

Kutatási végbeszámoló

OTKA K 73776 sz. pályázathoz

Cím: Habok dinamikus viselkedésének törvényszerűségei, szimmetria tulajdonságok

A beszámolót készítette: Zsoldos Ibolya témavezető

1. Rövid összegzés

A pályázat keretében 17 nyomtatásban is megjelent közlemény született a pályázat támogatásának feltüntetésével, ezek összetétele:

| | |
|--|-------|
| Angol nyelvű, külföldön megjelent, impakt faktoros cikk: | 4 db, |
| Angol nyelvű, külföldön megjelent, lektorált cikk: | 3 db, |
| Angol nyelvű, Magyarországon megjelent konferenciatick: | 3 db, |
| Angol nyelvű, külföldön megjelent konferenciatick: | 2 db, |
| Magyar nyelvű, lektorált cikk: | 3 db, |
| PhD disszertáció, magyar nyelvű | 2 db |

Az összesen megszerzett impakt faktor: 6,838.

A pályázat keretében született kutatási eredményeket kivétel nélkül sikerült leközzölni tudományos folyóiratokban, konferenciákon, PhD disszertációban.

A következő fejezetben az egyes témák részletesebb kifejtését mutatom. Mivel az összes közleményünk nyilvános, ezért egy viszonylag szűkebb leírást adok a témákról. Szükség esetén a publikációk elektronikus vagy nyomtatott verzióját (a nyilvános elérhetőség mellett) mi magunk is rendelkezésre bocsátjuk.

2. Eredmények kifejtése

2.1. Habok rekonstrukciós algoritmus

Habok 3D rendezetlen szerkezetét kísérleti úton nemcsak azért nehézkes vizsgálni, mert rendkívül nagy mennyiségű, rendezetlen adatsokaság kiértékelését kell elvégezni, hanem azért is, mert a nedves habok esetében a különböző képalkotó eljárásokkal (CT, MRI) nyert adathalmaz hiányos: csak a sejtmembránok csatlakozó éleiről kapunk képpontokat, a membránok felületei nem látszanak a felvételeken.

A hiányos adathalmazból kiindulva, a Potts-modellen alapuló algoritmust készítettünk a sejtek felületeinek rekonstrukciójára. A rekonstrukciós algoritmusban figyelembe vettük a sejtek közötti diffúzió fizikai összefüggéseit és az energiaminimumra való törekvés elvét.

Megmutattuk, hogy az új algoritmussal reális módon rekonstruálható a sejtszerek sokasága adott korlátok között: amíg a csatlakozó sejtmembránok szögei a Plateau-törvény által meghatározott mértékűek. Mivel azonban a nedves habok esetében a Plateau-törvény érvényességét általánosan igazolták, így erre az esetre az algoritmus általános alkalmazhatóságát tudtuk kimondani.

2.2. Síkbeli alakzatok szimmetria és hasonlósági tulajdonságai

Szimmetria felismerésre többféle módszer található a szakirodalomban, amelyek legtöbbször a kontúron lévő pontpárok szakaszfelező merőlegeseinek, vagy a kontúrintézők szögeinek az összehasonlításával keresik a szimmetriatengelyeket. Általában nem használják ki azt a tényt, hogy a síkbeli alakzatok szimmetriatengelyei áthaladnak a súlyponton. Ezen a tételel alapszik a szimmetria-diagram definíciója, amelynek lépései:

- Az alakzat kontúrjának megadása (pl. digitalizált ponthalmaz koordinátái, pontok sokasága a kontúron).
- Az alakzat súlypontján átmenő egyenesekre egy-egy 0 és 1 közötti számot ($0 < Z \leq 1$) határozunk meg. A Z paramétert úgy definiáltuk, hogy $Z=1$, ha az egyenes éppen szimmetriatengely, és minél jobban közelít Z értéke 1-hez, annál jobban közelíti az egyenes a pontos szimmetriatengelyt.
- A súlyponton átmenő függőleges egyenesnek különböző szögekkel ($0 < \alpha < 180^\circ$) való elforgatásai esetén a kapott Z értékeket diagramban ábrázoljuk. Az így kapott $Z-\alpha$ diagramot neveztük szimmetria-diagramnak.

Megmutattuk, hogy a szimmetria-diagram segítségével tetszőlegesen sok zárt görbével határolt síkbeli alakzatok tulajdonságai vizsgálhatók. A Z paraméter alkalmas a közelítő szimmetriák esetén a közelítés mértékének a számszerű megadására is.

Megmutattuk, továbbá, hogy függetlenül attól, hogy a vizsgált alakzat szimmetrikus-e vagy sem, a szimmetria-diagram a síkbeli alakzatoknak egyedi alakjellemzője. Geometriailag hasonló, de különböző méretű alakzatok szimmetria-diagramja azonos, a közelítőleg hasonló alakzatok szimmetria-diagramja pedig közel azonos. Ezt a tulajdonság alkalmas arra, hogy alak szerinti válogatásra használjuk a szimmetria-diagramot. Bontott kötőelemek sokaságának példáján demonstráltuk a különböző méretű, de hasonló alakzatok szétválogatására való alkalmasságot. PhD értekezés születt a témában.

2.3. Nanoporok őrlési folyamatának energetikai optimalizálása

Nanoporok őrlésének az egyik leghatékonyabb módszere a golyós bolygómalomban való őrlés. A mechanizmus a következőképpen működik:

- egy körasztalon két tégelyt helyezünk el excentrikusan,
- a körasztal és a tégelyek egymástól függetlenül, változtatható fordulatszámmal forgathatók,
- a tégelyekbe helyezett porokat a tégelyekbe helyezett, kaotikusan mozgó őrlőgolyók aprítják.

A Bay Zoltán Anyagtudományi Kutatóintézetben korábban végzett kísérletek szerint ez a mechanizmus alkalmas nanoszemcsés porok előállítására.

Ebben az OTKA projektben elvégeztük a mechanizmus kinetikai modellezését és a kiértékelést. Azt kaptuk, hogy az asztal és a tégelyek eltérő fordulatszámon történő forgatásainál a golyók pályája becsülhető.

A golyók pályájából számítottuk a tégely falába való ütközések energiáját, amelyről feltételeztük, hogy ez maga az őrlésre fordított energia. Megmutattuk, hogy a különböző fordulatszámok, áttételek és geometriai méretek függvényében az őrlési energia tág határok között változtatható, és ezekkel az őrlési paraméterekkel szabályozható.

Az eredmények azért jelentősek, mert ilyen módon szabályozhatóvá válik az őrlési folyamat a különböző anyagok aprításának energiaigényéhez mérten. Továbbá tervezhetővé válik különböző szilárd fázisú kémiai reakciók energiaigényének biztosítása együtt őrlött, különböző komponensek esetében, vagy a nem kívánatos kémiai reakciók tervezetten elkerülhetőek.

2.4. Szén nanoszerkezetek modellezése és szimulációi

Szén nanoszerkezetek húzásszimulációjára algoritmust készítettünk. Az algoritmus működését szén nanocső hálózatok példáján demonstráltuk. Az új algoritmus azért jelentős, mert nanoszerkezetek mechanikai vizsgálatára ma még vagy nincs lehetőség, vagy rendkívül korlátozott és költséges kísérleti módszerekkel lehet találkozni. A szén nanoszerkezeten való demonstrálás azért fontos, mert a szén nanoszerkezetek a szilárd testek körében a legerősebb anyagok, a szimuláció segítségével a szilárdsági tulajdonságok jól becsülhetőek.

Szén nanocső elágazások elektromos viselkedését vizsgáltuk elméleti úton. Azt találtuk, hogy a viselkedés erősen függ nemcsak a csatlakozó csöveknek, hanem a csatlakozásnál található atomok kapcsolódásának a topológiájától is.

Különböző típusú szén nanocső Y-elágazásokból mint elemekből nanoáramkör alapkapsolások lehetséges modelljeit építettük fel. A modelleket egyenként optimalizáltuk, olyan módon, hogy a lehető legstabilabb szerkezeteket alakítottuk ki. Megmutattuk, hogy az ún. két-, három- és több ágú nanokörök stabil szerkezetei felépíthetők szén nanocső Y-elágazásokból úgy, hogy a csomópontokat aszimmetrikus elágazásokkal, az egyenes szakaszokat megfelelő könyökökkel helyettesítjük.