'') = \frac{z''_N z''}{z''_N - z''}. \quad (6)$$

可以把起点和终点在水平轴上的等高线变换到水平轴的上方从而实现等高线的上半平面化.

在数值算法中, 采用连续-离散共形裂缝映射 (successive discrete, conformal slit maps) 方法对

Loewner 方程进行求解. 这个算法实际上是对驱动函数做一个恒定的分段近似, 即在每一个时间步长内通过共形变换吞并这个曲线的一段. 设置起点 z_0 为 $(0, 0)$, 这样就得到满足 Loewner 方程的离散共形映射函数

$$g_t(z) = \sqrt{(z - \xi_t)^2 + 4t} + \xi_t, \quad (7)$$

上式中驱动函数

$$\xi_t = \text{Re}(z), \quad (8)$$

及共形映射时间

$$t = (\text{Im}z)^2/4. \quad (9)$$

然后利用连续-离散共形裂缝映射, 即 (7) 式, 对前面重标度和上半平面化的等高线逐条进行共形变换. 为此, 把集合中的等高线 $\gamma(z''_i)$ 中的点 z''_i 再标度为 $z_i^0, i = 1, 2, \dots, N$. 上标 0 表示共形变换前的初始等高线. 第一次共形变换的第一段裂缝映射把第 i 个点 z_i^0 映射到原点 z_0^0 , 把第 j 个点 $z_j^0 (j > 1)$ 映射到新的点 z_j^1 . 总之, 第 i 个映射把点 z_i^{i-1} 映射到原点 z_0^{i-1} , 即

$$\begin{aligned} t_i &= t_{i-1} + (\text{Im}z_i^{i-1})^2/4, \\ \xi(t_i) &= \text{Re}z_i^{i-1}, \\ z_j^i &= \sqrt{(z_j^{i-1} - \text{Re}z_i^{i-1})^2 + (\text{Im}z_i^{i-1})^2} + \text{Re}z_i^{i-1}, \\ &(j > i). \end{aligned} \quad (10)$$

上式中, 初始值 $\xi(0) = 0$, 根号的取值与 $[\text{Re}z_j^{i-1} - \text{Re}z_i^{i-1}]$ 的符号相同. i 一直变化, 直到等高线的所有点都被映射到新的点, 这样就完成整条等高线的共形变换, 得到了相应的驱动函数. 然后对集合中的等高线依次变换, 最后得到共形变换后的等高线的驱动函数的集合.

图 3 和图 4 分别给出了包含格点数大于 2048 和 4096 的等高线驱动函数的统计性质. 从图中可以看出, 驱动函数的统计方差与共形映射时间显示了非常良好的线性关系, 通过线性拟合可以得到相应的扩散系数 $\kappa = 2.70 \pm 0.04$. 从 (b) 图中还可以看出, 驱动函数的统计平均值非常接近于 0, 这是一维布朗运动的典型特征. 此外, 为了保险起见, 我们还计算了下半平面内的等高线, 所得结果和上半平面的结果符合的很好. 其原因在于等高线具有自相似性.

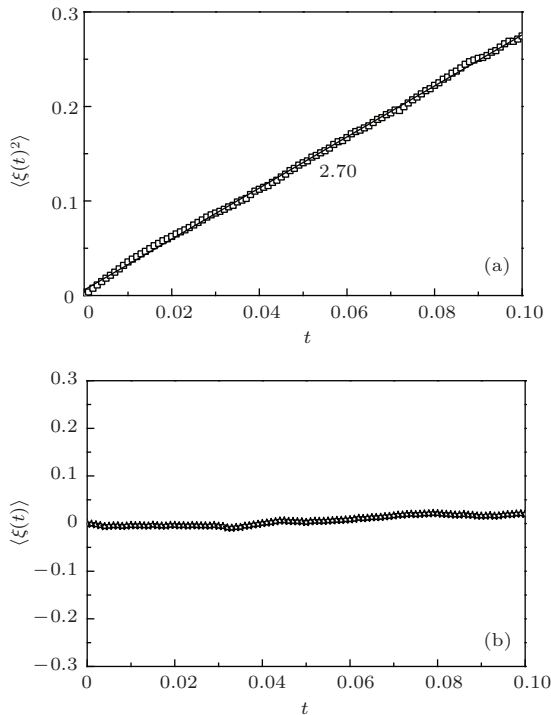


图3 2+1 维刻蚀模型饱和表面等高线(含格点数大于2048)驱动函数 $\xi(t)$ 的统计分布 (a) 驱动函数的方差; (b) 驱动函数的平均值

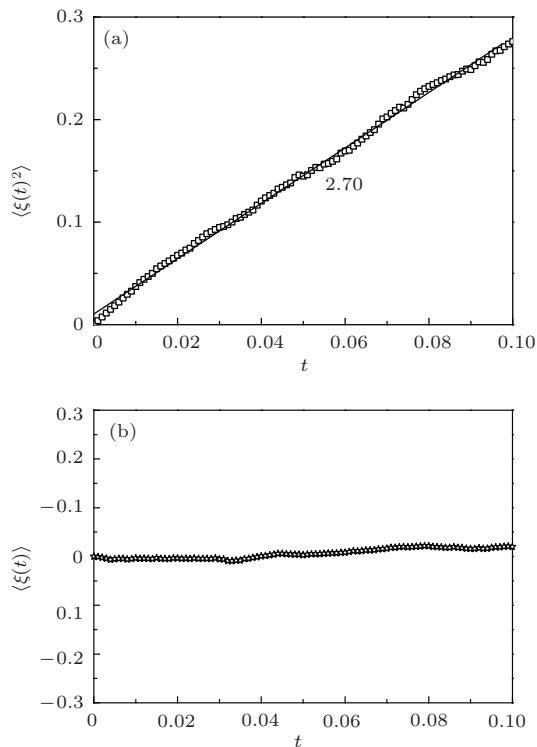


图4 2+1 维刻蚀模型饱和表面等高线(含格点数大于4096)驱动函数 $\xi(t)$ 的统计分布 (a) 驱动函数的方差; (b) 驱动函数的平均值

为了进一步确认此模型表面等高线的共形不变性, 还必须验证图中驱动函数的增长是否满足独

立增长这一规律. 因此接下来我们研究了其驱动函数的统计性质. 通过选取等高线驱动函数集合中每个驱动函数分别在共形映射时刻 $t = 0.02, 0.04, 0.06, 0.08, 0.10$ 的函数值进行了统计, 发现其概率密度统计呈现高斯型分布, 并且不同共形时刻的概率密度服从同一高斯型分布, 如图5和图6所示, 图中的实线为高斯型函数标示线. 最终可以判定 2 + 1 维刻蚀模型饱和表面的等高线实际上是共形不变曲线.

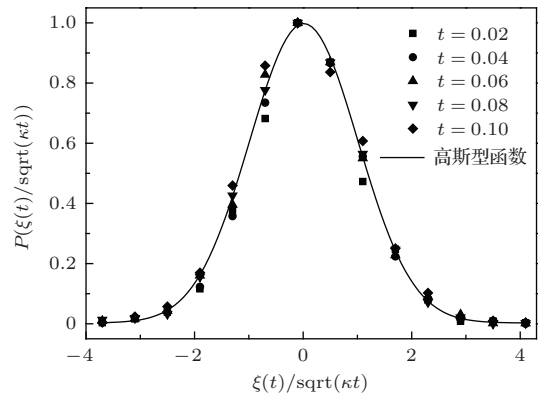


图5 不同共形时刻等高线(含格点数大于2048)驱动函数 $\xi(t)$ 的统计分布(图中分别对应归一化的时刻 $t = 0.02, 0.04, 0.06, 0.08, 0.10$, 实线为高斯型函数标示线)

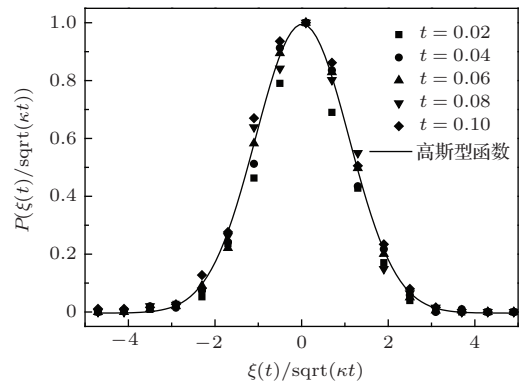


图6 不同共形时刻等高线(含格点数大于4096)驱动函数 $\xi(t)$ 的统计分布(图中分别对应归一化的时刻 $t = 0.02, 0.04, 0.06, 0.08, 0.10$, 实线为高斯型函数标示线)

从数值计算的结果可以看出, 2+1 维刻蚀模型饱和表面的等高线为共形不变曲线, 可由 SLE 理论进行很好的描述, 属 $\kappa = 8/3$ 普适类(本文的计算结果为 $\kappa = 2.70 \pm 0.04$). 计算还得到了相应的分形维数 $d_f = 1.34 \pm 0.01$. Keating 等^[17] 从理论上预言了分形维数和扩散系数之间满足关系式 $d_f = 1 + \kappa/8$, 本文的数值模拟结果与该理论预测是相符的. 从以往计算表面宽度或者高度差关联函数所得到的动

力学标度指数来看, 刻蚀模型属 KPZ 方程所描述的普适类. 但在计算表面宽度或者高度差关联函数时, 必须要模拟多个系统尺寸下的生长过程才能确定标度指数的值, 而在小的系统尺寸下模型通常会表现出有限尺寸效应, 从而导致对标度指数的计算有时会精确度不高. 根据 SLE 理论, 只需提取大的系统尺寸下的等高线集合, 进而分析等高线的性质, 这样会使得结果更加准确、有效. 本文基于 SLE 理论计算所得到的分形维数和扩散系数与 KPZ 方程的理论结果 ($d_f = 4/3$, $\kappa = 8/3$)^[26] 符合得很好. 从这个角度来讲, 本文在新的 SLE 理论的框架内更加有效地证实了刻蚀模型属 KPZ 普适类, 同时也从等高线的角度更进一步加深了对 2+1 维刻蚀模型生长表面形貌的认识. 此外, 在分析过程中, 本文选取了两种不同长度的等高线, 而所得到的分形维数和扩散系数是一致的. 这说明在本文所分析的格点大小范围内, 从等高线的角度对模型进行分析, 模型表现出很弱的有限尺寸效应. 这个发现或许对今后分析其他存在较大有限尺寸效应 (计算表面宽度时) 的模型有所帮助.

3 结 论

本文从 SLE 理论这个新的角度出发, 分析了 2+1 维刻蚀模型饱和表面等高线的分形性质和共形不变性. 计算得到了扩散系数和相应的分形维数分别为 $\kappa = 2.70 \pm 0.04$, $d_f = 1.34 \pm 0.01$. 结果显示, 2+1 维刻蚀模型饱和表面的等高线是共形不变曲线, 并且属 $\kappa = 8/3$ 所描述的普适类. 分形维数和扩散系数之间满足关系式 $d_f = 1 + \kappa/8$, 和理论预测结果相符. 此外, 本文还发现, 通过等高线对生长表面进行分析, 模型表现出很弱的有限尺寸效应.

本文所涉数值计算承蒙中国矿业大学现代分析与计算中心提供机时得以完成, 谨致谢忱.

参考文献

[1] Barabási A L, Stanley H E 1995 *Fractal Concepts in Surface Growth* (Cambridge: Cambridge University Press)

[2] Family F, Vicsek T 1991 *Dynamics of Fractal Surfaces* (Singapore: World Scientific Press)

[3] Meakin P 1998 *Fractals, Scaling and Growth Far from Equilibrium* (Cambridge: Cambridge University Press)

[4] Halpin-Healy T, Zhang Y C 1995 *Phys. Rep.* **254** 215

[5] Family F, Vicsek T 1985 *J. Phys. A: Math. Gen.* **18** L75

[6] Tang G, Hao D P, Xia H, Han K, Xun Z P 2010 *Chin. Phys. B* **19** 100508

[7] Zhang Y W, Tang G, Han K, Xun Z P, Xie Y Y, Li Y 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 020511 (in Chinese) [张永伟, 唐刚, 韩奎, 寻之朋, 谢裕颖, 李炎 2012 物理学报 **61** 020511]

[8] Xun Z P, Tang G, Xia H, Hao D P 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 010503 (in Chinese) [寻之朋, 唐刚, 夏辉, 郝大鹏 2013 物理学报 **62** 010503]

[9] Schramm O 2000 *Isr. J. Math.* **118** 221

[10] Cardy J 2005 *Ann. Phys.* **318** 81

[11] Bauer M, Bernard D 2006 *Phys. Rep.* **432** 115

[12] Gruzberg I A 2006 *J. Phys. A: Math. Gen.* **39** 12601

[13] Bernard D, Boffetta G, Celani A, Falkovich G 2006 *Nat. Phys.* **2** 124

[14] Bernard D, Boffetta G, Celani A, Falkovich G 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 024501

[15] Amoroso C, Hartmann A K, Hastings M B, Moore M A 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 267202

[16] Bernard D, LeDoussal P, Middleton A A 2007 *Phys. Rev. B* **76** 020403

[17] Keating J P, Marklof J, Williams G 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 034101

[18] Bogomolny E, Dubertrand R, Schmit C 2007 *J. Phys. A: Math. Theor.* **40** 381

[19] Saberi A A, Rajabpour M A, Rouhani S 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 044504

[20] Saberi A A, Niry M D, Fazeli S M, Rahimi Tabar M R, Rouhani S 2008 *Phys. Rev. E* **77** 051607

[21] Schramm O, Sheffield S 2009 *Acta Math.* **202** 21

[22] Kim J M, Kosterlitz J M 1989 *Phys. Rev. Lett.* **62** 2289

[23] Wolf D E, Villain J 1990 *Europhys. Lett.* **13** 389

[24] Zhou W, Tang G, Han K, Xia H, Hao D P, Xun Z P, Yang X Q, Chen Y L, Wen R J 2011 *Mod. Phys. Lett. B* **25** 255

[25] Chen Y L, Tang G, Han K, Xia H, Hao D P, Xun Z P, Wen R J 2011 *J. Stat. Phys.* **143** 501

[26] Saberi A A, Dashti-Naserabadi H, Rouhani S 2010 *Phys. Rev. E* **82** 020101

[27] Mello B A 2001 *Phys. Rev. E* **63** 041113

[28] Aarão Reis F D A 2004 *Phys. Rev. E* **69** 021610

[29] Tang G, Xun Z P, Wen R J, Han K, Xia H, Hao D P, Zhou W, Yang X Q, Chen Y L 2010 *Physica A* **389** 4552

[30] Xun Z P, Zhang Y W, Li Y, Xia H, Hao D P, Tang G 2012 *J. Stat. Mech: Theory and Experiment* p10014

Conformal invariance of isoheight lines of the (2+1)-dimensional etching surfaces*

Xun Zhi-Peng[†] Tang Gang[‡] Xia Hui Hao Da-Peng Song Li-Jian Yang Yi

(Department of Physics, China University of Mining and Technology, Xuzhou 221116, China)

(Received 11 March 2014; revised manuscript received 7 April 2014)

Abstract

In order to study the statistical properties of the surface fluctuations in the Etching model more comprehensively and effectively, based on the Schramm Loewner evolution (SLE_{κ}) theory, the contour lines of the saturated surface in the (2+1)-dimensional Etching model are investigated by means of numerical simulations. Results show that the isoheight lines of the (2+1)-dimensional Etching surfaces are conformally invariant and can be described in the frame work of the SLE_{κ} theory with diffusivity $\kappa = 2.70 \pm 0.04$, which belongs to the $\kappa = 8/3$ universality class. The corresponding fractal dimensions of the isoheight lines are $d_f = 1.34 \pm 0.01$.

Keywords: Etching model, Schramm Loewner evolution theory, conformal invariance

PACS: 05.40.-a, 68.35.Ct

DOI: [10.7498/aps.63.150502](https://doi.org/10.7498/aps.63.150502)

* Project supported by the Fundamental Research Funds for the Central Universities of China (Grant No. 2012QNA42), and the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11247249, 11304377, 11304378).

[†] Corresponding author. E-mail: zpxun@cumt.edu.cn

[‡] Corresponding author. E-mail: gangtang@cumt.edu.cn