

线状凝聚核聚集生长的模拟与实验研究*

Simulation and Experimental Study of Linear Aggregation Nuclear

庞寿全, 陈 乐

PANG Shou-quan, CHEN Le

(玉林师范学院物理与信息科学系, 广西玉林 537004)

(Department of Physics and Information Science, Yulin Teachers College, Yulin, Guangxi, 537004, China)

摘要:在传统二维 DLA 模型的基础上提出一个线状凝聚核聚集生长模型,利用该模型对线状凝聚核聚集生长过程进行计算机模拟,同时利用电解沉积金属锌的方法进行相应的电化学沉积实验研究,最后通过计算凝聚物的分形维数对模拟和实验结果进行验证。模拟结果显示,线状凝聚物的生长区域主要位于凝聚核尖端位置的邻近区域,凝聚核每一尖端部分引起的生长类似于一个点凝聚核的生长情况;相应实验得到的电沉积物的整体形态与模拟结果十分类似。凝聚核的形状不但影响凝聚物树枝的分布结构与形态,还影响凝聚物的分形维数。

关键词:凝聚核 聚集生长 粒子 随机运动

中图分类号: O540 **文献标识码:** A **文章编号:** 1005-9164(2009)03-0293-04

Abstract: Base on the traditional two-dimensional DLA model, this paper develops a linear aggregation nuclear aggregation growth model. We use this model to simulate the aggregation growth process of linear aggregation nuclears. At the same time, based on the simulation, we use the way of electro-deposition of zinc metal to carried out the corresponding experimental study. The results showed that the growth region of aggregation are mainly located in the adjacent region of the cutting-edge part of the aggregation nuclear, the growth caused by the each cutting-edge part of aggregation nuclear is similar to the growth of a point aggregation nuclear. In addition, although the physical mechanism of electric aggregation formation is different to the computer simulation, but corresponding electricity aggregation's pattern is still very similar to simulation results. The results also showed that the shape of the aggregation nuclear not only affected the distribution of aggregates branch structure and form, but also affect the aggregates fractal dimension.

Key words: aggregations nuclear, aggregate growth, particles, random walk

为了研究悬浮在溶液或大气中的煤灰烟尘和金属粉末等微粒的随机扩散凝聚过程,1981年 Witten 和 Sander^[1]提出了著名的扩散限制凝聚(简称 DLA)模型。至今,DLA 模型已经成为描述自然分形生长的重要模型,为大量的非线性聚集生长过程提供了重要的研究思想和方法,这些研究包括探索聚集过程的物理机制、外部环境对聚集生长的影响等等^[2~5]。在过去的 20 多年里,人们注意到电化学沉积过程与 DLA 过程非常类似,因此人们在模拟的基础上,利用实验研究了电化学沉积过程,同时还研究溶液浓度、粒子

漂移效应、表面张力大小以及基底表面构造差异等因素对分形生长的影响,同时不断对 DLA 模型进行改进,并利用改进后的模型结合实际的生长情况进行了大量的研究^[6,7]。然而,在众多的研究中,由于受到传统 DLA 模型的影响,无论是模拟研究还是实验研究,大多只针对一个点凝聚核(即一个种粒子)的生长情况。而对于复杂的自然环境来说,凝聚核的形状是多种多样的,其中对于线状凝聚核引起的生长情况,也是一种十分常见的现象。同时,近年来人们对薄层电解液中电解沉积物的研究发现,在电解沉积实验中阴极形状的差异对沉积物枝晶生长的形态产生重要的影响^[8~10]。

本文对线状凝聚核引起的聚集生长过程进行计算机模拟,同时利用电解 ZnSO₄ 溶液的方法进行实

收稿日期:2009-03-13

作者简介:庞寿全(1967-),男,讲师,主要从事非线性动力学研究。

*国家自然科学基金项目(10762005),玉林师院青年基金项目(2009YJQN25)资助。

验研究,并通过计算分形维数对模拟和实验结果进行验证。

1 计算机模型及实验装置

1.1 计算机模型

在传统 DLA 模型的基础上^[1,11],我们将一个欧氏平面划分成由 $M \times M$ (取 $M = 4000$) 个大小相同的小方格构成的点阵,并在点阵中心区域放置一线度为 L 的线状凝聚核(采用连续放置 L 个种粒子的方法),随机粒子产生区域(粒子源)则是以点阵为圆心、半径较大的圆。模型的生长规则采用文献[11] Meakin 模型的随机粒子行走与凝聚规则。模型如图 1 所示。

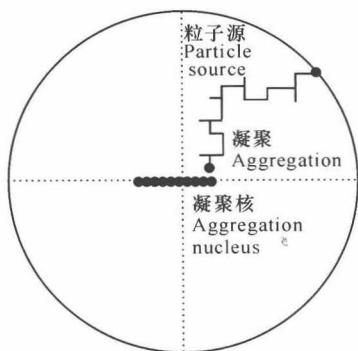


图 1 粒子随机产生、行走和凝聚情况示意

Fig. 1 The sketch map of particles randomly generated, walking and the situation of aggregation

1.2 实验装置

实验采用电解 $ZnSO_4$ 溶液,将纯 $ZnSO_4$ 溶于蒸馏水,配成 0.5mol/L 的 $ZnSO_4$ 水溶液。实验装置如图 2 所示。在平底容器(直径约为 10cm)内放置一铜圆环薄片作为电极阳极,在容器中心区域上方悬挂细铅笔芯作为电极阴极,并以滤纸作为 Zn 的电沉积物的载体。在实验中,严格保持液面水平,且液层尽可能薄(约 1.5mm),仔细调整阳极和阴极的位置,使阳极尽可能保持水平,且与液面充分接触,同时使阴极处于阳极的中心位置,保证电场的对称性。这样,既可以使电解充分进行,又能保证电解沉积在一个二维平面上进行。

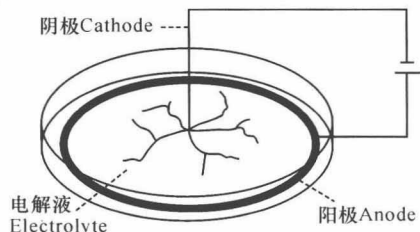


图 2 电沉积 Zn 实验装置

Fig. 2 The experimental installation map of electrodeposition of Zn leaves

2 结果与分析

2.1 计算机模拟结果与分析

图 3(a)为利用计算机模型随机模拟得到的凝聚物。可以看出,凝聚物仍然具有树状的开叉性结构,但是与传统 DLA 模型结果^[11]比较却有明显差异,凝聚物“树枝”主要分布于线状凝聚核的两端,向外生长趋势明显;在线状凝聚核的中间部分(即平坦区域),树枝生长受到了明显的“抑制”,尽管仍有大量的可生长区域。虽然凝聚物生长过程具有“屏蔽效应”^[7,12],但是这一结果仍然超出我们的意料。首先,线状凝聚核形成凝聚物的“树枝”基本只集中于线状的两端,且两端的生长存在明显的“排斥”作用,而凝聚核中间的平坦区域几乎无明显生长,凝聚物总体形态类似于 2 个种粒子所形成的二集团凝聚物。图 3(b)为两个种粒子的聚集生长图,两集团种粒子的间距与线状的长度相当,不难看出,两集团的生长也受到明显的“排斥”作用。第二,线状凝聚核凝聚物的生长明显反映了凝聚物的生长特征,凝聚核越尖端处,生长越容易,生长速率也相对越快,越平坦处,生长越慢,因而导致凝聚物的“树枝”基本只集中于凝聚核的两端,中间平坦区域几乎不生长。第三,对比图 3(a)和(b)不难看出,线状凝聚核的每一尖端部分的生长类似于一个点凝聚核的生长情况。

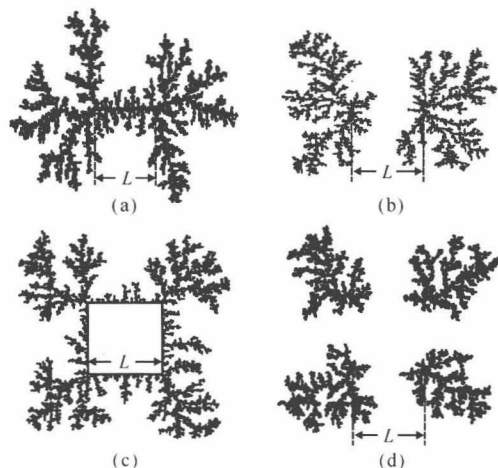


图 3 4 种不同凝聚核模拟得到的凝聚物 ($L = 100$)

Fig. 3 The aggregations of four different aggregation nuclei

(a)线状凝聚核;(b)两个种粒子;(c)正方形凝聚核;(d)4 个种粒子。

(a)A Liner aggregation nuclear;(b)Two seed particles;(c)Asquare aggregation nuclear;(d)Four seed particles.

为了验证上述结论,我们模拟正方形凝聚核(即将种粒子排列成一个正方形的形状)的生长情况以及 4 个种粒子的生长情况,其中正方形的边长与 4 个种

粒子间的距离相当。从图 3(c)可见,凝聚物树枝的生长也是集中于正方形的 4 个角上,即凝聚核的 4 个尖端部位,在凝聚核平坦区域,树枝生长相对较少,同样受到了明显的“抑制”作用,各个尖端引起的生长也相互“排斥”。对比图 3(c)和(d)也不难发现,正方形粒子源的生长情况和 4 个种粒子的生长情况比较类似,即正方形凝聚核的 4 个尖端部分同样类似于 4 个点的生长情况。

2.2 电解沉积实验结果与分析

图 4 是电解沉积实验装置得到的电解沉积锌生长凝聚物,其中的(a)、(b)、(c)、(d)分别是线状阴极、两点阴极、正方形阴极和四点阴极得到的 4 种电解沉积物。从沉积物的整体结构来看,图 4 的实验结果与图 3 的模拟结果十分相像。对比图 4 中的(a)和(b)、(c)和(d)可以发现,尽管电沉积凝聚物形成的机制与模拟情况有明显差异,但同样具有尖端生长的“屏蔽效应”,即阴极(凝聚核)的尖端部分生长最快,平坦部分生长较慢,甚至不生长。同样,阴极的每一尖端部分的生长也类似于一个点阴极核的生长情况,这与计算机模拟结果基本一致。

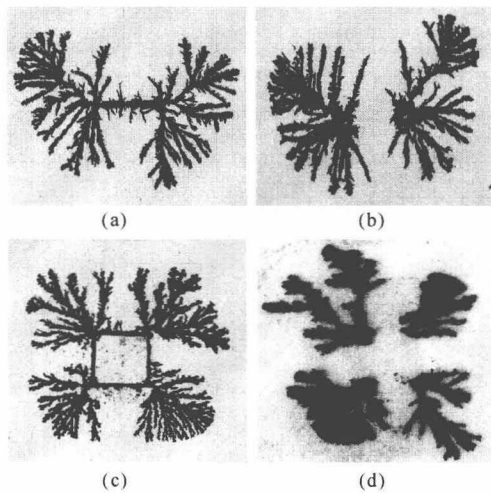


图 4 4 种不同阴极得到的锌电解沉积物

Fig. 4 The Electrolytic zinc deposits of four different cathodes

(a)线状阴极;(b)两点阴极;(c)正方形阴极;(d)四点阴极。

(a) A Linear cathode; (b) Two cathodes; (c) Square cathode; (d) Four cathodes.

在 DLA 模型中,随机扩散是粒子凝聚过程中起主导作用的生长动力,因此人们利用扩散理论,对凝聚物的形成的物理机制进行了相对深入的探究,取得了一定的成果,也较好地解释了聚集过程中的“屏蔽效应”^[9]。然而,相对于电解沉积生长的实验而言,仅依靠扩散动力并不能形成沉积物,同时通过电解沉积

实验观察,我们发现,两电极的电势差越大,金属沉积的速度就越快,形成“树枝”的线状形态越明显。因此我们认为,相对于 DLA 模型,在电沉积生长过程中随机扩散并非生长的主要动力,而电场力才是引起金属离子移动,从而导致沉积的主导力。通过分析不难发现,锌沉积物生长过程及形成沉积物的结构特征与两电极形成的电场有关。从图 5 和图 6 给出的电力线的大致分布图不难看出,由于阴极的尖端附近电力线分布较密,电场较强,因此锌离子更容易在阴极的尖端部位沉淀。同时,由于受到电场力的作用,锌离子的运动不可能是随机的,锌离子向阴极方向运动的概率更大,从而导致沉积物树枝的开叉没有模拟情况明显。显然这与 DLA 模型的凝聚物生长的物理机制并不相同,尽管如此,但是电解沉积物的整体形态与模拟结果还是十分类似,这可能和电场的分布有关。

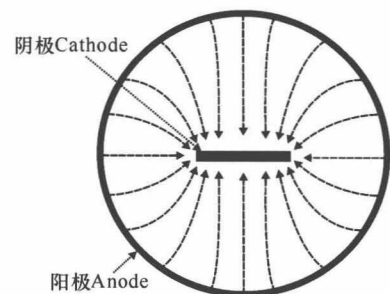


图 5 线状阴极的电力线分布

Fig. 5 The General distribution of power linear cathode

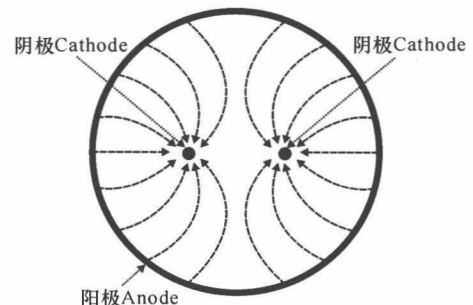


图 6 点阴极的电力线分布

Fig. 6 The General distribution of power point cathode

3 分形维数计算

分形结构是生长凝聚物的一个典型特征,分形维数可以用来定量描述凝聚物的分形特征。我们通过标度关系来计算凝聚物的分形维数。为了便于比较,我们采用传统 DLA 模型计算维数的常用方法——回旋半径法对凝聚物的分形维数进行计算^[13],图 3(a)、(b)、(c)、(d) 4 种不同凝聚物的分形维数分别为 1.7494、1.7547、1.6734、1.6760,与传统 DLA 模型凝聚物的分形维数存在一定差异。尽管计算方法相同,但是统计结果却比传统的 DLA 模型的单核凝聚

体的分形维数(1.67)^[1]偏小,这是由于线形凝聚核导致凝聚体在生长区域的平均密度变小所致。图4(a)、(b)、(c)、(d)4种锌电解沉积物的分形维数分别为1.7195、1.6189、1.5935、1.6699,大小也不尽相同。

为了验证上述维数的结果,我们还在计算机程序中采用“盒维数”的计算方法^[12]对凝聚物的分形维数进行计算,得到图3(a)、(b)、(c)、(d)的结果分别为1.6054、1.5904、1.5942、1.5398,图4(a)、(b)、(c)、(d)的结果分别为1.6453、1.5837、1.4996、1.6491。

两种计算方法得到的维数不尽相同,这是由于两种不同计算维数方法所引起的。但是从两种计算结果都可以看出,凝聚核形状对凝聚物的分形维数有一定影响。

4 结论

通过计算机模拟与电解沉积实验,我们得到如下结论:

(1)凝聚物的生长区域主要集中于线状凝聚核的尖端部分,其中一个尖端相当于一个种粒子,有几个尖端部分,就近似于有几个点凝聚核的生长情况。

(2)尽管凝聚物的模拟与实验的物理机制不尽相同,但是实验电解沉积物的整体形态与模拟结果十分类似,这与电场的分布有关。

(3)模拟凝聚物与实验电解沉积凝聚物均具有分形结构和分形维数,但是不同凝聚核所得的凝聚物,其分形维数不尽相同,说明凝聚核的形状影响了凝聚物的分形维数。

参考文献:

[1] Witten T A, Sander L M. Diffusion-limited aggregation, a kinetic critical phenomenon[J]. Phys Rev Lett,

1981,47(19):1400-1403.

[2] 谢刚,张郑,陈书荣,等.点阴极下金属电沉积过程枝晶二维生长的计算机模拟[J].科学技术与工程,2003,3(4):343-346.

[3] 谢国锋,王德武,应纯同.改进的DLA方法模拟薄膜二维生长[J].物理学报,2005,54(5):2212-08.

[4] 庞寿全,陈乐,陈洁,等.聚集生长凝聚集团平均特征长度与粒子数关系研究[J].广西科学,2007,14(4):386-388.

[5] Weng Jiaqiang. Some research on diffusion-limited aggregation[J]. Chinese Phys Lett, 1987, 4(9): 417-420.

[6] 吴锋民,王衍,吴自勤.一维随机成核生长模型[J].物理学报,1996,45(12):1960-1969.

[7] 翁甲强,孔令江,陈光旨.扩散控制聚集集团对无规行走粒子的屏蔽行为[J].物理学报,1990,39(7):1035-1043.

[8] 吴黎黎,陆杭军,吴锋民.稳恒磁场下金属电沉积枝晶生长的模拟[J].计算物理,2006,23(4):499-504.

[9] 罗成林,杨兵初,戎茂华.磁场对滤纸上Zn电解沉积物形貌的影响[J].物理学报,2006,55(7):3778-3764.

[10] Mhiochain T R Ni, Hinds G, Martin A, et al. Influence of magnetic field and gravity on the morphology of zinc fractal electrodeposits [J]. Electrochimica Acta, 2004, 49: 4813-4828.

[11] Meakin P. Diffusion-controlled cluster formation in 2-6 dimensional space[J]. Phys Rev A, 1983, 27(3): 2616-2623.

[12] 杨展如.分形物理学[M].上海:上海科技教育出版社,1996.

[13] 冯志刚,周宏伟.图像的分形维数计算方法及其应用[J].江苏理工大学学报:自然科学版,2001,22(6):37-40.

(责任编辑:韦廷宗)

日本科学家发现大脑受损时可以进行“自我调整”

日本科学家最近通过动物实验证实,大脑受损时可进行“自我调整”,当大脑某侧脑功能因脑梗塞丧失时,另一侧大脑的神经回路会发生重组,承担起受损一侧大脑的功能。

日本科学家人为导致实验鼠大脑右半球发生脑梗死,然后观察大脑左半球的神经变化。他们发现,在实验鼠大脑右半球受损后1~2周,左半球脑神经回路开始重新连接组合,慢慢承担起受损的大脑右半球的功能,这个过程需要4周左右;如果加以适当刺激,整个过程会更加顺利,大脑左半球也可以更好地承担右半球的功能。这说明,脑损伤后在特定的时间内刺激没有受损一侧的大脑,可以使大脑功能有效恢复。这项研究成果为治疗脑血管疾病和脑外伤提供了新思路。

(据科学网)