

扩散控制聚集集团对无规行走粒子的屏蔽行为*

翁甲强 孔令江 陈光旨

广西师范大学物理系, 桂林, 541001

1989年9月11日收到

本文以二维欧氏空间中的扩散控制聚集(DLA)系统的模拟数据为基础, 讨论了 Muthukumar 等人所导出的四个屏蔽长度关系式, 指出它们与有限系统的模拟数据存在一定的差距, 继而通过对无规行走粒子的聚集过程的分析, 导出了一个与模拟数据符合的屏蔽长度关系式, 并且从关系式得出, 对于足够大的 DLA 系统, Muthukumar 的结论是正确的.

PACC: 0540

一、引 言

在几何生长模型的研究中, 生长几率和屏蔽效应是决定生长物形状、性质的两个因素. 关于生长几率方面, 进入 80 年代以来已有了大量的研究工作, 而屏蔽效应方面, 相对来说则要少些. 其中, 有关 DLA 集团对无规行走粒子的屏蔽长度问题, 虽有 Muthukumar^[1], Tokuyama^[2], Hentschel^[3] 和 Matsushita^[4] 等人借助各种平均场理论进行过估计, 但其结论却不尽相同. 1983 年 Muthukumar 通过解平均场扩散方程, 得到屏蔽长度 ξ 与聚集集团的平均密度 ρ 的关系是

$$\xi \sim \rho^{-1}. \quad (1)$$

1984 年 Tokuyama 和 Kawasaki 提出, 屏蔽长度 ξ 应满足的关系是

$$\xi \sim \rho^{-\frac{1}{2}}, \quad (2)$$

而不是(1)式. 同年, Hentschel 也从平均场理论出发, 通过一定的假设导出了

$$\xi \sim (N/R^d)^{-1/d_w}. \quad (3)$$

式中 N 是聚集集团的总粒子数, R^d 是聚集集团所占的欧氏空间范围, d_w 是自由粒子的无规行走轨迹的分数维数. 对于二维欧氏平面上的布朗运动粒子, $d_w = 2$. 在这种情形下, (3)式与(2)式一致. 1986 年 Matsushita 等人用与 Hentschel 稍有不同的观点, 导出的无规行走粒子进入 DLA 集团的穿透深度表示式是

$$l \sim r^{\frac{d-D}{d_w-1}}.$$

* 国家自然科学基金资助的课题.

式中 r 是自由行走粒子开始穿透时距聚集集团中心的距离。若把 r 代为聚集集团的回旋半径 R , 则可得到与(1)–(3)式所指的屏蔽长度相应的关系式

$$\xi \sim R^{\frac{d-D}{d_w-1}}. \quad (4)$$

(1)–(4)式所用的参数不太一致, 为便于比较, 根据

$$\rho \sim N/R^d \quad (5)$$

和

$$N \sim R^D, \quad (6)$$

不妨把它们依次变换成

$$\text{Muthukumar} \quad \xi \sim N^{\frac{d-D}{D}}, \quad (1a)$$

$$\text{Tokuyama 等人} \quad \xi \sim N^{\frac{d-D}{2D}}, \quad (2a)$$

$$\text{Hentschel} \quad \xi \sim N^{\frac{d-D}{Dd_w}}, \quad (3a)$$

$$\text{Matsushita} \quad \xi \sim N^{\frac{d-D}{D(d_w-1)}}. \quad (4a)$$

由(1a)–(4a)式可明显看出, Muthukumar 等人所导出的四个屏蔽长度表示式在一般情形下是各不相同的, 但是对于二维欧氏平面上的问题, 若自由粒子作的是布朗运动, 那么 $d_w = 2$, 除了有前面提到的(3)式与(2)式一致之外, 又有(4)式与(1)式的一致。但是(1)式与(2)式, 却因指数相差一因子 $1/2$ 而不能取得一致。由于 Matsushita 的假设也有粗糙之处, 我们一时还难以判断谁是谁非。鉴于屏蔽长度的概念不仅对 DLA 集团的结构分维公式关系密切, 而且对无规行走粒子在扩散控制聚集物中的穿透性质本身来说也是重要的, 我们在这方面做了些计算机模拟工作, 也进行了理论探讨。

二、计算机模拟结果

我们的模拟工作在 VAXII 机上进行。有关的聚集集团均在二维欧几里德平面的三角形晶格上形成。即首先把欧氏平面划分成许多正三角形晶格(粒子可以在这些三角形的顶点上行走或聚集, 粒子行走的步距是正三角形的边长, 下面称之为单位长度), 并任取某正三角形的一个顶点作为生长起点(即所谓种粒子), 然后, 用稍后一点介绍的规则产生一个无规行走粒子, 并规定, 若无规行走粒子在行走过程中到达种粒子(或聚集集团中的其它粒子)的最近邻位置, 则被粘住构成了聚集集团的新长出部分。用这样的办法, 可以长出任意大的聚集集团, 而且这样长成的聚集集团, 其粒子都在以种粒子为中心的一些正六边形上。其形状如图 1 所示。为统计方便, 我们以种粒子为中心, 顶点间距相差一个单位长度的一系列正六边形对聚集集团划分层次, 设中心到正六边形的顶点的距离为 r , 则聚集集团所占欧氏空间的大小可用 $r_{\max}$ 表征。至于无规行走粒子的产生位置, 参照 Meakin 的工作^[9], 我们也规定在 $r_{\max} \leq 5$ 时, 无规行走粒子在 $r_1 = 10$ 的正六边形上随机产生, 若 $r_{\max} > 5$, 则在 $r_1 = 2r_{\max}$ 的正六边形上随机产生。随后, 无规行走粒子按每步随机地取六个方向之一行走一个单位距离的方式在欧氏平面上行走, 若一个无规行走粒子被粘住了, 成了聚集集团的一部分, 则又在生长线上产生一个新行走粒子, 若无规行走

粒子离中心过远, 达 $r \geq 3r_{\max}$, 也把它取消并重新在生长线上产生一个。

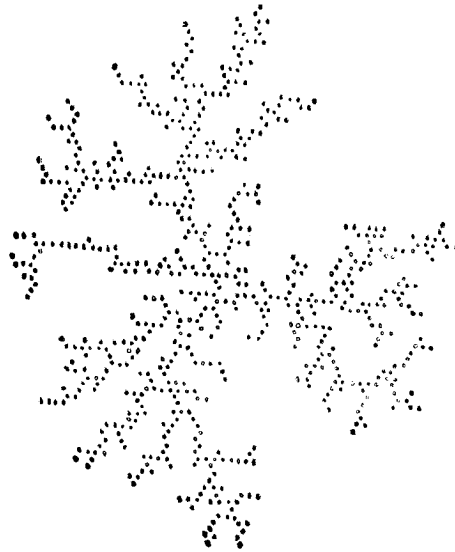


图1 用本文的生成规则在二维欧氏平面上形成的聚集集团

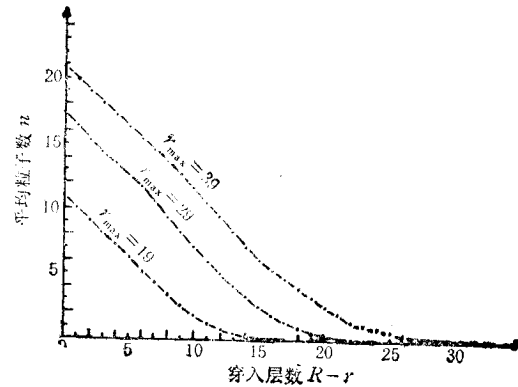


图2 无规行走粒子进入 DLA 集团的穿透曲线

根据以上规则, 我们随机地产生了 100 个尺寸相同而粒数不限定的统计样本。对于每个样本, 作随机运动的粒子可以进入尺寸为 $r_{\max}$ 的正六边形内部而聚集于该集团上, 也可以聚集于该正六边形之外而使该集团长大。我们一一记录下各穿入集团并最终聚集于集团内部的粒子的位置, 直至有某一随机运动粒子聚集于集团外缘而使 $r_{\max}$ 增大为止。用 100 个这样的记录进行平均, 求出无规行走粒子的若干穿透曲线, 如图 2 所示。从曲线可以看出, 对大部分无规行走粒子来说, 一般都会在聚集集团的较外若干层内被粘住, 只有极个别的粒子有可能进入深层, 但这样的情形比较偶然, 所以不取这样的个别粒子的穿透深度作为屏蔽长度, 而是取进入聚集集团的无规行走粒子被粘住达到一定的比例的深度作为屏蔽长度(本文的比例取 95%)。按这样的规定, 根据记录我们求出若干尺寸下 DLA 集团的屏蔽长度值, 如表 1 所示。

表1 若干尺寸下的聚集集团的平均粒子数及其对无规行走粒子的屏蔽长度

$r_{\max}$	N	ξ	$r_{\max}$	N	ξ
19	138.75	13.130	30	361.36	19.541
20	149.96	13.482	31	375.50	18.971
21	163.16	13.891	32	384.61	19.296
22	175.57	15.373	33	346.63	20.040
23	187.99	14.997	34	371.47	20.929
24	202.96	14.692	35	388.76	20.930
25	218.76	16.718	36	409.67	22.377
26	233.15	17.260	37	428.96	22.760
27	249.42	17.107	38	449.85	22.695
28	266.32	18.153	39	470.65	23.867
29	284.68	18.611			

由表 1 的数据,如果在我们所考虑的尺寸范围内 ξ 与 N 服从 Muthukumar 等人所给的关系

$$\xi \propto N^\alpha, \quad (7)$$

则由此求得的 α 是

$$\alpha = 0.47 \pm 0.04. \quad (8)$$

它与(1a)或(2a)式的指数相差甚大。以 $D = 1.70$ 计,(1a)式的指数约为 0.18,而式(2a)的指数约为 0.088。当然,这里求得的值与(1a),(2a)式所指的情况有些出入。根据 Matsushita^[4]的意见,(1)–(4)式的适用范围是 r 不大于回旋半径 R ,而回旋半径 R 是 $\rho(r)$ 取极大值处的 r 值。在我们的情况下,约为 $\frac{1}{2} r_{\max}$,大多数无规行走粒子在进入这一范围之前早已被粘住了。不过,为了检验(1)–(4)式,我们也取 $R' = \frac{1}{2} r_{\max}$ (当 $r_{\max}$ 是偶数时)或 $R' = \frac{1}{2} (r_{\max} - 1)$ (当 $r_{\max}$ 是奇数时)的范围进行考虑,求出若干尺寸下的以

R' 为起点的屏蔽长度值,如表 2 所示,相应的指数是

$$\alpha = 0.36 \pm 0.05, \quad (9)$$

仍与(1a),(2a)式的相差甚大。由此可见,(1)–(4)式在我们的模拟范围内($r_{\max} \leq 39$)与模拟结果有较大的出入,也就是说,在尺寸不大的范围内,(1)–(4)式不适用。

表 2 聚集集团在半径为 R' 的范围内的平均粒子数 N' 及其对从 R' 开始穿入的无规行走粒子的屏蔽长度 ξ'

R	N	ξ	R	N	ξ
10	87.010	5.78655	15	171.800	8.12500
11	102.020	6.65145	16	191.315	7.91611
12	118.035	7.17500	17	211.045	8.28110
13	134.865	7.21938	18	232.045	8.99730
14	152.555	7.65834	19	253.825	9.26000

三、一个可能的屏蔽长度关系式

1. 关系式的推导

为了寻求一个更为实际的屏蔽长度关系式,先来考察无规行走粒子被粘住而固定于集团的几种情形。为描述方便,用 n_r 表示以种粒子为中心,以 r 为半径的圆上的平均无规行走粒子数密度, $\sigma(r)$ 表示该圆上的聚集粒子数的平均密度。在聚集集团内部,无规行走粒子被粘住而固定于半径为 r 的圆上主要存在下述几种情形:

(1) 无规行走粒子运动至 r 处恰好与半径为 r 的圆上的聚集集团粒子接触而被固定。

对于这种情形,单位尺寸内被固定的粒子数正比于 $2n_r\sigma(r)$,系数 2 表示每个聚集集团粒子左右两边都可能粘住无规行走粒子。

(2) 无规行走粒子运动至 r 恰好与半径为 $r - 1$ 的圆上的聚集集团粒子接触而被固

定。

这种情形,单位尺寸内被固定的粒子数应正比于 $n_r\sigma(r-1)$ 。

(3) 在半径为 r 的圆上的无规行走粒子沿圆周行走一步而与圆上的聚集集团粒子接触而被固定。

由于在各层被固定的粒子数一般说来只占进入该层的无规行走粒子数很小的比例,所以对于这种固定情况,单位尺寸内被固定的粒子数可近似地看成正比于 $\frac{2}{3}n_r\sigma(r)$,系数的分母 3 是因为每个无规行走粒子有六种可能的行走方向,沿圆周的行走几率为 $1/3$ 之故。

(4) 在半径为 r 的圆上的无规行走粒子沿圆周行走一步而与半径为 $r-1$ 的圆上的聚集集团粒子接触而被固定或与半径为 $r+1$ 的圆上的聚集集团粒子接触而被固定。

与(3)类似,因这两种情形而被固定的粒子数分别也可近似地看成正比于

$$\frac{1}{3}n_r\sigma(r-1)$$

和

$$\frac{1}{3}n_r\sigma(r+1).$$

(5) 无规行走粒子由半径为 $r-1$ 的圆上重新返回半径为 r 的圆而与半径为 r 的圆上的聚集集团粒子接触而被固定,或与半径为 $r+1$ 的圆上的聚集集团粒子接触而被固定。

这两种情形,基于同样的理由,也分别可近似地看成正比于 $\frac{2}{3}n_{r-1}\sigma(r)$ 和

$$\frac{1}{3}n_{r-1}\sigma(r+1).$$

虽然因自由粒子的无规行走,类似于上述情形而被固定于半径为 r 的圆上的过程还会继续发生,但是实际上占的比例已经很小,所以我们不妨以上述七种情形代表无规行走粒子被固定于半径为 r 的圆上的过程。这样,被固定于半径为 $r \sim r+dr$ 夹层内的粒子数可以表成

$$\begin{aligned} s(r)dn_r = A_1[& 2n_r\sigma(r) + n_r\sigma(r-1) + \frac{2}{3}n_r\sigma(r) + \frac{1}{3}n_r\sigma(r-1) \\ & + \frac{1}{3}n_r\sigma(r+1) + \frac{2}{3}n_{r-1}\sigma(r) + \frac{1}{3}n_{r-1}\sigma(r+1)]s(r)dr. \end{aligned} \quad (10)$$

式中 $s(r)$ 表示半径是 r 的圆的周长, A_1 是一比例系数。

前面已经提到,无规行走粒子在某一层内被粘住的数目占进入该层的行走粒子数的比例很小,因此(10)式中的 n_{r-1} 又可近似地写成

$$n_{r-1} \doteq \frac{1}{3}n_r. \quad (11)$$

将(11)式代入(10)式,并将 $s(r)n_r$ 重新表为 n_r ,则在 $r \sim r+dr$ 夹层内被固定的粒

子数可重新表成

$$dn_r = A_1 n_r \left[\frac{4}{9} \sigma(r+1) + \frac{26}{9} \sigma(r) + \frac{4}{3} \sigma(r-1) \right] dr. \quad (12)$$

注意, 式中 n_r 已表示进入第 r 层的无规行走粒子数而不再代表平均无规行走粒子密度.

$$\text{由于}^{(4)} \quad \sigma(r) \sim r^{D-d}, \quad (13)$$

(12)式可进一步写成

$$dn_r = A n_r \left[\frac{4}{9} (r+1)^{D-d} + \frac{26}{9} r^{D-d} + \frac{4}{3} (r-1)^{D-d} \right] dr. \quad (14)$$

式中 A 是一新的比例系数.

在一般情形下, 一个无规行走粒子被粘住的机会除了与聚集集团各层的平均粒子数密度有关之外, 也还与聚集集团各层粒子分布的不均匀性等其它因素有关. 为了表示这种关系, 我们把 A 看成 R 与 r 的函数. 当然, 由于物理的原因, 它随 R, r 的变化不大. 在一级近似下, 可取为

$$A(R, r) = a_1(R) - b_1(R)r. \quad (15)$$

于是(14)式又可改写成

$$dn_r = (a_1 - b_1 r) n_r \left[\frac{4}{9} (r+1)^{D-d} + \frac{26}{9} r^{D-d} + \frac{4}{3} (r-1)^{D-d} \right] dr. \quad (16)$$

如果知道了 a_1 与 b_1 , 那么由(16)式对 r 积分不难求出屏蔽长度 ξ . 不过, 由于在无规行走粒子的穿透范围内 r 通常远大于 1, 因此, 进一步把(16)式简化成

$$dn_r = (a - br) n_r r^{D-d} dr. \quad (17)$$

式中系数 a, b 只是 R 的函数.

将(17)式对 r 积分, 并考虑初始条件 $r = R$ 时 $n_r = n_0$, 可得

$$\begin{aligned} r^{D-d+1} - \frac{b(D-d+1)}{a(D-d+2)} r^{D-d+2} &= R^{D-d+1} - \frac{b(D-d+1)}{a(D-d+2)} R^{D-d+2} \\ &+ \frac{D-d+1}{a} \ln \frac{n_r}{n_0}. \end{aligned} \quad (18)$$

如果把上式中的 n_r 看成穿透深度终端处剩余的无规行走粒子数目, 那么式中的 r 就代表穿透结束处的位置, 因而可得屏蔽长度

$$\xi = R - r. \quad (19)$$

把(19)式代入(18)式, 则可得到屏蔽长度所服从的关系式如下:

$$\begin{aligned} (R - \xi)^{D-d+1} - \frac{b(D-d+1)}{a(D-d+2)} (R - \xi)^{D-d+2} &= R^{D-d+1} \\ &- \frac{b(D-d+1)}{a(D-d+2)} R^{D-d+2} + \frac{D-d+1}{a} \ln \frac{n_r}{n_0}. \end{aligned} \quad (20)$$

由推导可知, 其形式与定向运动粒子的相同.

2. 关系式的适用范围与验证

根据上述的推导, 如果(20)式中的 D 代表通常所指的结构分维, 那么(20)式的适用范

围是不大于聚集集团的回旋半径 R , 但是实际上只要对 D 的意义重新解释, 完全可以把(20)式推广至整个聚集体系. 因为, 对于 DLA 集团, 不仅存在(6)式的关系, 而且根据表 1 的模拟数据, 平均来说, 聚集集团的总粒子数和其欧氏半径也存在着关系

$$N_1 \sim R_1^{D_1}. \quad (21)$$

式中取 $R_1 = r_{\max} - 1$ 的集团进行考虑, 这是因为我们的工作总是使最外层的粒子数为 1, 过于特殊, 故把该层除外. 根据表 1 的数据, 还可求出 $D_1 = 1.72 \pm 0.01$.

另一方面, 若用 $\rho_1(r)$ 表示聚集集团第 r 层的粒子数, 则整个集团的平均粒子数又可表成

$$N_1 \sim \int_0^{R_1} \rho_1(r) dr. \quad (22)$$

根据(21)和(22)式, 可知

$$\rho_1(r) \sim r^{D_1-1}. \quad (23)$$

从而在 r 处的平均粒子数密度

$$\sigma_1(r) \equiv \frac{\rho_1(r) dr}{s(r) dr} \sim r^{D_1-d}. \quad (24)$$

表 3 无规行走粒子穿入聚集集团到达各层的平均粒子数(对 100 个集团求平均)

$r_{\max} = 19$		$r_{\max} = 29$		$r_{\max} = 39$	
r	n_r	r	n_r	r	n_r
7	0.58	9	0.33	15	0.70
8	0.90	10	0.51	16	1.00
9	1.31	11	0.72	17	1.30
10	1.90	12	1.10	18	1.55
11	2.60	13	1.41	19	2.00
12	3.37	14	1.88	20	2.49
13	4.28	15	2.63	21	3.22
14	5.14	16	3.38	22	3.90
15	6.31	17	4.17	23	4.66
16	7.32	18	4.98	24	5.27
17	8.25	19	5.88	25	6.09
18	9.09	20	7.07	26	7.06
19	10.00	21	8.16	27	8.11
		22	9.34	28	9.46
		23	10.52	29	10.50
		24	11.72	30	11.55
		25	12.65	31	12.55
		26	13.56	32	13.52
		27	14.30	33	14.41
		28	15.29	34	15.32
		29	16.36	35	16.37
				36	17.18
				37	18.08
				38	18.93
				39	19.80

由于(24)式与(13)式的形式完全相同,故只要把(20)式中的 D 换为 D_1 , R 换为 R_1 ,则 ξ 表示整个体系的屏蔽长度。

为了验证(20)式的正确性,取100个聚集集团样本进行统计,所得数据如表3所示。用这些数据,不难由(17)式确定出三种情况下的 a, b 值,并进而由(20)式标出对应的 ξ 值,所得结果如表4所示,与表1中的直接测算结果相当符合。

表4 在 $d=2, D_1=1.72$ 情况下由表3的数据确定的 a, b 值及由(20)式算出的 ξ 值

R_1	a	b	ξ
19	1.02 ± 0.01	0.044 ± 0.003	12.6
29	0.97 ± 0.01	0.029 ± 0.003	17.5
39	0.90 ± 0.01	0.021 ± 0.002	22.8

如果DLA集团满足:1)集团的粒子数足够大;2)集团的尺寸 R 足够大;3)(20)式中的因子 $\frac{b(D-d+1)}{a(D-d+2)}$ 足够小,那么由(20)式和(6)式不难得到

$$\xi = KN^{\frac{1}{D}} \{1 - [1 - K'(D-d+1)N^{-\frac{D-d+1}{D}}]^{\frac{1}{D-d+1}}\} \sim N^{\frac{d-D}{D}}.$$

由此可知,Muthukumar表示式(1)是在集团满足上述条件下的结果。

- [1] M. Muthukumar, *Phys. Rev. Lett.*, 50(1983), 837.
- [2] M. Tokuyama and K. Kawasaki, *Phys. Lett.*, 100A(1984), 337.
- [3] H. G. E. Hentschel, *Phys. Rev. Lett.*, 52(1984), 212.
- [4] M. Matsushita, K. Honda, H. Toyoki, Y. Hayakawa and H. Kondo, *J. Phys. Soc. Jpn.*, 55(1986), 2618.
- [5] P. Meakin, *Phys. Rev.*, A27(1983), 1495.

SCREENING BEHAVIOR OF THE DIFFUSION-LIMITED AGGREGATION FOR SOME RANDOM WALK PARTICLES

WENG JIA-QIANG KONG LING-JIANG CHEN GUANG-ZHI

Department of Physics, Guangxi Normal University, Guilin, 541001

(Received 11 September 1989)

ABSTRACT

According to the computer simulation results for diffusion-limited aggregation in two-dimensional Euclidean space, we give a discussion about some formula for the screening behavior introduced by Muthukumar, Tokuyama, Hentschel and Mutsushita separately. We show that these formula give a large disagreement with our computer simulation results for a finite system. Then, through the analysis of the process of aggregation by random walk particles, we obtain a equation for the screening behavior that agrees with the simulations in this paper. Finally, we find that the formula introduced by Muthukumar is correct if the aggregate is sufficiently large.

PACC: 0540