

Háromdimenziós sejtrendszerek topológiai összefüggései

*Zsoldos I., Szász A.

Háromdimenziós (3D) Voronoi sejtrendszerek előállítására számítógépes szimulációt készítettünk. Tisztán véletlenszerű elrendeződések energetikailag optimális egyensúlyi helyzetének keresésére többféle ún. relaxációs módszert vezetünk be. Figyelembe vettük, hogy a folyamat ún. geometriai frusztráció hatása alatt megy végbe. Megvizsgáltuk a legjellemzőbb topológiai összefüggések - Aboav, Lewis törvények - jellegzetességeit. Elsőként felírtuk a 3D rendszerek szögekre vonatkozó összefüggését és a rádiusz törvényt.

Bevezetés

Sejtrendszerek vizsgálata egymástól egészen távol álló struktúrák együttes megismerését teszi lehetővé. Nem rendezett sejtstruktúrák például: metallográfiában az ötvözetek szemcseszerkezete, a fémüvegek atomszerkezete, porkohászati termékek, darabolt anyagok (pl. szecska), habok, geológiai kőzetmintázatok, geográfiai területfelosztások, repedésmintázatok és a legtöbb példát a biológiai szövetek közül lehet említeni. Az ilyen anyagok és az azokat formáló erők különbözősége ellenére geometriai struktúrájuk hasonló: egy poliéderekből álló mintázat jellemző rájuk, ahol a poliéderek rések és átfedések nélkül töltik ki a teret. A poliédereket sejteknek, a mintázatot sejtrendszernek nevezzük.

Zsoldos Ibolya Ph.D.hallgató
Dr.Szász András egyetemi magántanár
Gödöllői Agrártudományi Egyetem
Mezőgazdasági Gépészmérnöki Kar

Topológiai vizsgálatok leírására a következő mennyiségek használata terjedt el:

- egy sejt oldallapjainak száma: F
- egy adott oldallap oldaléleinek száma: n
- oldalélek száma a sejtrendszerben: E
- csúcsok száma a sejtrendszerben: V
- sejtek száma: P
- F oldalú sejtek közvetlen szomszédjainak átlagos oldallapszáma: $m(F)$
- átlagos oldallapszám a sejtrendszerben: $\langle F \rangle$
- F oldalú sejtek aránya a rendszerben: $B(F)$
- Második momentum: $\mu_2 = \sum_{F \geq 4} B(F)(F - \langle F \rangle)^2$

3D sejtrendszerekre az alábbi topológiai törvényeket írták fel, amelyeknek egyetlen feltétele, hogy a rendszerben egy csúcsban mindig 4 él találkozik:

1.) Euler törvénye [1]:

$$F - E + V - P = 1 \quad (1)$$

Euler törvényének következménye [2], [3], [4]:

$$\langle F \rangle = \frac{12}{6 - \langle n \rangle} \quad (2)$$

ahol $\langle n \rangle$ a poliéderek oldallapjainak átlagos oldalélszáma a rendszerben. 3D-ben tehát $\langle F \rangle$ értéke változó, ellentétben a 2D rendszerekkel, ahol a poligon rendszer átlagos oldalélszáma mindig 6.

2.) 3D rendszerre vonatkozó Aboav törvény [5], [6]:

$$m(F) = \langle F \rangle - a + \frac{\langle F \rangle + \mu_2}{F} \quad (3)$$

ahol 'a' egy rendszer esetén állandó, de rendszerenként más értéket vesz fel, úgy mint $\langle F \rangle$ és μ_2 .

3.) Metrikus összefüggések [6]:

$$\begin{aligned} V(F) &\approx V_0 \left(1 + \frac{F - \langle F \rangle}{K_V} \right) \\ A(F) &\approx A_0 \left(1 + \frac{F - \langle F \rangle}{K_A} \right) \\ L(F) &\approx L_0 \left(1 + \frac{F - \langle F \rangle}{K_L} \right) \end{aligned} \quad (4)$$

ahol $V(F)$, $A(F)$, $L(F)$ az F oldalú sejtek átlagos térfogata, felszíne és élhossza, V_0 , A_0 , L_0 az átlagos sejtérfogat, felület és élhossz, K_V , K_A és K_L rendszer paraméterek.

A (3) és (4) összefüggéseket Oger és Fortes intuitív módon – kétdimenziós rendszerek törvényeiből származtatva – írták fel, majd mesterségesen generált sejtrendszerek számolási eredményeivel támasztották alá az érvényességet [5], [6]. Kísérleti igazolásokat 3D-ben nem találtunk. Ezzel ellentétben kétdimenziós sejtrendszerek esetében számos elméleti és kísérleti eredmény igazolja a megfelelő topológiai törvények érvényességét [7]–[19]. Kétdimenziós struktúrákra Dubertret, Rivier és Peshkin már felírták távoli sejtek korrelációs összefüggéseit is [20].

Ebben a cikkben Voronoi sejtrendszerek csoportjára megmutatjuk, hogyan kerül egy tisztán véletlen elrendeződés az energetikailag optimális egyensúlyi helyzetbe, és a folyamat során mit mondhatunk a legfontosabb topológiai törvények érvényességéről. Elsőként írjuk fel az oldallap-szögekre vonatkozó összefüggést és a rádiusz törvényt 3D sejtrendszerekre. A következő két fejezetben a számolási algoritmust és a számolási eredményeket mutatjuk be.

Az energetikai optimum megközelítése

Valóságos háromdimenziós sejtrendszerek kísérleti vizsgálata jelenleg még nem megoldott. Topológiai vizsgálatok céljára mesterséges rendszereket állítottunk elő. Számítógépes szimuláció alapjául Voronoi algoritmusát választottuk, amelynek lépései:

- pontokat (sejtmagokat) helyezünk el egy kijelölt térrészben,
- egy pont körül kiszámítjuk a Voronoi poliéder (sejt) csúcsait, amelyek a pont és a szomszédos pontok között páronként kifeszített felezősíkok metszéspontjai.

Lerögzített pontok (sejtmagok) esetén a Voronoi algoritmus egyértelmű. A pontok

elhelyezésére többféle stratégiát konstruáltunk. Az első stratégia tisztán véletlen elhelyezés volt. A további esetekben sejtek közötti kölcsönhatásokat, ezzel együtt az energiaminimumra való törekvés elvét vettük figyelembe többféle módon. Ezeket a későbbiekben relaxációs módszereknek, az általuk generált rendszereket pedig relaxált rendszereknek fogjuk nevezni.

A stratégiák:

Random módszer: Első lépésben kiindultunk egy tisztán véletlen elrendezésből.

A következő két stratégiánál a tisztán véletlen elrendezést egy feltétel, vagy eljárás megadásával javítottuk, ahol merev gömbök középpontjainak képzeltük a sejtmagokat.

Merev gömb módszer: véletlen kijelölés mellett nem engedjük meg, hogy a sejtmagok egy adott távolságnál közelebb kerüljenek egymáshoz. A későbbiekben ennek a módszernek két változatára hivatkozunk: merev gömb1 esetben a megengedett távolság nagyobb, és merev gömb2 esetben a megengedett távolság kisebb.

Súlypont módszer: kezdetben tisztán véletlen elrendezésben a sejtmagokat áthelyeztük a súlypontba, ezután újra számítottuk a poliédereket, és ezt az eljárást megismételtük néhány iterációs lépésen keresztül.

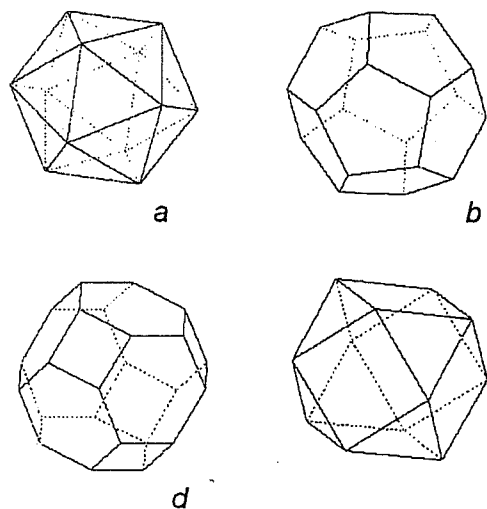
Végül az utolsó két stratégiánál az energiaminimumra való törekvés mellett figyelembe vettük azt is, hogy 3D-ben a szimulált folyamat ún. geometriai frusztráció hatása alatt megy végbe. A geometriai frusztráció elmélete atomos rendszerek vizsgálatából ered [2], [4], [21], [22].

Atomos struktúrák geometriai duálja a Voronoi, más néven Wiegner – Seitz sejtek rendszere. Ahány közvetlen szomszédja van egy atomnak (koordinációs szám), annyi oldallapja van Voronoi sejtjének és fordítva, tehát Voronoi sejtrendszerek vizsgálata ekvivalens atomos rendszerek vizsgálatával. Az atomokból álló rendszer két kényszernek kell, hogy eleget tegyen, ezek a térkitöltési és az energetikai kényszer.

Nagy atomszám esetén a *térkitöltési kényszer* dominál, ilyenkor azt mondjuk, hogy

a rendszerben *hosszú távú rend* (LRO) uralkodik. Ennek legismertebb megjelenési formái a térközepes köbös BCC, felületközepes köbös FCC és a hexagonális HCP rácsszerkezetek. Jellemzőjük, hogy egy elemi cella párhuzamos eltolásával leírható az egész rendszer szerkezete.

Kis atomszám esetén az *energetikai kényszer* dominál, azt mondjuk, hogy a rendszerben *rövid távú rend* (SRO) uralkodik. Az atomok tetraédes klaszterekbe rendeződnek. Legjellemzőbb koordinációs poliéder az ikozaéder, amelyet egy középpontban lévő atom 12 közvetlen szomszédjával alkot, és amely 20 db közös csúcson (a középpontban) található tetraéderből áll, az atomokat itt pontszerűnek tekintjük. Energetikai számításokkal igazolták, hogy az atomok körüli első koordinációs poliéderek közül legstabilabb az ikozaéder [2]. Ikozaéderek jelenlétét ötvözetekben kimutatták tömegspektroszkópos [23] és elektronmikroszkópos [24] vizsgálatokkal, látványos bizonyíték az ötvözetek Frank-Kasper fázisa [25], de vírusok szerkezetében is találtak ikozaédereket [26].



1. ábra a: ikozaéder, b: dodekaéder, az ikozaéder Voronoi sejtje, c: BCC elemi cella Voronoi sejtje, d: FCC elemi cella

Az ikozaéder párhuzamos eltolásával azonban nem lehet kitölteni a teret. A két

kényszer hatása ezért ellentétes, s ez az atomok számára ún. geometriai frusztrációt okoz.

A geometriai frusztrációt a következőképpen vettük figyelembe a számítógépes szimulációban:

- **Térkitöltési kényszer:** minden Voronoi sejtrendszer úgy állítottunk elő, hogy 100 db pontot (sejtmagot, atomot) helyeztünk el egy kockában. A kocka oldallapjain PCN határfeltételeket alkalmaztunk [27], ami ekvivalens a kristályos szilárdtestek Born – Karman határfeltételeivel. Így a translációsan minden irányban ismétlődő kockával végtelen mintázatot lehet létrehozni.

- **Energetikai kényszer:** feltételeztük, hogy a sejtmagok (atomok) közötti teret energetikai potenciálfüggvény írja le. Két függvényt vizsgáltunk, ennek megfelelően két újabb relaxációs stratégiát vezettünk be a Voronoi algoritmus indításához a sejtmagok elhelyezésére.

Lennard – Jones módszer:

Feltételeztük, hogy a sejtmagok (atomok) közötti teret a Lennard–Jones potenciál írja le [28]:

$$U(r) = \varepsilon \left[\left(\frac{R_0}{r} \right)^{-12} - 2 \left(\frac{R_0}{r} \right)^{-6} \right], \text{ ahol } r \text{ két atom}$$

távolsága, R_0 a potenciál minimumhoz tartozó távolság. Ideális, tisztán ikozaédes elrendeződést feltételezve – amely a valóságban nem lehetséges – R_0 értékét a kocka térfogatának századrészét kitevő dodekaéderbe írható gömb átmérőjének vettük, mivel a kockában mindig 100 atomot jelöltünk ki. Véletlen kijelölés után egy-egy atom helyét úgy határoztuk meg, hogy a többi atommal képezett U/ε párpotenciálokat összegeztük, s ezt a háromváltozós összegfüggvényt gradiens módszerrel [29] minimalizáltuk. Egy iterációs lépésben minden atomra egyenként elvégeztük a fenti minimumszámítást. Az iterációt akkor állítottuk le, amikor az atomok pozíciójának változása az előző iterációs lépéshez viszonyítva minden atomra kisebb volt egy adott hibánál.

Szilárdtest fizikában a Lennard-Jones potenciált molekuláris struktúrák leírására használják [28].

Morse módszer:

Az előző módszernél leirtakat végeztük a Morse potenciállal [30]:

$$U(r) = \varepsilon \left\{ \exp \left[-2\alpha \left(\frac{r}{R_0} - 1 \right) \right] - 2 \exp \left[-\alpha \left(\frac{r}{R_0} - 1 \right) \right] \right\}^2$$

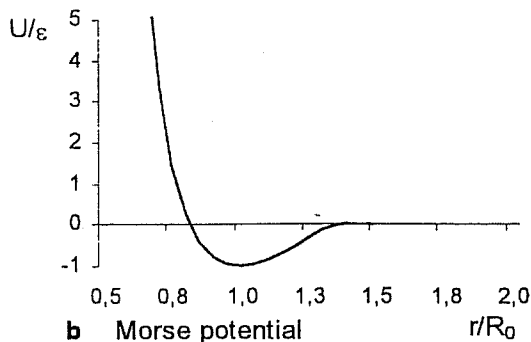
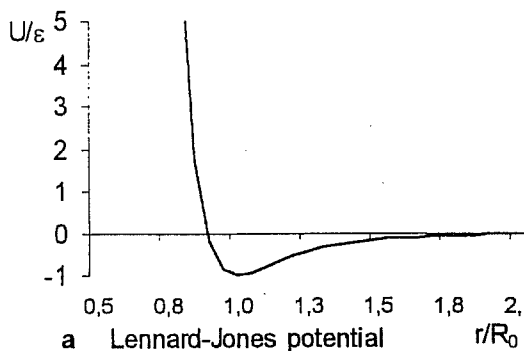
ahol

$$f(y) = \begin{cases} 1 & y \leq 1 \\ 3z^4 - 8z^3 + 6z^2 & 1 < y < 1,4 \\ 0 & 1,4 \leq y \end{cases}$$

$$\text{ahol } z = \frac{1 - r/R_0}{1 - r_c/R_0} \quad y = r/R_0, \quad \alpha = 3,76$$

$$\text{és } r_c/R_0 = 1,4$$

Szilárdtest fizikában a Morse potenciált fématomok közötti kölcsönhatások leírására használják [30].



2. ábra A Lennard-Jones és a Morse potenciál.

Említettük, hogy atomos struktúráknál a Voronoi sejtek vizsgálata topológiailag egyenértékű az atomelrendezés

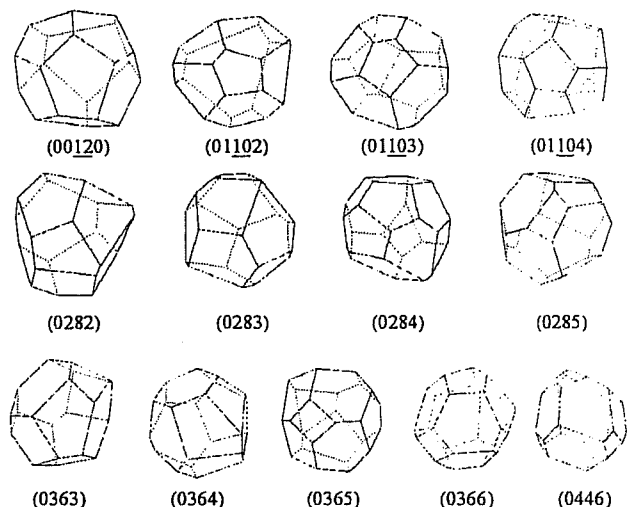
vizsgálatával, mert a sejtek oldallapszáma maga a koordinációs szám. Más szempontból is hasznos Voronoi sejtszrendszerek vizsgálata atomos struktúráknál: a Voronoi sejt oldallapjainak oldalélszáma utal a rövid, illetve hosszútávú rend (SRO ill. LRO) jelenlétére is. A BCC és FCC elemi cellák Voronoi sejtjeit ugyanis 3, 4 és hatszögek borítják, míg az ikozaéder Voronoi sejtje, a dodekaéder csupa ötszögekből áll. Bevezettük az ún. kristályosodási paramétert: 'c', amely egy sejtnél a 3-, 4- és 6-szögek arányát fogja jelenteni, sejtszrendszernél pedig ezeknek az értékeknek az átlagát a rendszer összes sejtjére. A definíció alapján:

- $0 < c \leq 1$.
- $c = 1$ kristályos atomstruktúrákra: BCC, FCC.
- $c = 0$ valószerűtlen amiatt, hogy ikozaéderekkel nem lehet kitölteni a teret.
- $c > 0,5$ esetén a kristályosodás felé, $c < 0,5$ esetén a rövidtávú rend túlsúlya felé tolódik el a két kényszer viszonya.

A c paramétert a rövid, illetve hosszú távú rend viszonyának jellemzésére fogjuk használni.

Eredmények és diszkusszió

A 3. ábrán a számítógépes szimulációval előállított leggyakoribb Voronoi sejt típusokat mutatjuk.



3. ábra A leggyakoribb Voronoi poliéderek

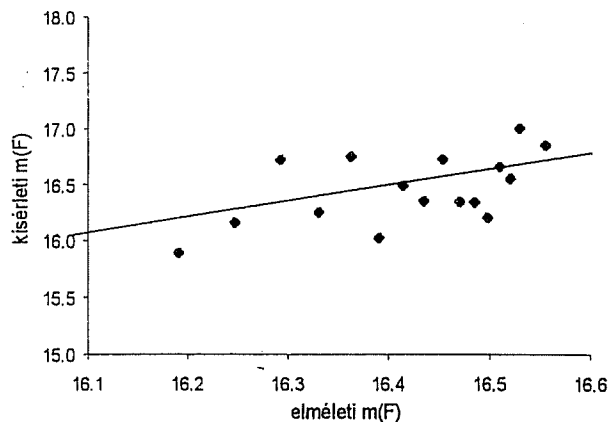
Feltüntetjük a 'c' paraméter sejtenkénti értékét és zárójelben a Schläfly szimbólumokat [31], amelyeknek jelentése: az 1., 2., 3., stb. számjegy a 3-szög, 4 szög, 5 szög stb. alakú oldallapok száma, ahol az i-szögek ($i \geq 3$) száma kétjegyű szám, ott ezt a számot aláhúztuk. A sejtek megegyeznek mások által számolt Voronoi poliéderekkel [31].

Topológiai összefüggések

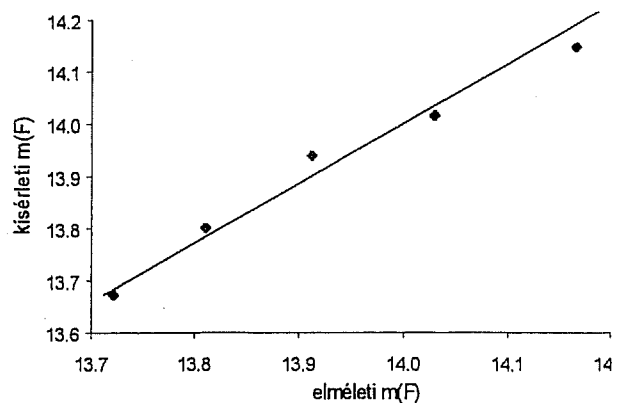
Megvizsgáltuk a bevezetésben mutatott (1)-(4) összefüggéseket, és a következőket találtuk:

1. Euler törvénye minden esetben abszolút pontossággal teljesült.

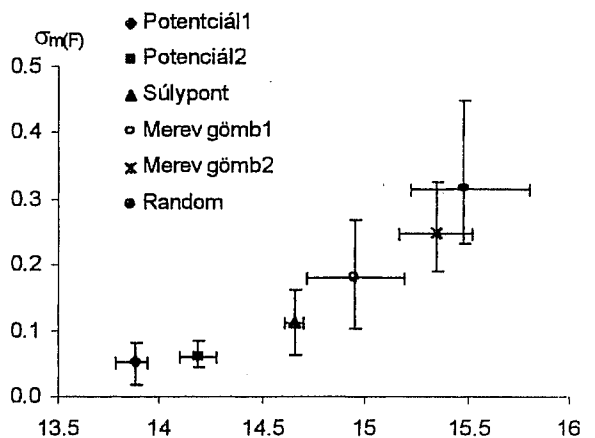
2. Aboav törvénye és a metrikus összefüggések szintén érvényesek voltak minden esetben. Az elméleti, formulából számolt és a kísérleti, sejtek adataiból számolt $m(F)$ értékekre azonban már mutatkoztak eltérések. Ezt az eltérést a szórások ($\sigma_{m(F)}$) számításával jellemeztük. Azt találtuk, hogy random rendszerek esetén nagy, relaxált rendszereknél kisebb, ezen belül energetikai potenciállal relaxált rendszereknél egészen kicsi a szórás. Az illeszkedés pontosságát és a szórás csökkenését az Aboav törvény esetében mutatjuk a 4., 5., és 6. ábrán.



4. ábra Az elméleti és kísérleti $m(F)$ értékek korrelációja random struktúra esetén ($\mu_2=12.90$, $\langle F \rangle=15.60$, $a=-1.148$, $\sigma_{m(F)}=0.263$)



5. ábra Az elméleti és kísérleti $m(F)$ értékek korrelációja relaxált struktúra esetén ($\mu_2=0.94$, $\langle F \rangle=13.86$, $a=1.476$, $\sigma_{m(F)}=0.028$)

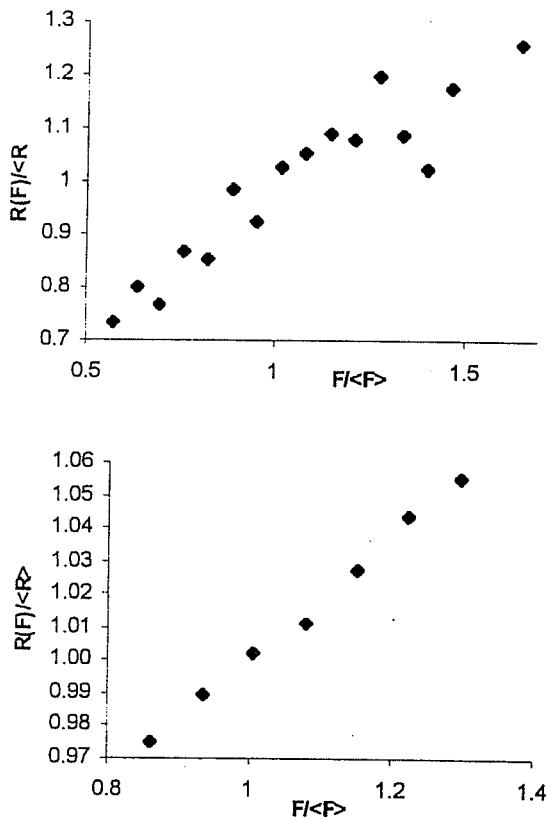


6. ábra A szórások csökkenése Aboav összefüggésére ($\sigma_{m(F)}$)

3. Rádiusz törvény:

Megvizsgáltuk a 2D-ből ismert rádiusz, más néven Desch törvényt, amely lineáris kapcsolatot mond ki az n oldalú poligonok átlagos területének négyzetgyöke és n között [19], [36]. 3D-ben a megfelelő rádiusz – $R(F)$ – az F oldalú poliéderek átlagos térfogatának – $V(F)$ – köbgyöke, ha ugyanolyan térfogatú kockát képzelünk $V(F)$ helyébe. A rádiuszt értelmezhetjük úgy is, hogy $V(F)$ helyébe ugyanolyan térfogatú gömböt képzelünk, és ennek sugara lesz $R(F)$, ez matematikailag egy konstanssal való szorzást jelent az

eredeti értelmezéshez képest. Azt találtuk, hogy a rádiusz és az oldallapszámok közötti kapcsolat 3D esetben is lineáris, a 7.ábrán mutatjuk az összefüggést.



7. ábra A 3D rádiusz törvény.

$\langle R \rangle$ az átlagos sejtérfogat rádiusza. Normált paraméterekkel való ábrázolásnál a kocka és gömb szerinti származtatás között nincs különbség. Tisztán random rendszereknél (felső ábra, $\langle F \rangle = 15,72$) kevésbé, egyensúlyi rendszereknél (alsó ábra, $\langle F \rangle = 13,9$) egészen pontos az illeszkedés, úgy, mint az Aboav törvényénél.

4. Összefüggés a sejtek átlagos oldallapszögei, $\Theta(F)$ és az oldallapok száma, F között: Már a bevezetésben kikötöttük, hogy olyan sejtrendszereket vizsgálunk, ahol egy csúcsban mindig 4 él, egy élen mindig 3

oldallap fut össze. Ennek a feltételnek közvetlen következménye, hogy a

sejtrendszerben az oldallapok által bezárt szögek átlaga mindig $\langle \Theta \rangle = 120^\circ$. Az oldallapok szögeinek számítására módszerenként 10, összesen 60 számítógépes futtatás eredményeit elemeztük. Az átlagos oldallap-szög valóban minden esetben 120° volt. Az F oldalú sejtek átlagos oldallap-szögére az alábbi összefüggést találtuk:

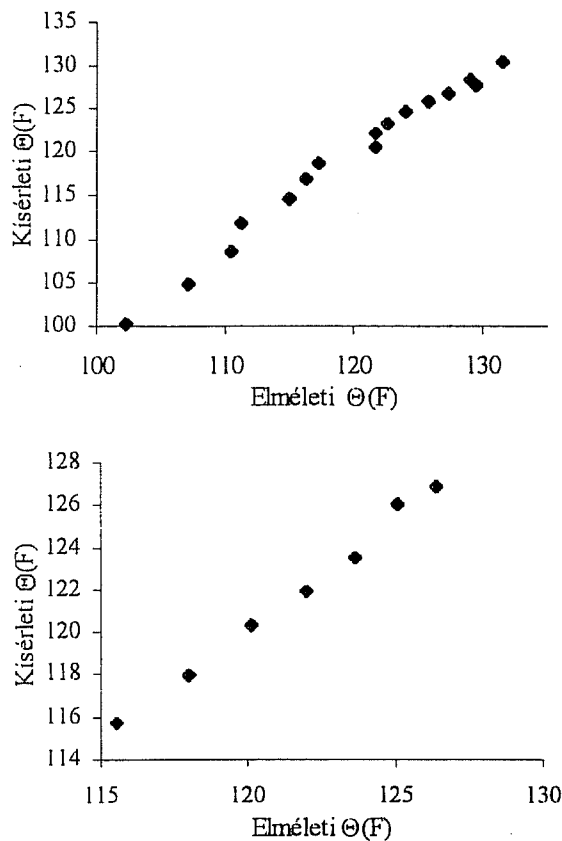
$$\Theta(F) = 120^\circ \left[1 + b \left(1 - \frac{\langle F \rangle}{F} \right) \right] \quad (5),$$

ahol 'b' egy sejtrendszer esetén állandó, de rendszerenként más értéket vesz fel és független az eddig vizsgált paraméterektől. Értékei jóval szűkebb intervallumból adódnak, mint pl. az Aboav törvény 'a' paramétere, a 25 futtatásnál $0,2 < b < 0,25$ volt. Az összefüggés megfelelőjét 2D-ben Stavans és Glazier írták fel [37], amely mások kísérleteire is igaznak

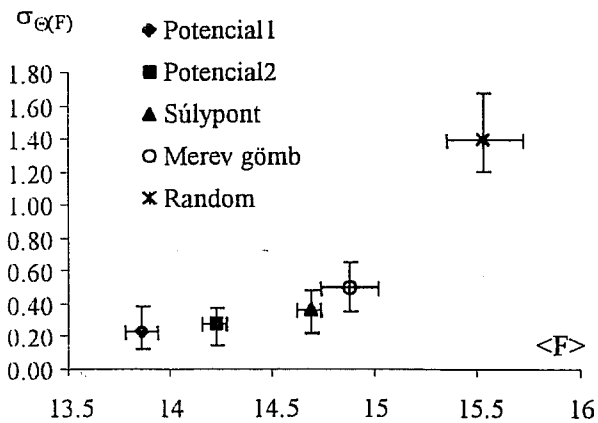
$$\text{bizonyult [19]: } \Theta(n) = 120^\circ \left[1 + \frac{f}{2} \left(1 - \frac{\langle F \rangle}{F} \right) \right].$$

$\Theta(n)$ az n oldalú poligonok oldaléleinek átlagos szögét jelenti. Szabályos méhsejt mintázatra $f=0$, a szabályos poligonok sorozatára $f=1$, véletlen mintázatokra $0 < f < 1$. 3D esetben, ahol $b=f/3$, a következő értékeket találtuk: $f=0$ a térközepes köbös térrácsszerkezet Voronoi sejtrendszerére, amely 'Kelvin hab' néven is ismeretes, $f=0,88$ a Platoni testek sorozatára, $0,6 < f < 0,75$ random Voronoi sejtrendszerekre.

A 8.ábrán egy tisztán random és egy potenciális módszerrel generált sejtrendszerre mutatjuk a számítások illeszkedését (5) összefüggésre, a 9.ábrán a számítások szórásait ábrázoltuk. A szögekre vonatkozó összefüggés és a rádiusz törvény esetében is ugyanazt a jellegzetességet találtuk, mint az Aboav és a metrikus törvényeknél: az összefüggések minden esetben érvényesek, de az illeszkedés relaxált rendszereknél jóval pontosabb, mint tisztán véletlen mintázatoknál.



8. ábra Az elméleti és kísérleti $\Theta(F)$ értékek korrelációja. Felső diagram: $\langle F \rangle = 15,72$ random, alsó diagram: $\langle F \rangle = 13,90$ relaxált rendszer esetén.



9. ábra A szórások csökkenése a szögekre vonatkozó összefüggésre ($\sigma_{\Theta(F)}$)

Topológiai paraméterek:

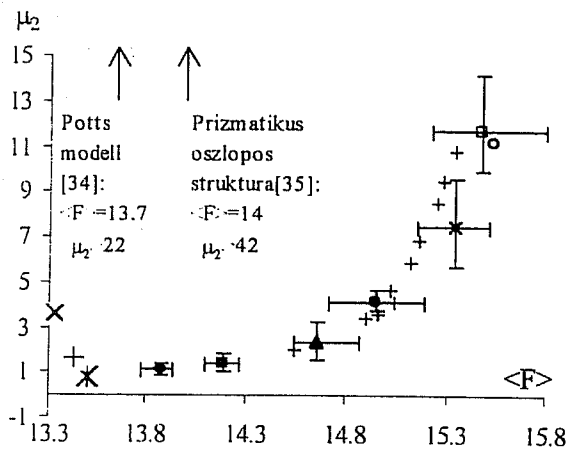
Összesen 60 számítógépes futtatás eredményeit mások által számolt értékekkel összehasonlítva foglaltuk össze a 10., 11. és a 12. ábrán.

A számolt paraméterek értékeinek folytonos követése céljából valóban indokolt volt a merev gömb módszert két esetre szétválasztani. Potenciális módszereknél az eredmények nem függtek számottevően az alkalmazott potenciál függvényről, inkább a gradiens módszer iterációjának pontosságától. Ennek megfelelően a Potenciál1 elnevezés erősebb, a Potenciál2 gyengébb pontosságú számítást jelöl. A következőképpen értékeljük az eredményeket:

1. Atomos rendszereknél $\langle F \rangle$ az átlagos koordinációs szám, a rendszerben a pakolás sűrűségét mutatja. Számításaink szerint $13,78 \leq \langle F \rangle \leq 15,8$. A nagyobb értékek összhangban vannak mások által számolt véletlen rendszerekkel, lásd 10. ábra. Megemlítjük még Jullien, Fund és Caprion JT algoritmussal generált Voronoi rendszereit [34], ahol $14,53 \leq \langle F \rangle \leq 15$, a többi paramétert nem számolták.

A legkisebb számolt értékünk $\langle F \rangle = 13,78$ potenciális relaxált rendszereknél. Energetikai megfontolásból $\langle F \rangle$ legkisebb értéke 12-höz kellene, hogy közelítsen. Azonos atomokat feltételezve ezt az értéket nem érheti el amiatt, hogy az ikozaéder nem térkitöltő koordinációs poliéder. A 10. ábrán látszik, hogy $\langle F \rangle$ -nak legkisebb értéke az eddig vizsgált rendszerek közül a Frank-Kasper fázis ötvözeteire és a Potts modellre. Ezek azonban nem azonos atomokból, illetve sejtekből álló rendszerek, hiszen a Frank-Kasper fázis ötvözetei legalább kétalkotósak, a Potts modell pedig habok eldurvulását szimulálja. Különböző atomokból álló rendszerekben sűrűbb lehet a pakolás, mint azonos atomok esetén (amíg azonban μ_2 nagy). Mégis $\langle F \rangle$ csak 13,33-ig csökken a Frank-Kasper fázisnál. A modelljeink szerint számolt legkisebb érték $\langle F \rangle = 13,78$,

megközelíti, de nyilvánvalóan nem éri el a Frank-Kasper fázis és a Potts modell értékeit.

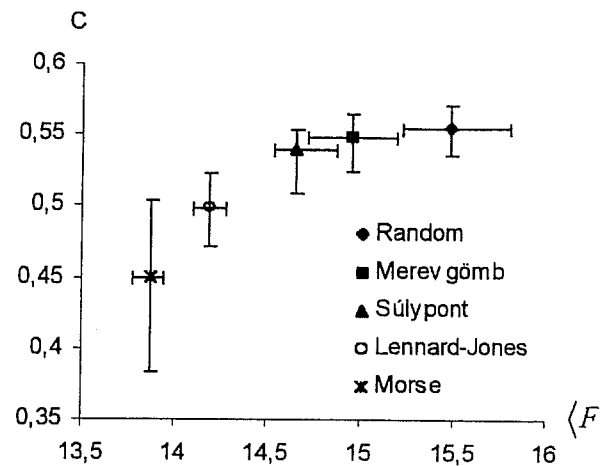


- ◆ Potencial1
- Potencial2
- ▲ Súlypont
- Merevgömb1
- ✕ Merevgömb2
- Random
- + Oger gömbös pakolásai [6]
- Poisson eloszlással generált Voronoi rendszer, Kumar [32]
- ✕ A15 struktúra (Frank-Kasper fázis) [25]
- + Z struktúra (Frank-Kasper fázis) [25]
- X- C15 struktúra (Frank-Kasper fázis) [25]

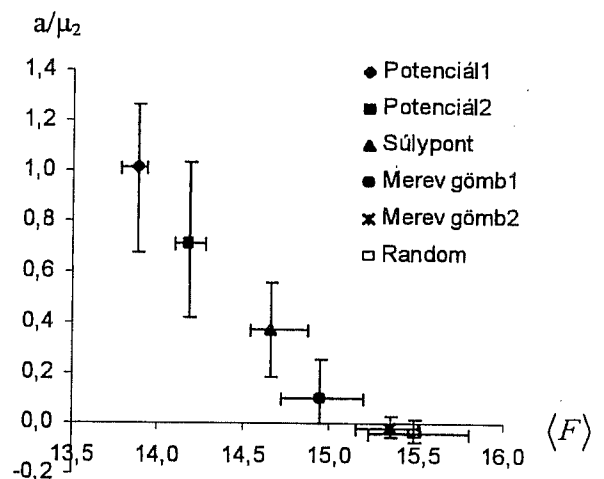
10.ábra: $\langle F \rangle$ és μ_2 számolt értékei, összehasonlítva mások eredményeivel

2. A kristályosodási paraméter 'c' értéke tisztán random rendszerektől az egyensúlyi rendszerek felé haladva csökken. Amíg random rendszereknél a hosszú távú rend javára dőlt a mérleg: $c > 0,5$, egyensúlyi rendszereknél már az energetikai kényszer az uralkodó: $c < 0,5$ (valóban kis atomszámmal dolgoztunk), 11.ábra.

3. Az $\langle F \rangle$, μ_2 és 'a' paraméterek együttes értékeit megfigyelve legjellemzőbbnek találtuk a/μ_2 és $\langle F \rangle$ kapcsolatát 12.ábra, ahol relaxált rendszereknél az értékek egy lineáris sávban helyezkednek el.



11.ábra A kristályosodási paraméter



12.ábra: a/μ_2 értéke nő, miközben $\langle F \rangle$ csökken, a kapcsolat relaxált rendszereknél lineáris.

Konklúziók:

Tisztán véletlen 3D sejtrendszerek energetikailag optimális állapotba jutását relaxációs stratégiákkal modelleztük. Legjobban energetikai potenciálokat alkalmazó módszerekkel, a geometria frusztráció hatását is figyelembe véve lehet megközelíteni az energia minimumot. A folyamat során a legfontosabb topológiai

paraméterek változásának iránya: $\langle F \rangle$, μ_2 és 'c' értéke csökken, amíg 'a' és a/μ_2 értéke nő. Kapcsolatukat tekintve a releváns rendszerparaméter a/μ_2 , amely új, relaxációs paraméterként tekinthető.

A 3D sejtsztruktúrákhoz vonatkozó Aboav, térfogati, rádiusz törvények és a szögekre vonatkozó (5) összefüggés mindig érvényes. Az összefüggések hibái tisztán véletlen rendszereknél durvábbak, egyensúlyi rendszereknél elhanyagolhatók.

Elismeréssel és köszönettel tartozunk Janik József professzornak a folyamatos támogatásért és konzultációkért!

IRODALOM

- [1] D.Weaire, N.Rivier Contemp Phys. 25 No.1: 55-99, 1984.
- [2] M.Widom, M.V.Jaric: Introduction to Quasicrystals, Chap.2., 1988.
- [3] T.Aste, D.Boose, N.Rivier Phys.Review E 53:6181-6191, 1996.
- [4] N.Rivier, T.Aste Phil. Trans. R. Soc. Lond. A 354:2054-2069, 1996.
- [5] M.A.Fortes Philosophical Magazine Letters, 68.2:69-71. 1993.
- [6] L.Oger, A.Gervois, J.P.Troadec, N.Rivier Phil. Mag. B. 74:177-197, 1996.
- [7] D.A.Aboav Metallography 13: 43-58, 1980.
- [8] D.A.Aboav Metallography 16: 265-273, 1983.
- [9] M.A.Peshkin, K.J.Strandburg, N.Rivier Phys.Rev.Lett. 67:1803-06, 1991.
- [10] R.Delannay, G.LeCaer, M.Khatun J.Phys:Math. 25: 6193-6210, 1992.
- [11] J.C.M.Mombach, R.M.C.deAlmeida, J.R.Iglesias Phys.Review E 47:3712-3716, 1993.
- [12] J.C.M.Mombach, M.A.Z.Vasconcellos, R.M.C.deAlmeida J.Phys.D. 23:600-606, 1990.
- [13] J.C.M.Mombach, R.M.C.deAlmeida, J.R.Iglesias Phys.Review E 48:598-602, 1993.
- [14] P.Cerisier, S.Rahal, N.Rivier Phys.Review E 54:5086-5094, 1996.
- [15] F.Elias, C.Flament, J.C.Bacri, O.Cardoso, F.Graner Phys.Rev.E 56:3310-3318, 1997.
- [16] G. Le Caer J.Phys.A:Math. 24:1307-1317; 4655-4675, 1991.
- [17] G. Le Caer, R.Delannay J.Phys.A:Math. 26:3931, 1993.
- [18] P.Pina, M.A.Fortes J.Phys.D:Appl.Phys. 29:2507-2514, 1996.
- [19] W.Korneta, S.K.Mendiratta, J.Menteiro Phys.Review E 57:3142-3152, 1998.
- [20] B.Dubertret, N.Rivier, M.A.Peshkin J.Phys.A:Math. 31:879-900, 1998.
- [21] D.R.Nelson, F.Spaepen Solid State Phys. 42:1, 1989.
- [22] A.Szasz J.of Superconductivity 4:1, 1991.
- [23] I.A.Harris, R.S.Kidwell, J.A.Northby Phys.Rev.Lett. 53:2390-2393, 1984.
- [24] K.H.Kuo, H.Q.Ye, D.X.Li J.Elektron Microscopy Techniques 3:57-66, 1986.
- [25] D.P.Shoemaker, C.B.Shoemaker, M.V.Jaric: Introduction to Quasicrystals, Chap.1., 1988.
- [26] D.L.D.Caspar, A.Klug Cold Spring Harbor Symp. on Quantitative Biology 32:1-24, 1962.
- [27] W.H.Butler, W.Kohn: NBS Spec. Publ. 323, 465, 1971.
- [28] Shu Zhen, G.H.Davies: Phys. Stab. Sol. (a) 78:595, 1983.
- [29] P.Bajcsay Numerical analysis, (University book in Hungarian), Tankönyvkiadó, 1986.
- [30] J.Lakkonene, R.M.Nieminen: J.of Non-Cryst.Solids 75,237, 1985.
- [31] V.S.Stepanyuk, A.Szász, A.A.Katsnelson, O.S.Trushin, H.Müller: J.of Non-Cryst.Solids, 159. 80-87. 1993.
- [32] S.Kumar, S.K.Kurtz, J.R.Banavas, M.G.Sharma J.statist.Phys.67:523, 1992.
- [33] M.A.Fortes J.Phys.A:Math. 28:1055-1068, 1995.
- [34] R.Jullien, P.Jund, D.Caprion Phys. Rev. E 54:6035, 1996.
- [35] D.Weaire, J.A.Glazier Phil.Mag.Lett. 68:363, 1993.
- [36] C.H.Desch J.Inst.Met. 22: 241, 1919.
- [37] J.Stavans, J.A.Glazier Phys.Rev.Lett. 62:1318, 1989.