

KUTATÁSI JELENTÉS

Pályázat: OTKA T042717

Futamidő: 2003-2005

Cím: Véletlen struktúrákban lejátszódó dinamikus folyamatok

Témavezető: Zsoldos Ibolya PhD egyetemi docens,
Szent István Egyetem, Gépészmérnöki Kar

Jelen kutatási projekt témája elméleti, alapkutatás jellegű. Az alábbiakban tömören felsorolt eredmények részletes leírása nagyrészt már nyomtatásban is megjelent a különböző publikációkban, ezért levélben, postai úton elküldjük azok másolatait, és itt csak a publikációk megjelölését tüntetjük fel.

A téma jelentősége, eredete, cél:

Számtalan olyan anyagfajtáról tudunk, ahol a szerkezetet nem jellemzi geometriai rend, nincs rendezett kristályos struktúra. Az ilyen szerkezetek nagyrészt véletlen folyamatok eredményeképpen alakulnak ki. Pl:

- Polikristályos ötvözetek szemcseszerkezete,
- Üvegfémek atomos szerkezete,
- Porkohászati termékek szemcseszerkezete,
- Granulátumok,
- habok
- Ferromágneses anyagok doménszerkezete
- Biológiai szövetek

A rendezetlen szerkezetek síkmetszeteinek (2D), csiszolatainak jellemzésével már meglehetősen régen szokás foglalkozni. Euler törvénye több mint száz éve ismert. Ötvözetek csiszolatait is szokás a szerkezet finomsága szerint jellemezni, amióta fémmikroszkóp segítségével megjeleníthető a metszetkép. A múlt század hetvenes éveitől kezdve azonban a kutatók egymás után közölték, hogy újabb topológiai és geometriai törvényeket sikerült felismerni, mint például a Weaire-törvény, Aboav-törvény, Lewis-törvény, rádiusztörvény, szögtörvény. A háromdimenziós (3D) szerkezetek kísérleti vizsgálata még ma is nagyon nehézkes. Számítógéppel, mesterségesen előállított rendezetlen struktúrák (Voronoi rendszerek, Ising model, Potts model stb) vizsgálatai alapján csak a 90-es évek közepétől sikerült kiépíteni a hasonló rendszerű topológiai ismereteket. A háromdimenziós törvények megfogalmazásában már a kutatócsoportunk nevéhez is fűződtek eredmények.

Ebben a kutatási projektben a következő célokat tűztük ki:

- A fent említett topológiai ismeretanyag csak trivalens rendszerekre volt kidolgozva. (Trivalens rendszerekben a struktúra 2D esetben konvex poligonhálózat, illetve 3D esetben konvex poliéderhálózat, ahol mindig 3 él illetve oldallap találkozik egy csúciban, illetve egy élen.) Az első célunk az volt, hogy az ismeretanyag egy részét általánosítsuk arra az esetre, amikor semmilyen geometriai kényszert nem mondunk ki a szerkezetre. Különböző anyagok metszetképei mutatnak ugyanis bőven eltérést a trivalens esettől elsősorban a biológiai sejtek, szövetek, a szecska, különböző terményhalmazok, kompozitok, kerámiák.
- A másik cél volt az új topológiai ismeretek alkalmazása konkrét anyagok esetében.

Eredmények:

- 1. Új topológiai ismeretek:** Kétdimenziós trivalens sejtrendszerek esetét általánosítottuk úgy, hogy semmilyen geometriai kényszerrel nem szűkítettük a vizsgálandó rendszerek halmazát. Az általános sejtrendszerben egy sejt lehet akár többszörösen összefüggő, konkáv alakzat is, a határoló élek tetszőlegesek, az egy csúcsban összefutó élek száma is tetszőleges. A trivalens rendszerek halmaza tehát részhalmaza az általános rendszerek halmazának. Az új eredmények ebben a témakörben:
 - Sikerült megmutatni, hogy az általános esetben is pontosan érvényes az Euler-és a Weaire-törvény, valamint jó közelítést ad az Aboav-törvény is.
 - Megmutattuk, hogy az Aboav-paraméternek (topológiai invariáns) határozott tartalmi jelentése van: a sejtrendszerben domináló kollektív sejt kapcsolódások típusát és mennyiségét mutatja meg.
 - Meghatároztuk a jellemző topológiai invariánsok (átlagos koordinációs szám, második momentum, Aboav-paraméter) szélsőértékeit trivalens és általános esetre is.

A témában született publikációk (szögletes zárójelben a sorszámot jelöljük a publikációs listánkból):

- **2 nemzetközi folyóiratcikk** [1], [10]
- **1 nemzetközi konferencia előadás:** 1th International Conference on Experiments/Process/System Modelling/Simulation/Optimization, Athens, 2005, [6]
- **1 hazai konferencia előadás:** MTA AMB XVIII. Kutatási és Fejlesztési Tanácskozás, Gödöllő, 2004, [5].

2. Konkrét anyagok vizsgálata:

- a. Szén nanostruktúrák:** A szén nanostruktúrák (fullerének, grafén, nanocsövek) atomos szerkezetei tulajdonképpen háromdimenziós felületekre kifeszített trivalens poligonhálózatok. A hálózatok kiépülésének szigorú topológiai szabályai vannak. Jelen projekt eredményeinek kidolgozásánál új topológiai szabályok észrevételezéséből indultunk ki. Az új eredmények:
 - Általános módszert mutattunk tetszőleges számú, típusú (cikk-cakk, karosszék) és méretű nanocsőből álló csatlakozások modelljeinek szerkesztésére. A rendszert úgy építettük fel, hogy a csatlakozásokban bármelyik nanocső helyére beépíthető az ellentétes típusú (vezető vagy félvezető) párja. Számításokkal igazoltuk az új struktúrák stabilitását.
 - Megmutattuk, hogy bármilyen szén nanostruktúrához csatlakoztathatók tetszőleges típusú nanocsövek.
 - Topológiai transzformációk (Stone-Wales kémiai kötéscserék) alkalmazásával példát mutattunk a nanocsövek egyfajta dinamikus viselkedésére.Azért lehetnek jelentősek az eredmények, mert ismeretes, hogy a különböző típusú nanocsövek elektromosan másképpen viselkednek (vezetők illetve félvezetők). Ellentétes típusú csövekből álló könyökszerű csatlakozáson már mértek diódaszerű viselkedést, az Y-elágazáson pedig tranzistorhoz hasonló karakterisztikát. A nanocső

csatlakozások rendszere a legújabb generációs félvezető eszközök alapja lehet, amennyiben sikerül a kísérleti hátteret is kiépíteni ehhez a területhez.

A témában született publikációk:

- **2 nemzetközi folyóiratcikk** [2], [12],
- **1 nemzetközi folyóiratcikk**, amely a következő konferencián bemutatott előadásunk anyagából készült: 15th European Conference on Diamond, Diamond-Like Materials, Carbon Nanotubes, Riva Del Garda, 2004, [3],
- **1 nemzetközi folyóiratcikk**, amely a következő konferencián bemutatott előadásunk anyagából készült: V. Országos Anyagtudományi Konferencia, Balatonfüred, 2005. [11],
- **1 nemzetközi konferencia előadás meghívott előadóként**: European partnering days of science and industry, Industrylink 2004, Poznan, 2004, [4],
- **1 nemzetközi konferencia absztrakt**: European Congress on Advanced Materials and Processes, Prague, 2005, [9],
- **1 hazai konferencia előadás**: MTA Agrár-Műszaki Bizottság XIX. Kutatási és Fejlesztési Tanácskozás, Gödöllő, 2005, [7].

A cikkeknek máris új hivatkozásai vannak, és ebben a témában a témavezetőt felkérték opponensi munkára az amerikai Journal of Nanoscience and Technology folyóirathoz.

b. Fémüveg ötvözetek kétalkotós esetére számítógépes programot készítettünk a szakítószilárdság elméleti úton történő becslésére. Az algoritmus dinamikus topológiai folyamat szimulációjára épül.

A témában született publikációk:

- **1 nemzetközi folyóiratcikk**, amely a következő konferencián bemutatott előadásunk anyagából készült: 1th International Meeting on Applied Physics, Badajoz, 2003, [8]

c. Kerámiák nanoszemcsés szerkezetének kialakítása céljából részt vállaltunk egy új kutatási projektben, a Bay Zoltán Anyagtudományi Intézetben, Dr. Csanády Andrásné vezetése alatt. Ezen az új területen egyelőre a kezdeti lépések történtek meg. Az első mechanikai őrlési kísérleti eredmények sikeresek: a nanoszemcsés szerkezet kialakíthatóságát sikerült bizonyítani. Célok: optimális őrlési paraméterek meghatározása energetikai szempontok szerint, szilárd fázisú reakciók végbemenetelének kimutatása a szerkezetben. Publikációk megjelenése a közeljövőben várható.