

# 无序系统的分形行为

黄立基 柳百新 李恒德

(清华大学工程物理系)

## 摘 要

本文从大量的实验事实出发,对生长、结构弛豫、动力学行为、光电性能、辐照行为、表面结构、断裂行为七个方面概述了具有随机性质的无序系统中所表现出来的分形行为,说明了分形对于规范和描述这些无序系统中所表现出来的复杂行为的作用,讨论了它的局限性和新近的结果。本文重点地叙述了无序凝聚态材料中的实验结果而未涉及相应的理论部分。

自七十年代末期美国数学家Mandelbrot发表他的开创性著作《自然界的分形几何》一书以来,分形(fractal)这一概念便日益受到物理学家、化学家和材料工作者的关注,并纷纷将这一概念引入各自的工作领域内,取得了一系列的成果<sup>[1-6]</sup>。

分形这一概念的数学意义是可以规范(标志)一类病态集合或几何图形。典型的例子是康托尔集合。一条长度为1的线段等分为三小段,舍弃中间的那一小段,于是得到长度各为 $\frac{1}{3}$ 的两小段;如此构造下去,可以得到一个无穷集合。最后的结果是每一小段的长度为零,而个数有无穷多个。用数学的语言来说,这样的结构具有“零体积”和“无限大的表面”。按照“体积”和“线度”的关系:

$$N(\lambda L) = \lambda^D N(L),$$

可以求得康托尔集合的“维数”:

$$D = \ln 2 / \ln 3,$$

这样的非整数的维数称为豪斯道夫维数。物理学家们将这一概念用于研究一些具有随机性质的真实物理系统,结果发现,诸如无序材料中的生长、结构弛豫、结构变化的动力学过程、材料表面的行为、材料的断裂等许多具有某些随机行为的系统中都具有这种行为。即某个可测量的量都可以用其对应的参量来规范(称为标度),从而可以得到一个对应的“维数” $D$ 。为

物理

了区别于数学上的概念,通常将这样一个非整数的 $D$ 值称为分形维数。

分形这一概念对材料工作者的吸引力在于可以用这样一种方法来规范和划分无序材料的性质和类别,从而使复杂的问题明朗、简单化。无穷大的表面积和零体积对于制造新材料也具有同样的吸引力。此外,最近对多标度分形(multifractal)及生长动力学的研究结果,使得我们有可能在更深入的层次上理解诸如湍流、浑沌等复杂的现象。

## 一、无序系统的生长

### 1. 生长的模型

生长的模型大致可以分为两类:(1)基于能量考虑的模型;(2)基于无序运动机理的模型。前一类所涉及的有如成核、晶化或畴壁生长这一类过程。后一类模型可称作几何模型,因其运动机制仅依赖于生长的几何特征,同时这类模型大都具有不可逆的性质。目前分形意义的生长模型大都属于第二类模型。

对具有分形行为的生长模型大量的研究工作,是通过计算机模拟来实现的。这方面开创性的工作是Witten及Sander所建立的扩散限制凝聚(DLA)模型<sup>[7]</sup>。这一模型的基本思想是把扩散方程和随机行走过程结合起来研究凝聚过程。在计算机上,由DLA模型所获得

的结构见图 1。这样的结构能很好地满足标度规律,并且具有非整数的分形维数。在自然界中,有许多凝聚和生长过程都具有这样的特征。因此, Witten 和 Sander 的工作朝着认识和规范这类现象的方向迈出了重要的一步。此后,大量的计算机和实验的工作给出了更为详细的

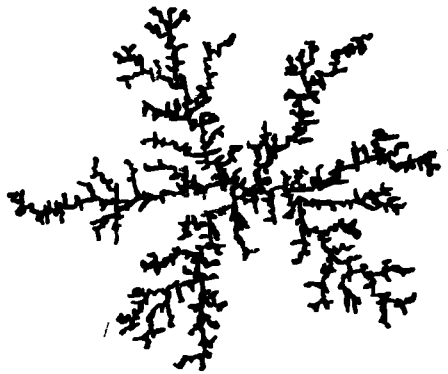


图 1 DLA 模型模拟图样

结果,从而在物理学中开辟了一个新的研究领域,并有力地促进了其它学科的发展。

## 2. 真实系统中的生长

对真实系统中具有 DLA 模型生长特征的生长过程已进行了大量的研究,并得到了证实。在这些实验结果中,分形结构的形成大都是在无序系统中完成的,例如 GeSe<sub>2</sub> 非晶薄膜的热退火过程<sup>[8]</sup>,溅射 NbGe<sub>2</sub> 非晶薄膜的过程,硅微球在无序薄膜中的凝聚,化学中高分子的凝聚过程,液体(不定形)中的金属生长以及离子束与固体薄膜相互作用过程中非晶薄膜的亚稳合金相的生长等。丰富的实验事实使人们对实际的过程加深了认识,同时也推动了人们对无序材料的结构的探讨。人们正试图回答的一个重要的问题是,这些大量产生于无序材料中的分形结构与无序材料结构本身的关系是什么?

## 二、无序系统中的结构弛豫

非晶态物质结构弛豫的,介电系数发散的以及非晶半导体中的光传导弛豫中的非指数型

经验规律很早就为人们所注意。对这些经验规律的理解和认识是一个十分重要的问题。最近,一些研究表明,这些规律可以等同于标度规律,因而可以用分形的概念来加以解释<sup>[9]</sup>。

### 1. 结构弛豫

非晶态相变点附近的结构弛豫可以用指数型的衰减函数来描述。某些物理性质在相变点附近的临界值也满足非整数型的标度关系。例如,实验研究表明,光散射的强度相关函数因子  $f(t)$  在玻璃相变点的弛豫过程满足  $\exp(-t/\tau)^\beta$  的弛豫规律。非晶态相变点的比热随温度的变化也具有同样类似的规律。此外,在非晶态转变温度附近,液体和非晶态共存的弛豫规律也满足标度关系:

$$W = W_0 \psi^{-\alpha},$$

其中  $W$  为弛豫率。

### 2. 介电弛豫

非晶态物质中介电发散的德拜型、Cole-Cole 型和 Williams-Watts 型的弛豫过程都可以用二类衰减函数表示: (1)

$$\varphi_e = \frac{\beta}{\tau} \left( \frac{\tau}{t} \right)^{1-\beta} e^{-\left(\frac{t}{\tau}\right)^\beta}$$

扩张指数型; (2)  $\varphi_h \propto t^{-\tau}$  (双曲线型)。介电发散时,缺陷的运动和热激活过程也满足双曲线型分布:  $\psi(t) \propto t^{-(1+\delta)}$ 。Schlesinger-Montroll 的分析表明,这样的过程可以认为是由一个随

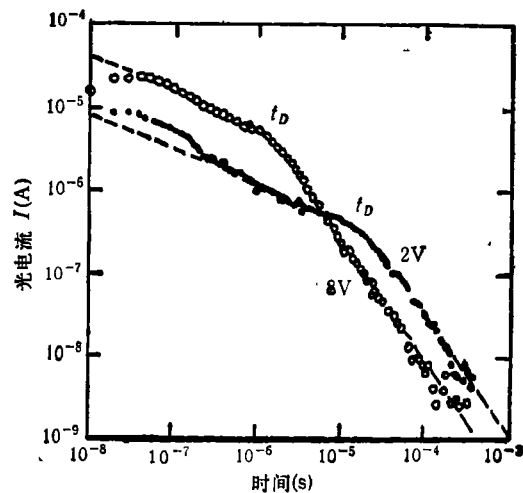


图 2 光电流与时间的关系

机过程的分形时间所支配, 此时缺陷移动时间的平均延时可以认为是无限大。

### 3. 光传导弛豫

用脉冲光辐照非晶态半导体所测得的光电流随时间的变化为

$$\begin{cases} i(t) \propto t^{-(1-\varepsilon)} & (t/t_D \ll 1), \\ i(t) \propto t^{-(1+\varepsilon)} & (t/t_D \gg 1). \end{cases}$$

同样, 脉冲光所激发的光电子可以认为是由一个分形时间所支配的。图2给出了实验结果, 这里  $\varepsilon = 0.5$ 。

## 三、无序系统的动力学行为

应用分形的概念对无序系统的动力学行为的大量研究是基于分形子 (fracton) [维数或称为谱维数 (spectral dimension)] 而进行的<sup>[10]</sup>。

### 1. EMA 模型和振动态密度

有效介质近似 (EMA) 模型, 是为了解决过去计算所获得的低频和高频近似下的振动态密度的标度关系, 在标度长度改变时, 与实验事实相矛盾而提出的。它的主要思想是应用研究无序态键渗流扩散的结果并借用量子振动本征态密度的格林函数变换方法。用这一模型对振动态密度的计算表明, 在渗流阈附近, 振动态密度  $N(\omega)$  发生跃变并满足标度关系

$$(p - p_c)^{-(d/2)},$$

其中  $p_c = 1/d$ ,  $d$  为欧几里德维数。此时, 扩散系数随时间的变化也满足  $D(t) \propto t^{1/2}$ 。

### 2. 振动色散关系

研究表明, 依赖于频率的有效键能  $\bar{W}|\omega(q)|$  满足自洽方程。由此可以导出色散关系:

$$\omega^2(q) = q^2 \bar{W} |\omega(q)|,$$

由于  $\bar{W}$  为复量, 因此  $\omega(q)$  可以用依赖于波矢的频率和类波激发衰减率  $\delta_q$  表示:

$$\omega(q) = \omega_q - i\delta_q.$$

研究结果表明, 当  $q$  很小或在跃变点  $p_c$  (或相应的  $q_c$ ) 附近时, 振动色散关系不显示明显的标度特征。当  $q$  较大时, 波矢  $q$  已无意义, 因而可以用衰减长度  $l$  来代替, 这时色散关系满足标度关系

$$\omega(l) \propto l^{-d/2},$$

其中  $d$  为欧几里德维数,  $\bar{d}$  为谱维数。

进一步的研究指出, 这一描述的结论同样适用于自旋波的激发过程及一类紧束缚状态的电子激发过程。

### 3. 实验结果

图3表示室温条件下远红外及微波导电率  $\sigma$  或折射时间吸收系数指数  $na$  随波数的变化。为清楚地显示其标度特性, 使用了对数坐标。此外, 用布里渊散射、小角X射线衍射、小角中子衍射等实验分析方法对无序材料或疏松介质的研究都发现了类似的动力学行为。但到目前为止, 这一十分有趣的现象还未获得一个令人满意的诠释。

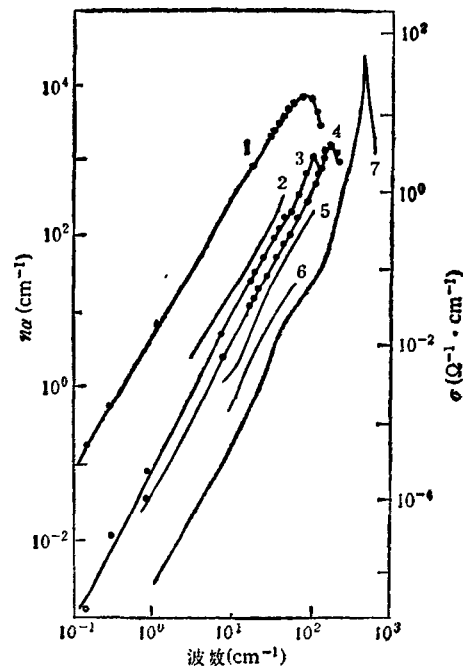


图3 动力学分形实验关系

1.  $Tl_2SeAs_2Te_2$ ; 2.  $14NO_2O-13CoO-71SiO_2$ ;
3.  $As_2Se_3$ ; 4.  $As_2S_3$ ; 5.  $GeO_2$ ; 6.  $B_2O_3$ ;
7.  $SiO_2$

## 四、无序系统的光电性能

在无序系统中, 电学参量在相变点附近跃变和标度行为, 已由渗流模型进行了较好的阐述。近期的工作是试图将这一现象与  $1/f$  噪声

联系起来, 归结为一个普适问题并进一步阐述其分形规律<sup>[11]</sup>。

### 1. 电导率和介电常数增强

近年来, 对金原子集团在薄膜中的渗流行为的非线性效应、 $1/f$  噪声和交流电导率进行了大量的研究。结果表明, 在一定的直流电流条件下, 非线性的  $I-V$  特性满足新生开路导电隧道模型, 即在一个足够强的电场中, 绝缘的通路将通过跃迁或隧道效应而导通。对噪声的测量指出, 低频噪声是由导致电导率涨落的金原子运动造成的。对 W-Re 薄膜的研究也获得了类似的结果。

介电常数在某些复合或无序材料中的增强现象一直未能得到较好的解释。最近的研究结果表明, 用分形的概念可以建立一个阐述这一问题的模型。这一模型的思想是形成不导通材料的联通分形集团, 而且不导通材料的体积比满足标度关系  $f \propto (l_1/l_2)^{3-d_t}$ , 其中  $l_1$  和  $l_2$  分别为关联长度的上下极限。根据关系式:

$$\text{Re}\epsilon^*(\omega \rightarrow 0) \sim f^{-3},$$

当  $l_2 \gg l_1$  时, 可以得到介电常数的跃变性增强。

### 2. 光学性能

在玻恩近似下, 无序集团的结构因子  $S(q)$  随散射矢量  $q$  的变化满足关系  $S(q) \sim q^{-d_t}$ 。因此, 光散射可以确定集团凝聚过程的结构因子和分形维数。对多光束散射的研究表明, 主要的效应来自集团折射的平均场指数的反射。即使是在粒子的极化率相当大的情况下 ( $d_t > 2$ ), 多光束散射也并不屏蔽散射对波矢的依赖性, 结果使得集团在几何上是“不透明”的。此外, 尽管凝聚集团是低密度的, 然而集团的连接部分显示了明显的相互作用和近邻作用。这一结果显然是不能用平均场理论来处理的。特别是对金属集团来说, 多极子的相互作用, 导致了第二个红移吸收峰的出现, 并伴随着退极化散射效应。

## 五、无序材料的辐照过程

离子束、电子束和激光束用于改变材料的

性能已获得了许多富有成效的结果, 并在许多领域内得到了应用。近年来, 在离子束辐照作用的理论和实验中, 分形这一概念都被应用于阐明一些作用过程和现象。

### 1. 级联-热峰模型

在离子与固体的碰撞级联中, 引入分形的概念以规范随机的级联过程。研究表明, 碰撞级联过程具有自相似性, 因为当势函数取

$$V(r) = Gr^{-1/m}$$

的形式时, 可导出其分形维数  $D = 1/2m$ 。考虑实际的级联过程, 可以得到随着级联演变过程相互作用势的变化。因此, 级联过程的分形维数是增加的。在热峰过程中, 当级联的分形维数与实际的物理维数 (欧几里德维数) 相等时, 可由此导出粒子运动能量的数量级。

### 2. 实验结果<sup>[12]</sup>

级联-热峰模型所讨论的过程是不依赖于具体的物质的, 这对每一个过程都适用。然而实验的观察表明, 真实物理系统在离子束辐照下, 分形行为的出现和观察是与一定的实验条件密切相关的。图 4 为 Ni-Mo 合金薄膜在液氮温度下由重离子  $Xe^+$  辐照获得的分形结构。实验发现, 这类在无序薄膜中生长的分形晶体是亚稳的, 且与薄膜在外部参数作用下内部结

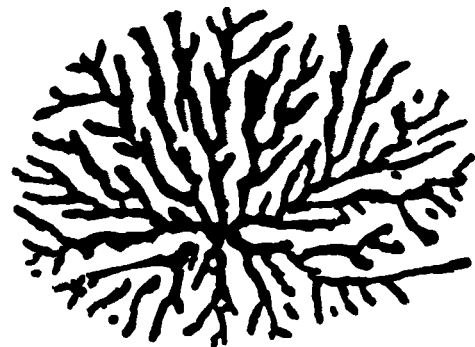


图 4 离子注入诱导的薄膜分形生长

构的变化密切相关。进一步的实验研究表明, 较低的衬底温度对于降低和抑制薄膜内部噪声具有重要作用。表面扩散促使亚稳的晶体在薄膜内成核和长大, 并在无序的基体内形成奇异

的分形结构。凝固过程中的树枝状晶体的生长,通常产生于具有强烈的晶态各向异性的环境内。晶体的这种在无序(非晶)薄膜内的分形凝聚长大行为的进一步发展,将导致无穷渗流集团的产生。研究表明,伴随着这些行为的出现,非晶薄膜的电学参量也会产生跃变。

## 六、材料的表面结构

已有许多研究表明,在一定的尺度范围内,固体表面具有分形的性质。在这些研究中,人们最关注的是对催化材料的研究。<sup>[1]</sup> 实验结果发现,不论对晶体材料还是非晶态材料,表面的特性都可以用无规的分形表面来描述。实验所测得的分形维数在2与3之间变化。尽管这一类表面是由各种不同的机制所决定的,但其几何特征满足良好的标度规律并可以用分形维数来加以规范。

进一步的研究指出,不仅仅疏松衬底和分布在其上的金属小球整体作为催化物质的表面可以用分形的研究方法加以规范,而且作为在催化反应中起主要作用的微粒的表面的亚微观结构,也具有分形的特征。一个十分有意义的结果是,用这种方法可以测定在催化的化学反应前后,催化物质的几何构形的改变。研究的结果指出,化学反应的结果使表面粗化,其分形维数(例如 Pt 的情形)从  $D = 2.14$  增加到  $D = 2.33$ 。由此可见,分形概念的引入,为复杂的催化问题提供了一个新的研究途径。目前,深入的工作正在进行之中。

## 七、材料的断裂行为

对材料断裂的形貌及其动力学的分析和研究表明,材料的断裂可以认为是一个分形的过程,并由此可以导出一些重要的参量<sup>[11]</sup>。对于均匀应力的情况,二维断裂问题的表面能在一定范围内满足标度关系  $\gamma_t = \gamma_t^0 (L/L_0)^{2-D}$ 。另有

研究表明,断裂能量(对单晶的情形而言,近似为表面能,可以由特征原子尺度、弹性模量及约化分形维数  $D^*$  表示:

$$\gamma_t = \frac{1}{2} a_0 E_t D^*$$

此外,对非单晶陶瓷的研究表明,这类陶瓷的断裂表面均可以用一个分形维数来表征。

进一步的研究工作,是试图揭示原子过程和断裂的宏观性质之间的关系。已有结果表明,在单晶近似下,分形维数  $D^*$  可以用一些微观参量来表征,即  $D^* = 2a^2/\pi^2 d_0 a_0$ 。

在许多实际的断裂过程中,宏观、裂纹是逐步传递的。在裂纹前面的局域材料中,包含了许多微裂纹和空位等。基于这一事实,并假定裂纹的传递是由于裂纹前沿疏松结构的断裂造成的,则可以得到这一过程的分形描述。

以上所述仅仅是分形这一概念在无序系统研究中的部分应用。分形概念的引入导致了对无序系统的几何和动力学过程的规范和再认识。这些大量的现象促进了对无序材料(系统)的结构和性能的研究。越来越多的研究成果显示了它的前景和生命力。

- [1] B. B. Mandelbrot, *The fractal Geometry of Nature*, Freeman, San Francisco, (1983).
- [2] H. E. Stanley and N. Ostrowsky eds., *On Growth and Form*, Martinus Nijhoff, The Hague, (1985).
- [3] F. F. Family and D. P. Landau eds., *Kinetics of Aggregation and Gelation*, North-Holland, Amsterdam, (1984).
- [4] L. Pietronero and E. Tosatti eds., *Fractals in Physics*, North-Holland, Amsterdam, (1986).
- [5] H. J. Herrmann, *Phys. Rep.*, **136**(1986), 153.
- [6] A. J. Hurd et al., eds, *Fractal Aspects of Materials*, MRS., **EA-13**, (1987).
- [7] T. A. Witten and L. M. Sander, *Phys. Rev. Lett.*, **47** (1981), 1400; *Phys. Rev.*, **B27**(1983), 5686.
- [8] G. Deutscher and Y. Lareath, *Physica*, **140A**(1986), 191.
- [9] 村三和郎, *固体物理(日)*, **21**(1986), 227.
- [10] R. Orbach, *J. Stat. Phys.*, **36**(1984), 735.
- [11] Y. Gefen et al., *Phys. Rev. Lett.*, **57**(1986), 3097.
- [12] L. J. Huang et al., *J. Appl. Phys.*, **63**(1988), 2879.
- [13] D. Romen et al., *Phys. Rev. Lett.*, **57**(1986), 2553.
- [14] B. B. Mandelbrot et al., *Nature*, **308**(1984), 721.