

外场中 DLA 集团标度性质的解析研究*

余 江

(北京师范大学物理系)

胡 岗

(北京师范大学物理系;中国高等科学技术中心(世界实验室)理论物理中心)

1987 年 12 月 5 日收到.

我们利用“连续化近似”的平均场理论,详细研究了在不同外场作用下 DLA 集团的标度性质.发现对常值外场,集团密度 ρ 初始时按 $1/r$ 变化,然后过渡到一个常数值;而对 $1/r^\alpha$ 类型的外场.当控制参数 α 变化时,生长集团表现出非常复杂的、非平庸的标度行为.

一、引 言

近年来,微小颗粒的不可逆聚集过程引起了人们的极大关注^[1]. 这一方面是因为聚集生长机制反映了许多物理过程(如大气中尘埃的集聚、电沉淀,晶体的枝蔓生长以及液体流动等现象)的共同特性;另一方面还在于在理论上对这类不可逆生长过程的研究将有助于进一步了解复杂系统的统计行为.迄今为止,人们已经提出了许多几何模型来探讨这类非平衡、聚集生长过程^[1],其中讨论得最多的就是 Witten 和 Sander 提出的 DLA (diffusion-limited aggregation) 模型^[2]. 在这个模型中,粒子通过随机行走不可逆地粘附到生长集团上,使集团生长.大量的计算机模拟实验^[1-3]和一些粗糙的理论分析^[4-8]表明,DLA 集团具有明显的标度不变性.这意味着一种幂律 (power-law) 行为,即生长集团密度 ρ 随空间距离 r 的变化规律为 $\rho \propto r^{D-d}$,其中 D 称为分维或 Hausdorff 维数, d 为空间维数, $D \leq d$. 对 $d = 2$ 和 $d = 3$, Hausdorff 维数的数值结果分别为 $D = 5/3$ 和 $D = 2.53$ ^[3]. 这些值不同于随机渗流、自回避行走等静态模型的相应的 Hausdorff 维数,说明 DLA 集团属于一种新的普适类.最近的研究工作表明^[9],全面刻画 DLA 生长过程需要利用分形测度 (fractal measure) 的概念^[12]. 这就是说要研究一整套无穷等级的维数 $D_q (0 \leq q < \infty)$ 的性质.这里 $D_0 (= \lim_{q \rightarrow 0} D_q)$ 就是通常的 Hausdorff 维数.

尽管 DLA 模型很简单,但对其进行理论分析却遇到很大困难.目前,人们已经发展了许多理论方法(如平均场理论^[4-8]以及重整化群理论^[10])来讨论生长集团的标度行为,然而,除了能定性地说明一些现象外,理论结果与实验结果相差很大.例如,利用连续化近似的平均场理论所得到的 Hausdorff 维数为 $D = d - 1$ ^[4],这显然与实验值不符.但是, $D < d$ 这一结果却已经反映了生长集团对扩散粒子的屏蔽作用,从而在定性上与实验结果一致.

* 国家自然科学基金资助的课题.

本文主要将“连续化近似”的平均场理论推广应用到在外场作用下的 DLA 生长过程。对均匀外场,我们从理论上解释了一些计算机模拟实验结果。而对随空间距离变化的外场,我们则发现了新的标度性质,并且讨论了这种普适性与外场的关系。另外,还讨论了粘着概率对生长过程的影响。

二、粘着概率 s 对生长集团标度性质的影响

为确定起见,在本节中我们利用所谓无分岔 DLA^[11] 模型来研究粘着概率 s 对系统的标度行为的影响。在这个模型中,“种”粒子集团是具有 L 个吸收子的一条直线,无规行走的粒子只能粘附在生长集团粒子的顶端,而不能粘在该粒子的左、右两侧。实际上这个模型只考虑了生长粒子之间的竞争效应而忽略了分岔产生的影响。计算机模拟实验和理论计算的结果都表明这一模型具有非平庸的 Haudorff 维数 ($D \neq d$) 和标度不变性。

根据文献 [11] 中的讨论,不难写出粘着概率为 s 时的无分岔 DLA 集团的生长方程。它们为

$$\partial \rho / \partial t = -s u (\partial \rho / \partial r), \quad (1)$$

$$\partial \rho / \partial t = \partial^2 u / \partial r^2. \quad (2)$$

这里 ρ 代表聚集生长集团的密度, u 表示扩散粒子的密度。考虑到在 $r = 0$ 上存在一个吸收界面在无穷远有稳定的粒子流通量, u 应满足下列边界条件:

$$u(0, t) = 0; \quad (3a)$$

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \partial u(r, t) / \partial r = \text{const.} \quad (3b)$$

在写出(2)式时,已假定 ρ 具有平移不变性。在方程(1)中,若令 $s = 1$ 即回到文献[11]中的形式。为求解方程(1)和(2),我们尝试如下形式的解:

$$\rho = r^{-1} f(x), \quad (4)$$

$$u = r g(x), \quad (5)$$

$$x = r e^{-\mu t}. \quad (6)$$

这样生长方程(1)和(2)化为

$$-\mu x f'(x) = s g(x) [f(x) - x f'(x)], \quad (7)$$

$$-\mu x f'(x) = x [2g'(x) + x g''(x)]. \quad (8)$$

而边界条件(3)式变成

$$\lim_{x \rightarrow \infty} g(x) = \text{const.} \quad (9)$$

由此可解出 $f(x)$, $g(x)$ 为

$$f(x) = (2 - 2\lambda x)/s \quad x \leq 1/\lambda; \quad (10a)$$

$$g(x) = \lambda \mu x / s \quad x \leq 1/\lambda; \quad (10b)$$

$$f(x) = 0 \quad x \geq 1/\lambda; \quad (10c)$$

$$g(x) = 1 - (s - \mu)/\lambda s x \quad x \geq 1/\lambda. \quad (10d)$$

这里 λ 和 μ 为任意常数。但 $f(0) = 2/s$ 和 $g(\infty) = 1$ 是固定的。利用(4)–(6)式,可立即求出生长密度和扩散场为

$$\rho(r, t) = (2/s)[1/r - 1/\xi(t)] \quad r \leq \xi(t); \quad (11a)$$

$$u(r, t) = \lambda \mu r^2 / s \xi(t) \quad r \leq \xi(t); \quad (11b)$$

$$\rho(r, t) = 0 \quad r \geq \xi(t); \quad (11c)$$

$$u(r, t) = 1 - (s - \mu)\xi(t)/rs \quad r \geq \xi(t). \quad (11d)$$

这里 $\xi(t) = e^{\mu t}/\lambda$. 由方程(11a)可以看出, 在生长集团内部, 密度分布的变化近似为

$$\rho \propto 1/rs, \quad (12)$$

这表明, 对固定的 r , s 越小, 密度 ρ 就越大而且 s 的大小不影响该系统的 Hausdorff 维数. 因此, 具有不同粘着概率 s 的 DLA 集团是属同一普适类的, 只不过当 $s < 1$ 时, 集团的分枝花样显得更粗厚些. 这一结论与计算机模拟结果完全一致^[1]. 对 Witten-Sander 的 DLA 模型来说, 计算机模拟实验的结果与我们这里的理论计算也是相同的. 但要对模型进行解析讨论却有很大困难. 这里无分岔近似使我们有可能得到显式的解析解.

三、均匀外场的作用

在任何具体的聚集生长过程中, 无规行走的粒子, 总会或多或少地受到外力的影响. 如在 DLA 中, 最简单的情况就是扩散粒子受到生长集团诸粒子的微弱引力的作用. 此外, 带电粒子还可能受到外加电磁场的作用. 因此, 讨论外场对生长过程的影响具有更重要的实际意义.

首先, 假定外场的形式为

$$\mathbf{F} = -F(\mathbf{r})\mathbf{e}_y.$$

即沿着负 y 轴的方向, 如图 1 所示. 这样, 在二维正方形点阵中, 扩散粒子沿四个方向移动的概率分别为

$$P_1 = P_3 = 1/4, \quad (13a)$$

$$P_2 = 1/4 - F(\mathbf{r})/2, \quad (13b)$$

$$P_4 = 1/4 - F(\mathbf{r})/2. \quad (13c)$$

如果设 $u(\mathbf{r}, t)$ 为 t 时刻在 $\mathbf{r}$ 处发现无规行走的粒子的概率, 那么在 $t + \Delta t$ 时刻发现该粒子的概率为

$$u(\mathbf{r}, t + \Delta t) = \sum_{i \in NN} P_i u(\mathbf{r} + a\mathbf{e}_i, t), \quad (14)$$

式中 a 为晶格常数, 求和遍及全部最近邻格点. 将(13a)–(13c)式代入(14)式, 经简单运算后可得

$$\partial u / \partial t = a^2 \nabla^2 u / 4 + a(\partial / \partial y)[F(\mathbf{r})u(\mathbf{r}, t)]. \quad (15)$$

根据“连续化近似”的平均场理论^[4], 考虑外场后, DLA 集团的生长方程为

$$\partial \rho / \partial t = u[\rho + a^2 \nabla^2 \rho] \quad (16)$$

$$\partial \rho / \partial t = \nabla^2 u - \nabla \cdot [F(\mathbf{r})u(\mathbf{r}, t)]. \quad (17)$$

原则上, 由(16)和(17)式, 可讨论各种形式的外场 $F(\mathbf{r})$ 对 DLA 集团的影响. 但考虑到解析求解所遇到的困难, 我们只能对几类特殊形式的外场进行解析讨论. 这里, 我们首先讨论球对称均匀外场对生长集团的影响. 此时, “连续化近似”的生长方程应为

$$\partial \rho / \partial t = u(\rho + a^2 \nabla^2 \rho), \quad (18)$$

$$\partial \rho / \partial t = \nabla^2 u + c \partial u / \partial r, \quad (19)$$

式中已假定 $F(r) = -ce_r$, 而

$$\nabla^2 = \partial^2 / \partial r^2 + \frac{d-1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r},$$

d 为空间维数。如果只考虑长时行为, 可假定如下形式的解:

$$\rho = f(z) / \lambda^2, \quad (20a)$$

$$u = v g(z) / \lambda, \quad (20b)$$

$$z = (r - vt) / \lambda. \quad (20c)$$

这里 v 代表生长速度, λ 表示生长前沿的宽度^[4] 当 $d > 1$ 且 t 很大时, 可取如下近似^[4]:

$$\nabla^2 = \partial^2 / \partial r^2 + \frac{dy}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \simeq \partial^2 / \partial r^2. \quad (21)$$

这是因为上式中的 $1/r$ 项在按 $1/t$ 展开时为高阶项。将(20)和(21)式代入(18)和(19)式中可得关于 f 和 g 的方程

$$f' = -g(f + a^2 f'' / \lambda^2), \quad (22)$$

$$g' = 1 - f - hg, \quad (23)$$

其中 $h = \lambda c$ 。这里当 $z \rightarrow -\infty$ 时, 已将 f 归一化, 即 $f(-\infty) = 1$ 。考虑到当 $z \rightarrow +\infty$ 时, $f \rightarrow 0$, 则有

$$g \xrightarrow{z \rightarrow +\infty} 1/h, \quad (24)$$

$$\lambda^4 = v/c. \quad (25)$$

这里已考虑到了边界条件^[4]

$$u(\infty) = 1.$$

利用(20a),(25)式和归一化条件

$$f(-\infty) = 1,$$

可求出生长集团内部的密度分布

$$\rho = c/v. \quad (26)$$

注意到, 外场为零即 $c = 0$ 时的密度分布为^[4]

$$\rho = (d-2)/(vr). \quad (27)$$

则不难写出发生过渡现象的临界半径 R_c 。

$$R_c = (d-2)/c. \quad (28)$$

这个值与 v 无关。因此式可以看出, 只要外场不为零, 那么在集团内部总会存在一个临界半径 R_c , 使得当 $r > R_c$ 时, 密度 ρ 为常数。由于临界半径 R_c 与外场强度 c 成反比, 因此, 当 $c \rightarrow 0$ 时, $R_c \rightarrow \infty$ 。这时生长集团完全由(27)式描述。这一结论与计算机模拟实验的结果完全一致, 它表明均匀外场将会显著地改变生长集团的标度性质。另外, 人们在研究扩散粒子密度的时间变化率为有限值时的 DLA 生长过程中, 也发现了这种有趣的

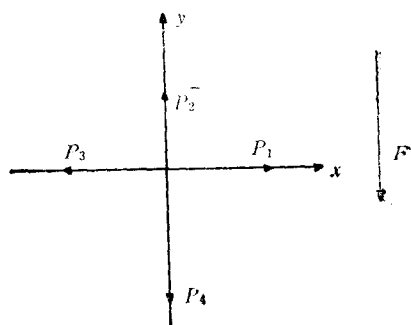


图1 考虑外场 F 后, 在二维点阵中, 扩散粒子移动概率的示意图

过渡现象^[5]. 它说明了有限外场作用和有限扩散粒子浓度之间的内在联系, 这种关系值得进一步探讨.

四、幂指数型外场对 DLA 集团的影响

下面将进一步讨论与空间变量有关的外场对聚集生长过程的影响. 在实际的物理过程中, 人们经常遇到的是随空间距离变化的外场, 如引力场等. 这就提示我们有必要研究如下形式的外场:

$$F(r) = -B/r^\alpha \quad (0 \leq \alpha < \infty). \quad (29)$$

这里仍然假定场是球对称的. 显然, 当控制参数 $\alpha = 0$ 时, 回到均匀外场的情形. 而当 α 很大时, 在远处可认为 $F(r) = 0$, 这样又回到了无外场的情况. 由此看出, 不同的 α 值将会对生长过程产生不同的影响, 这种影响有可能决定性地改变系统的 Hausdorff 维数. 下面我们针对 α 的几种不同区段分别进行讨论.

(1) $\alpha = 1$

当 $\alpha = 1$ 时, 外场化为

$$F(r) = -B/r. \quad (30)$$

为简单起见, 仍利用无分岔 DLA 模型^[11]进行解析分析. 考虑外场后, 无分岔 DLA 集团的生长方程为

$$\partial \rho / \partial t = -u \partial \rho / \partial r, \quad (31)$$

$$\partial \rho / \partial t = \partial^2 u / \partial r^2 + (\partial / \partial r)(Bu/r). \quad (32)$$

按照第二节中的讨论方法, 不难求出集团内部的 ρ 场和 u 场. 它们为

$$\rho(r, t) = (2 + B)[1/r - 1/\xi(t)] \quad r \leq \xi(t), \quad (33)$$

$$u(r, t) = \mu r^2 / \xi(t) \quad r \leq \xi(t), \quad (34)$$

式中 $\xi(t) = e^{\mu t} / \lambda^{[11]}$. 由 33 式可知, 对于外场 (30) 式生长集团的 Hausdorff 维数没有改变, 仍然为 $D = d - 1$. 这说明场 (30) 式不会影响无分岔 DLA 集团的标度性质, 它只是使生长集团的密度的相对值增大, 即使得分形的花样变得模糊了. 这种现象与改变粘着概率所产生的效果非常相似. 目前尚未看到研究此类外场的计算机模拟实验结果.

(2) $\alpha > 1$

考虑外场 (29) 式以后, Witten-Sander 的 DLA 模型的生长方程应为

$$\partial \rho / \partial t = u(\rho + a^2 \nabla^2 \rho), \quad (35)$$

$$\partial \rho / \partial t = \nabla^2 u + (\partial / \partial r)(Bu/r^\alpha). \quad (36)$$

由于只讨论 r 很大时密度 ρ 的临界行为, 因此, 在 (36) 式中, 等式右端的第二项可改写成

$$(B/r^\alpha) \partial u / \partial r - \alpha Bu/r^{\alpha+1} \approx (B/r^\alpha) (\partial u / \partial r). \quad (37)$$

若 $\alpha = 1$, 将 (37) 式代入 (36) 式可得

$$\partial \rho / \partial t = \partial^2 u / \partial r^2 + \frac{d-1+B}{r} \cdot \frac{\partial u}{\partial r}. \quad (38)$$

这相当于 $d' (= d + B)$ 维空间中无外场的 DLA 生长方程, 其解为

$$\rho = (d - 2 + B) / vr. \quad (39)$$

方程(39)式的含义与(33)式一样,它表明外场(30)式不会改变生长集团的普适类.

若 $\alpha > 1$, 将方程(38)中等式右端的第一项与第二项比较, 发现在讨论系统的长时间和大距离行为时, 只需讨论扩散过程. 这是因为外场随 r 衰减的太快, 以致它的影响完全从生长方程中消失了, 这时, 在外场(29)式作用下的 DLA 集团与 Witten-Sander 的 DLA 集团为同一普适类. 因此我们联想到, 对任何随空间变化的外场, 只要在 $r \rightarrow \infty$ 时, 其渐近行为

$$F(r) \ll 1/r^\alpha \quad (\alpha > 1), \quad (40)$$

那么该外场就不会影响 DLA 集团的 Hausdorff 维数. 如外场

$$F(r) = Ae^{-\beta r} \quad (\beta > 0), \quad (41)$$

显然不会改变 DLA 集团的标度性质.

(3) $\alpha < 1$

对无分岔 DLA 集团, 其生长方程为

$$\partial \rho / \partial t = -u \partial \rho / \partial r, \quad (42)$$

$$\partial \rho / \partial t = \nabla^2 u + (\partial / \partial r)(Bu/r^\alpha). \quad (43)$$

当只考虑系统的长时渐近行为时, 方程(44)可近似写成

$$\partial \rho / \partial t = \partial^2 u / \partial r^2 + (B/r^\alpha) \partial u / \partial r. \quad (45)$$

这里已经考虑 $\alpha < 1$. 现在我们再讨论一种极限情况, 假设外场强度 B 很大, 使得生长过程完全受外场控制. 这时, 方程(45)可进一步写成

$$\partial \rho / \partial t = (B/r^\alpha) \partial u / \partial r. \quad (46)$$

在对(42)和(46)式做简单的量纲分析后, 我们采取如下的标度假设:

$$\rho = r^{-\alpha} f(x), \quad (47a)$$

$$u = rg(x), \quad (47b)$$

$$x = re^{-\mu t}. \quad (47c)$$

将(47a)–(47c)式代入(42)和(46)式后, 可得

$$-\mu x f'(x) = g(x)[f(x) - x f'(x)], \quad (48)$$

$$-\mu x f'(x) = B[g(x) + x g'(x)]. \quad (49)$$

经简单代数运算后, 得到生长集团内部的 ρ 场和 u 场

$$\rho(r, t) = (2B/r^\alpha)[1 - r/\xi(t)] \quad r \leq \xi(t), \quad (50a)$$

$$u(r, t) = \mu r^2 / \xi(t) \quad r \leq \xi(t), \quad (50b)$$

$$\rho(r, t) = 0 \quad r \geq \xi(t). \quad (50c)$$

式中 $\xi(t) = e^{\mu t} / \lambda^{[1]}$. 由(50a)式可以看出, 在这种强外场作用下, 生长集团的 Hausdorff 维数为

$$D = d - \alpha. \quad (51)$$

这表明外场控制参数 α 的大小将直接影响系统的分维数 D . 原则上, 我们可通过改变 α 的值来生成一整套普适类.

当外场强度非常小时, 即 $B \ll 1$. 我们应当把整个空间分成性质不同的两类地区, 其边界由下式决定:

$$\rho_c = \frac{2}{R_c} = \frac{2B}{R_c^\alpha},$$

$$R_c = (1/B)^{\frac{1}{1-\alpha}}. \quad (52)$$

当 $\xi(t) \gg r > R_c \gg 1$ 时, 生长集团的 Hausdorff 维数为 $D = d - \alpha$, 而当 $R_c > r \gg 1$ 时, 系统表现出无外场 DLA 集团的普适类特点. 比较(52)和(28)式可以看出, 外场随 r 减小的情况下的特征半径要比均匀外场情况下的特征半径大得多. 当 $\alpha \rightarrow 0$ 时回到均匀外场的结果, 而当 $B \rightarrow 0$ 时, 又回到了无外场的结果.

五、结 论

在前面的讨论中, 我们利用“连续化近似”的平均场理论, 解析讨论了外场对生长集团标度行为的影响. 我们由解析计算得到了这方面的一些新的结果. (1) 对均匀外场, 我们发现了生长集团的密度由 $\lim_{r \rightarrow \infty} \rho \propto 1/r$ 到 $\lim_{r \rightarrow \infty} \rho = \text{const.}$ 的过渡现象, 并求出其临界半径 R_c . (2) 对外场 $F(r) = -B/r$, 证明了它不会改变生长集团的标度行为. (3) 对 $F(r) = -B/r^\alpha$ 类型的外场, 详细分析了不同 α 值的影响. 发现在一定条件下 ($\alpha < 1$), 生长集团的 Hausdorff 维数可由外场控制参数 α 来决定.

由于以上的分析都是在平均场近似下进行的, 因此, 真正的实验或计算机模拟实验的结果在定量上可能与我们的计算有出入, 如临界指数 α_c 可能不为 1, 然而, 我们期望实验一定会揭示存在一个临界指数 α_c . 当 $\alpha > \alpha_c$ (平均场理论给出 $\alpha_c = 1$) 时, 外场不会影响生长集团的标度性质; 而当 $\alpha < \alpha_c$ 时, 外场将会改变集团的普适类. 因为这个结论来源于外场与扩散的影响在远处的竞争.

总之, 研究外场对生长集团的影响有着非常重要的意义, 它不仅有助于了解生长集团本身的特性, 有助于认识外界环境对生长过程的控制和影响, 而且还提供了研究生长集团之间相互作用的有效方法. 因此, 我们期望对这一问题的深入研究, 将会使人们更深刻地认识不可逆聚集过程的本质.

- [1] H. J. Herrmann, *Phys. Ep.*, **136**(1986), 153.
- [2] T. Witten and L. M. Sander, *Phys. Rev. Lett.*, **47**(1981), 1400.
- [3] P. Meakin, *Phys. Rev.*, **A27**(1983), 604.
- [4] M. Nauenberg, *Phys. Rev.*, **B28**(1983), 449.
- [5] M. Nauenberg, R. Richter and L. M. Sander, *Phys. Rev.*, **B28**(1983), 1649.
- [6] T. Witten and L. M. Sander, *Phys. Rev.*, **B27**(1983), 5686.
- [7] M. Muthukumar, *Phys. Rev. Lett.*, **50**(1983), 839.
- [8] Y. Kantor, T. A. Witten and R. C. Ball, *Phys. Rev.*, **A33**(1986), 3341.
- [9] P. Meakin, A. Coniglio and N. E. Stanley, *Phys. Rev.*, **A34**(1986), 3325.
- [10] H. Gould, F. Family and H. E. Stanley, *Phys. Rev. Lett.*, **50**(1983), 686.
- [11] M. E. Cates, *Phys. Rev.*, **A34**(1986), 5007.
- [12] T. C. Halsey, M. Jensen, L. Kadanoff, I. Procaccia, and B. Shraiman, *Phys. Rev.*, **A33**(1986), 1141.

AN ANALYTICAL STUDY ON THE SCALING PROPERTIES OF DIFFUSION-LIMITED AGGREGATION IN EXTERNAL FIELDS

YU JIANG

(Department of Physics, Beijing Normal University)

HU GANG

(Department of Physics, Beijing Normal University; Center of Theoretical Physics, COAST (World Laboratory))

ABSTRACT

We have investigated the scaling properties of DLA clusters grown in the various kinds of external fields, using the meanfield theory with the continuum approximation. Our results show that the density of the growing cluster, ρ , initially dropping as $1/r$, and becomes a constant value for constant external field. For the fields of type $1/r^\alpha$ we find that the aggregates exhibit very complicated, non-trivial scaling behaviours with the control parameter α varying.