等大圆片二维随机堆积的配位数*

董 麒　　叶大年

(中国科学院地质研究所，北京 100029)

关键词　等大圆片、随机堆积、配位数

颗粒在三维空间中的随机堆积是物理学家、化学家、沉积学家、材料科学家以及数学家关注了百余年的问题，研究集中于堆积密度(孔隙度)、配位数以及颗粒形态和比重对堆积的影响等方面[1-7]. 无孔隙的等粒结构金属和结晶岩石，在切面上颗粒界限有互为 120° 角的“三叉点”，每个颗粒与六个颗粒相邻(即配位数为6)．为了解释这种结构，科学家们提出了 Voronoi 多面体的概念．Dodds 试图用圆片二维随机堆积的模型来证明上述结论，其模型理论上配位数为 6，而实验结果平均配位数却是 4.72[8]. 本文作者提出了等大圆片二维随机堆积的概率模型，配位数的计算值与实验值符合得很好，平均配位数为 4.81 (当允许微小偏差时，平均配位数是 5.00)．半径比值对不等大圆片二维随机堆积的平均配位数几乎没有影响，平均配位数的计算值与实验值依旧符合得很好． 等大和不等大圆片堆积的数学模型论证方法大同小异．由于篇幅原因，本文限于讨论等大圆片的情况．

1 概率模型

等大圆片在二维平面随机堆积时，任选一个圆片作为中心圆片，则其周围至少会有四个圆片与之相切，中心圆片的配位数至少为四(图 1)． 当只有三个圆片与中心圆片相切时 (图 2)，相切圆片之间的夹角 $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ 中至少有一个等于或大于 $(360° - 3 \times 60°) \div 3 = 60°$，这样至少还会有一个圆片堆积在中心圆片边上并与之相切，即中心圆片的配位数至少是四．本

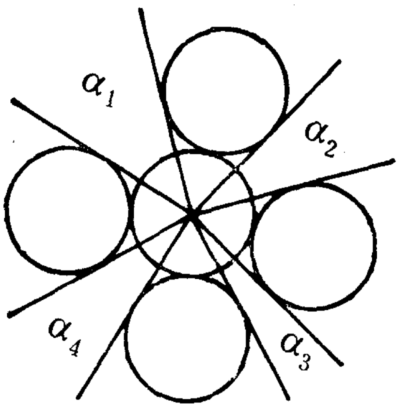

图 1　中心圆片配位数为四

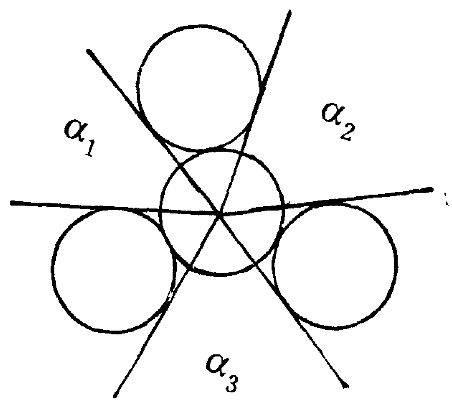

图 2　中心圆片配位数为三

1992-10-31 收稿，1993-02-28 收修改稿．
* 国家自然科学基金资助项目．

文中的配位数是指与中心圆片相切的圆片的总和.

等大圆片随机堆积时,中心圆片周围至少有四个圆片与之相切(图1),则有 $\alpha_1+\alpha_2+\alpha_3+\alpha_4=120°$. 因为是随机任意堆积,四个相切圆片可以沿中心圆片的外沿随机任意滑动,相切圆片彼此之间的夹角 $\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3,\alpha_4$ 都可分别在 0—120° 之间随机任意变动.

$\alpha_1 \geqslant 60°$ 的几率是 $P_1=0.5$,即在 α_1 之间可能堆积第五个与中心圆片相切的配位圆片的几率是 0.5,此时 $\alpha_2+\alpha_3+\alpha_4<60°$.

$\alpha_1<60°$,而 $\alpha_2 \geqslant 60°$ 的几率 P_2

$$P_2=\left\{\int_0^{60}\frac{60-\alpha}{120-\alpha}\mathrm{d}\alpha\right\}\div 60\times(1-P_1)$$
$$=0.3069\times 0.5=0.1534,\ (\alpha=\alpha_1),$$

其中 $\left\{\int_0^{60}\frac{60-\alpha}{120-\alpha}\mathrm{d}\alpha\right\}\div 60$ 表示,当 α_1 在0—60°之间随机任意变动时,$\alpha_2 \geqslant 60°$ 的几率. 在 α_2 之间堆积第五个与中心圆片相切的配位圆片的几率 $P_2=0.1534$.

$\alpha_1<60°,\alpha_2<60°$,而 $\alpha_3 \geqslant 60°$ 的几率 P_3

$$P_3=\left\{\int_0^{60}\frac{60-\alpha}{120-\alpha}\mathrm{d}\alpha\right\}\div 60\times(1-P_1-P_2)=0.1064,\ (\alpha=\alpha_1+\alpha_2),$$

即在 α_3 之间堆积第五个与中心圆片相切的配位圆片的几率 $P_3=0.1064$.

$\alpha_1<60°,\alpha_2<60°,\alpha_3<60°$,而 $\alpha_4 \geqslant 60°$ 的几率 P_4

$$P_4=\left\{\int_0^{60}\frac{60-\alpha}{120-\alpha}\mathrm{d}\alpha\right\}\div 60\times(1-P_1-P_2-P_3)=0.0737,\ \alpha=\alpha_1+\alpha_2+\alpha_3,$$

即在 α_4 之间堆积第五个与中心圆片相切的配位圆片的几率 $P_4=0.0737$.

要使中心圆片周围同时堆积六个与之相切的圆片,即中心圆片的配位数达到六,当相切圆片中的任何一个确定下来,其余五个相切圆片的中心则必在一些特定的数学点上,其概率为零,所以,等大圆片随机堆积时,出现配位数为六的情况的概率认为是零.

综上,等大圆片在二维平面随机堆积时,出现五次配位的总几率是 $P_1+P_2+P_3+P_4=0.8335$,出现四次配位的总几率是 0.1665,总体平均配位数

$$\overline{CN}=0.8335\times 5+0.1665\times 4=4.8335.$$

但是,在等大圆片的随机堆积实验中,偶尔会发现有些中心圆片的配位数能达到六. 如果在模型中允许少许偏差,即把一些近似于相切的圆片看作相切配位圆片,就可推算出配位数为六的几率. 当允许每一个配位相切圆片有 10° 的偏差,这时仍然能保证在任何堆积情况下,中心圆片的配位数不会超过六. 在这样一个允许偏差的模型中,等大圆片随机堆积时,出现配位数为四的几率为 0.1387;五次配位的几率为 0.7224;六次配位的几率为 0.1389,随机堆积圆片的平均配位数是 $0.1387\times 4+0.7224\times 5+0.1389\times 6=5.0000$.

2 随机堆积实验结果

堆积实验所用的等大圆片是伍分和贰分硬币,实验是在光滑的平板玻璃上进行的,不给固定的边界限制,以数十个硬币为一组往一起随机堆,然后,逐个数出每一个硬币的真实配位数和允许 10° 偏差的配位数. 实验的重复是由不同的人独立完成的,各个人的实验结果都很相近(表1).

随机堆积实验中的等大圆片有时会出现数个圆片互相"架空"的情况(图3),这是硬币边

表 1 等大圆片随机堆积的各种配位数个数和平均配位数

真实相切的配位数统计				允许 10° 偏差的配位数统计			
$CN=4$ 圆片个数	$CN=5$ 圆片个数	$CN=6$ 圆片个数	平均配位数	$CN=4$ 圆片个数	$CN=5$ 圆片个数	$CN=6$ 圆片个数	平均配位数
28	60	13	4.8515	18	68	12	4.9387
26	86	8	4.8500	6	122	3	4.9771
24	101	3	4.8359	24	73	31	5.0546
31	108	2	4.7943	20	89	28	5.0584
39	118	3	4.7750	20	88	28	5.0588
28	101	7	4.8456	33	99	35	5.0120
35	110	8	4.8235	20	105	28	5.0523
31	104	2	4.7883	31	124	38	5.0363
35	90	4	4.7597	28	125	38	5.0523
27	112	3	4.8310	44	130	42	4.9907
34	99	3	4.7721	37	131	35	4.9901
37	129	3	4.7988				
28	123	2	4.8301				
52	121	10	4.7705				
47	130	9	4.7957				
53	137	13	4.8030				
47	127	21	4.8418				
$\overline{CN}=4.8098\pm0.0307$				$\overline{CN}=5.0201\pm0.0391$			

上带“齿”互相卡住的结果，而在真实的等大圆片随机堆积时，并不会出现“架空”的现象．表 1 中对于“架空”的硬币的配位数都不作统计．

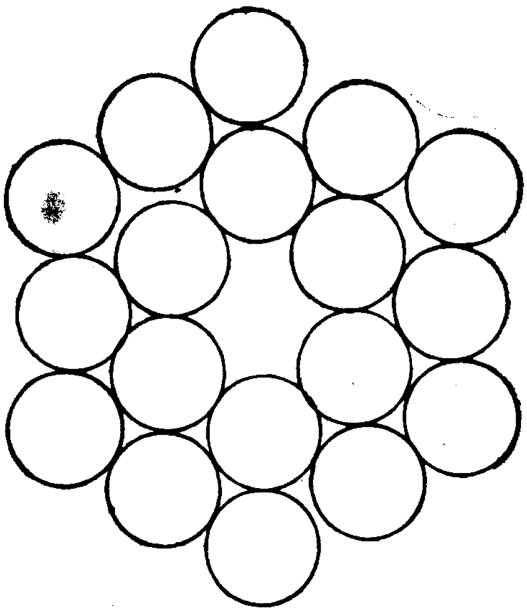

图 3 圆片之间互相“架空”

3 讨 论

圆片二维随机堆积的平均配位数是 5，而结晶岩石和金属切片中颗粒的平均配位数是 6，因此不能将两者等同对待．前者是有孔隙的堆积，后者是无孔隙堆积．犹如三维颗粒有孔隙的最密随机堆积平均配位数为 7—8，而有 Voronoi 多面体的无孔隙堆积配位数却是 13—14 的道理一样．

众所周知，晶体是不允许有五次对称存在的，新近只在准晶体中才发现五次对称现象．而在生物中五次对称是普遍存在的，有些病毒在显微镜下呈现三角二十面体的对称(对称型 532)，许多花瓣也呈现五次对称．许多高级动物也有许多近似五次对称信息，如人的手、脚五指(趾)等．著名结晶学家 Белов 曾指出，许多有机物是以其五次对称抗拒“石化”(结晶)而维持其活性的[9]．我们的实验和理论分析表明，大分子二维随机堆积有统计五次对称的性质，同样可以推论链状分子的一维随机堆积也会有统计五次对称的性质．因此，作者大胆

推测动植物中普遍存在近似五次对称与此有关.

参 考 文 献

[1] Bernal, J. D., *Nature*, 1959, **183**: 141—143.
[2] Bernal, J. D., *Nature*,1960, **185**: 68—70.
[3] David, S. G., *Nature*, 1960, **188**: 908—909.
[4] Keishi, G.,Finney, J. L., *Nature*, 1974, **252**: 202—205.
[5] 叶大年,地质科学,1990,(2): 127—136.
[6] 叶大年,地质科学,1990,(4): 324—331.
[7] 董麒、叶大年,科学通报,1993,**38**(1): 54—57.
[8] Dodds, J. A., *Nature*, 1975, **256**: 187—189.
[9] Белов, Н. В., *Минерал Сборник*, Львов Геол. о-ва, 1962, **16**: 41—42.