

## CELLULÁRIS STRUKTÚRÁK TOPOLOGIAI JELLEMZÉSE

### ON THE TOPOLOGICAL CHARACTERIZATION OF CELLULAR STRUCTURES

Réti Tamás<sup>1</sup>, Réger Mihály<sup>2</sup>, Nagyné Halász Erzsébet<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Óbudai Egyetem, Bánki Donát Gépész és Biztonságtechnikai Mérnöki Kar, Anyagtudományi és Gyártástechnológiai Intézet 1086 Budapest, Népszínház utca 8. Telefon / Fax: +36-1-666-5386, levelezési cím, [reti.tamas@bgk.uni-obuda.hu](mailto:reti.tamas@bgk.uni-obuda.hu)

<sup>2</sup>Óbudai Egyetem, Bánki Donát Gépész és Biztonságtechnikai Mérnöki Kar, Anyagtudományi és Gyártástechnológiai Intézet 1086 Budapest, Népszínház utca 8. Telefon / Fax: +36-1-666-5386, levelezési cím, [reger.mihaly@bgk.uni-obuda.hu](mailto:reger.mihaly@bgk.uni-obuda.hu)

<sup>3</sup>Óbudai Egyetem, Bánki Donát Gépész és Biztonságtechnikai Mérnöki Kar, Anyagtudományi és Gyártástechnológiai Intézet 1086 Budapest, Népszínház utca 8. Telefon / Fax: +36-1-666-5386, levelezési cím, [nagyne.halasz@bgk.uni-obuda.hu](mailto:nagyne.halasz@bgk.uni-obuda.hu)

#### Abstract

For the global structural characterization of cellular systems a novel method is suggested. The new approach is based on the following graph-theoretical concept. As it is known a two- or three-dimensional cellular system composed of polygons or polyhedra can be represented by a finite or an infinite graph. Considering the corresponding dual graph, an appropriately defined topological descriptor is constructed, which can be applicable for the quantitative structural characterization of various cellular systems. Tests performed on the graphs of fullerene isomers demonstrate that the novel topological descriptor is efficiently used for the preselection of most stable fullerene isomers.

**Keywords:** *cellular systems, infinite graph fullerene isomer.*

#### Összefoglalás

A celluláris anyagok strukturális jellemzésére egy új típusú eljárást ismertetünk. A módszer egy gráfelméleti koncepción alapul: Mint ismert, a poligonokból illetve poliéderekből álló 2- illetve 3-dimenziós celluláris rendszer egy véges vagy végtelen gráffal reprezentálható. Ennek duális gráfját képezve, egy célszerűen definiált topológiai deskriptor konstruálható, amely alkalmas különféle celluláris rendszerek kvantitatív strukturális jellemzésére. Fullerén izomerek gráfjai felhasználásával végzett tesztekkel demonstráltuk, hogy a javasolt új topológiai deskriptor hatékonyan alkalmazható a leginkább stabilnak tekinthető izomerek kiválasztására.

**Kulcsszavak:** *celluláris anyagok, végtelen gráf, fullerén izomer.*

## 1. Bevezetés

A celluláris rendszereket, más néven sejtrendszereket elterjedten használják számos anyag mikroszerkezeti modellezésére, ezek közé sorolható a polikristályos ötvözetek, a fémhabok, egyes nonoszerkezetek, fullerének. Geometriai szempontból a 2- és 3-dimenziós sejtrendszereket poligonok illetve poliéderek alkotják [1,2,3]. Ezek kvantitatív morfológiai jellemzése, osztályozása napjainkban is változatlanul a kutatás homlokerében van. A következőkben olyan új típusú globális topológiai alaktényezőt definiálunk, amely egyszerű módon, közvetlenül származtatható a celluláris rendszer gráfjának, illetve ez utóbbi duális gráfjának ismeretében.

A celluláris anyagok vizsgálatára különféle geometriai modellek használatosak, ezek legismertebb és legfontosabb változatai a következők [1,2,3]:

- Véges számú különböző típusú, térkitöltő poliéderekből konstruált 3-dimenziós periódikus sejtrendszerek [1], ezekre tipikus példa az egyfázisú polikristályos ötvözetek mikroszerkezete,
- Azon 2- és 3-dimenziós random sejtrendszerek, amelyek származtatásához alapul többnyire a sík illetve a tér Voronoi-tesszellációja vagy ennek valamilyen általánosított változata szolgál,
- Véges számú különböző típusú, poligonokból illetve térkitöltő poliéderekből, konstruált 2- illetve 3-dimenziós kvázi-periódikus sejtrendszerek [3].

Véges kiterjedésű zárt felületet (gömb, tórusz) hézagmentesen lefedő, véges számú különböző típusú poligon alkotta sejtrendszerek (ilyenek például a fullerének [4]).

## 2. Új típusú globális topológiai deszkriptor származtatási elve

A celluláris rendszer strukturális jellemzésére javasolt  $\Psi$  globális topológiai deszkriptor származtatása az alább részletezett koncepción alapul: Tekintsük a sejtrendszer egy tetszőleges  $A$  sejtjét, amelyet kétdimenziós rendszerben egy poligon, 3-dimenziósrendszerben egy poliéder reprezentál. Az egyszerűség kedvéért, tételezzük fel, hogy a sejtek konvex poligonok illetve konvex poliéderek.

Jelölje  $C_2(A)$  az  $A$  poligonsejt élszomszédos környezetét, vagyis azon poligonok halmazát, amelyeknek az  $A$  sejttel közös éle van, illetve jelölje  $C_3(A)$  az  $A$  polidéersejt lapszomszédos környezetét, vagyis azon poliéderek halmazát, amelyeknek az  $A$  sejttel közös lapja van. A  $\Psi$  topológiai deszkriptor definiálásához az élszomszédos illetve a lapszomszédos sejtek geometriai paraméterei, nevezetesen a szomszédos sejtek élszámai illetve lapszámok szolgálnak kiindulási alapul.

Amennyiben a sejtrendszert az  $\{A_1, A_2, \dots, A_i, \dots, A_N\}$  sejtek  $N$  elemű halmaza alkotja, akkor minden egyes 2- illetve 3-dimenziós  $A_i$  sejthez, hozzárendelhető egy  $U(A_i)$  vektor, amely a szomszédos sejtek él- illetve lapszám szerinti eloszlását egyértelműen jellemzi. A  $\Psi$  globális topológiai deszkriptort az  $U(A_i)$  vektor-komponensek alkalmasan definiált függvényeként származtatjuk.

Tekintve, hogy egy tetszőleges  $A$  sejt  $C_2(A)$  illetve  $C_3(A)$  környezetében a szomszédos sejtek sokféle konfigurációban fordulhatnak elő, ezért várható, hogy a különféle sejtrendszerek egymástól eltérő struktúrája kielégítő módon jellemezhető az él- illetve lapszomszédos sejtek lehetséges kombinációinak ismeretében.

Példaként tekintsük a fullerén típusú sejtrendszereket [4]. A fullerének karbon bázisú molekulák, olyan speciális sejtrend-

szereket tekinthetők, amelyek geometriai szempontból ötszögek és hatszögek által határolt egyszerű (trivalens) poliéderekkel modellezhetők. Következésképpen a sejtek 5- illetve 6-szögek, és a poliéder minden egyes csúcában pontosan 3 él találkozik. Egy  $n$  csúcsszámú  $C_n$  fullerénnek, (ahol  $n \geq 20$ , és  $n \neq 22$ ) pontosan  $F_5 = 12$  számú ötszöglapja és  $F_6 = (n/2) - 10$  számú hatszöglapja van. Azonos csúcsszámú fullerénnek több, szerkezetileg különböző izomerje létezhet, az izomerek száma drasztikusan növekszik a csúcsszám növekedésével. Amennyiben

$n = 60$ , a  $C_{60}$  típusú fullerén izomereinek száma 1812, ezek mindegyikét egymástól különböző, nem-izomorf gráfok reprezentálják. A globális topológiai deskriptor ( $\Psi$ ) definiálásához illetve számításához célszerű az izomerek gráfjainak duálisát használni. A duális gráfok háromszögek alkotta síkbeli gráfok, közös jellemzőjük, hogy egy duális gráfban a csúcsok fokszáma 5 illetve 6. Jelölje egy  $C_n$  fullerén-gráf duális gráfját  $C_{dual}(n)$ , ez esetben a  $C_{dual}(n)$  duális gráf pontosan 12 darab ötödfokú csúcsot és  $n/2 - 10$  darab hatodfokú csúcsot tartalmaz. A fullerén izomerek strukturális jellemzésére hivatott  $\Psi$  deskriptort a különböző élszomszédos környezetek figyelembe vételével, az alábbi képlettel definiáltuk:

$$\Psi = \Psi(C_n) = \sum_{j=0}^5 n_{5,j} D_{5,j}^2 + \sum_{j=0}^6 n_{6,j} D_{6,j}^2 \quad (1)$$

A fenti formulában  $n_{5,j}$  és  $n_{6,j}$  az élszomszédos  $C(5,j)$  illetve  $C(6,j)$  poligon-konfigurációk száma,  $D_{k,j}$  pozitív egész számok pedig az ún. konfigurációs paraméterek. A  $D_{k,j}$  paraméterek aktuális értéke megegyezik az adott  $k$ -oldalszámú sejttel élszomszédos poligonok (5- illetve 6-szögek) oldalszámaink összegével. Ez utóbbiak definíció szerint az alábbi formulákkal számíthatók:  $D_{5,j} = 30 - j$ , illetve  $D_{6,j} = 30 + j$  (lásd az 1. táblázat adatait).

1. táblázat. Élszomszédos konfigurációs jellemzők fullerénekben

| Élszomszédos konfigurációk paraméterei |                           |                           |                |           |
|--|---------------------------|---------------------------|----------------|-----------|
| k                                      | j                         | C(k,j)                    | $D_{k,j}$      | $n_{k,j}$ |
| 5                                      | 0                         | $0 \times 5 + 5 \times 6$ | $D_{5,0} = 30$ | $n_{5,0}$ |
|  | 1                         | $1 \times 5 + 4 \times 6$ | $D_{5,1} = 29$ | $n_{5,1}$ |
|  | 2                         | $2 \times 5 + 3 \times 6$ | $D_{5,2} = 28$ | $n_{5,2}$ |
|  | 3                         | $3 \times 5 + 2 \times 6$ | $D_{5,3} = 27$ | $n_{5,3}$ |
|  | 4                         | $4 \times 5 + 1 \times 6$ | $D_{5,4} = 26$ | $n_{5,4}$ |
| 6                                      | 5                         | $5 \times 5 + 0 \times 6$ | $D_{5,5} = 30$ | $n_{5,5}$ |
|  | 0                         | $0 \times 6 + 6 \times 5$ | $D_{6,0} = 30$ | $n_{6,0}$ |
|  | 1                         | $1 \times 6 + 5 \times 5$ | $D_{6,1} = 31$ | $n_{6,1}$ |
|  | 2                         | $2 \times 6 + 4 \times 5$ | $D_{6,2} = 32$ | $n_{6,2}$ |
|  | 3                         | $3 \times 6 + 3 \times 5$ | $D_{6,3} = 33$ | $n_{6,3}$ |
|  | 4                         | $4 \times 6 + 2 \times 5$ | $D_{6,4} = 34$ | $n_{6,4}$ |
|  | 5                         | $5 \times 6 + 1 \times 5$ | $D_{6,5} = 35$ | $n_{6,5}$ |
| 6                                      | $6 \times 6 + 0 \times 5$ | $D_{6,6} = 36$            | $n_{6,6}$      |           |

A fenti megfontolásokból adódik, hogy  $C_n$  fullerénre érvényes az

$$F_5 = n_{5,0} + n_{5,1} + n_{5,2} + n_{5,3} + n_{5,4} + n_{5,5} = 12,$$

illetve az

$$F_6 = n_{6,0} + n_{6,1} + n_{6,2} + n_{6,3} + n_{6,4} + n_{6,5} + n_{6,6} = k/2 - 10$$

egyenlőség.

Amint az 1. táblázat adataiból kitűnik, az 5 és 6 szögek élszomszédos környezeteit reprezentáló  $C(k,j)$  sejtkonfigurációk száma éppen 13. Ezekhez pontosan 12 különböző  $D_{k,j}$  paraméterérték tartozik. Ésszerű az feltételezés, hogy az ily módon definiált  $\Psi$  globális deskriptor nagy valószínűséggel erősen szelektív, azaz jelentős mérvű diszkriminációs képességgel rendelkezik.

### 3. Alkalmazási példa: fullerén típusú sejttrendszer topológiai jellemzése

Az előzőkben definiált  $\Psi$  globális topológiai deskriptor gyakorlati alkalmazási lehetőségeinek tesztelésére  $C_{36}$  fullerén-izomerekre vonatkozóan végeztünk előzetes vizsgálatokat. Elemeztük az egyes izomerek stabilitását minősítő  $E_n$  energetikai paraméter valamint a  $\Psi$  deskriptor közötti kapcsot

latot. Az  $E_n$  (eV) energetikai paraméter számítása a Density Functional Tight-Binding (DFTB) módszerrel történt [5]. Mint ismeretes, minél kisebb az  $E_n$  energetikai paraméter értéke annál stabilabbnak tekintendő a hozzá tartozó izomer.

Pontosan 15 izomerje létezik a  $C_{36}$  típusú fulleréneknek. Közülük az energetikai számítások szerint a legstabilabb a C36:14 izomer, ezt követik sorrendben a C36:15, C36:12, C36:9 majd a C36:11 izomerek. A legkevésbé stabilnak a C36:2 izomer tekinthető. Ezen izomerekre vonatkozóan a globális deskriptor számított értékei a következők voltak:

$$\Psi(C36:14) = 17348,$$

$$\Psi(C36:15) = 17352,$$

$$\Psi(C36:12) = 17364,$$

$$\Psi(C36:9) = 17364,$$

$$\Psi(C36:11) = 17368,$$

illetve

$$\Psi(C36:2)=17468.$$

Mint megállapítható, a  $\Psi$  globális deskriptor és az  $E_n$  energetikai jellemző

között szoros korrelációs kapcsolat áll fenn: nevezetesen minél kisebb  $E_n$  értéke (azaz minél stabilabb egy fullerén-izomer) annál kisebb a  $\Psi$  deskriptor értéke. Ebből arra következtethetünk, hogy a  $\Psi$  deskriptor eredményesen alkalmazható a fullerén-izomerek strukturális jellemzésére, valamint stabilitásuk predikciójára.

### Szakirodalmi hivatkozások

- [1] Williams, R.: *The Geometrical Foundation of Natural Structure: A Source of Book of Design*, New York, Dove, 1979.
- [2] Reti, T., Böröczky, K.J.: *Topological Characterization of Cellular Structures*, Acta Polytechnica Hungarica, 1 (2004) p. 59-85.
- [3] Böröczky, K.J., Réti, T., Wintsche, G.: *On the combinatorial characterization of quasicrystals*, Journal of Geometry and Physics, 57 (2006) 39-52.
- [4] Fowler, P.W., Manolopoulos, D.E.: *An Atlas of Fullerenes*, Calendron Press, Oxford, 1995.
- [5] Porezag, D., et al., *Construction of tight-binding-like potentials on the basis of density-functional theory: Application to carbon*, Phys. Rev. B51, (1995) 12947-12957.