

dc_832_14

HŐMÉRSÉKLETI EGYENSÚLYTÓL TÁVOLI STATISZTIKUS FIZIKAI RENDSZEREK NUMERIKUS MODELLEZÉSE

MTA DOKTORI ÉRTEKEZÉS

Somfai Ellák



**MTA Wigner Fizikai Kutatóközpont
Szilárdtestfizikai és Optikai Intézet
Komplex Folyadékok Osztály**

**Budapest
2014. december**

Tartalomjegyzék

Bevezetés	1
I. Diffúziós jelenségek modellezése	4
I.A. Diffúziós jelenségek kristályfelületeken	4
1. Bevezetés: nyomjelző atomok diffúziója fémkristályok felületén	4
2. Atomi modell	7
3. Kontinuum modell	14
I.B. Diffúzió-dominált növekedési folyamatok	16
4. Bevezetés: diffúzió-limitált aggregáció	17
5. Diffúzió-limitált aggregáció skálázása	19
6. Nemlineáris növekedési modell mintavételezéssel	29
7. Diffúzió-limitált aggregáció határolt tartományokban	37
I.C. Diffúzió táguló térben	46
8. Bevezetés: skálainvariáns dinamika és táguló tér	46
9. Kölcsönható részecske rendszerek időfüggő geometriában	47
II. Szemcsés anyagok modellezése	56
10. Bevezetés: statikus és kvázi-statisztikus szemcsés anyagok szimulációja	56
11. Szemcsés anyagok erőhálózatainak univerzalitása	59
12. Kritikus viselkedés a torlódási átmenet közelében	64
13. Rugalmas hullámok terjedése	72
Összefoglalás	92
Függelék	93
A. Új tudományos eredmények (tézisek)	93
B. A tézispontok alapjául szolgáló saját tudományos közlemények	96
C. Az értekezés témájához kapcsolódó egyéb publikációs tevékenység	98
D. Általános irodalomjegyzék	100
Köszönetnyilvánítás	110

BEVEZETÉS

A természetben számos lényeges rendszer – gondoljunk például az életfolyamatokra – nincs hőmérsékleti egyensúlyban, közöttük egy jelentős csoportot alkotnak a hőmérsékleti egyensúlytól távoli folyamatok. Jelentőségük ellenére ezekről sokkal kevesebbet tudunk, mint az egyensúlyi rendszerekről, többek között a részletes egyensúly hiánya miatt. Az 1960-as és 70-es években az egyensúlyi statisztikus mechanikában elért mélyreható fejlődés után a 80-as évektől a statisztikus fizikában az erőfeszítések nagy része a nemegyensúlyi folyamatok felé irányult. Meghatározó felismerés volt, hogy a természetben sok jelenség – köztes méretskála hiányának következtében – skálainvarianciát mutat; az ilyen objektumok a „fraktál” elnevezést kapták [1]. A következő évtizedben a hangsúly áttevődött a skálainvariáns jelenségek fizikai hátterének megértésére [2], és az egyensúlytól távoli növekedési folyamatokról (például felületnövekedésről [3]) szerzett ismereteink is rendszerezettebbek lettek. A 90-es évek második felétől egészen napjainkig előtérbe kerültek az interdiszciplináris jellegű kutatások, például a statisztikus fizika és a biológia (mikrobiológia, populációdinamika, rendszerbiológia), a matematika (gráfelmélet, játékelmélet), és újabban a társadalomtudományok közötti határterületeken. Erre az időszakra tehető a szemcsés anyagok fizikájának jelentős fejlődése is [4]; korábban a mérnöki tudományok körében leginkább csak empirikus modellekkel dolgoztak.

Ebben a munkában hőmérsékleti egyensúlyban nem lévő statisztikus fizikai rendszereken végzett kutatásaimat foglaltam össze. A diffúzió végzett munkámat egyrészt a diffúziódominált egyensúlytól távoli növekedési folyamatok megoldatlan problémái motiválták, másrészt meglepő felületfizikai kísérleti megfigyelésekre kerestem magyarázatot. Vizsgáltam továbbá az atermális szemcsés anyagok statikus és kvázistatikus (rezgések és akusztikus hullámterjedés) tulajdonságait, különös tekintettel skálainvariáns és kritikus viselkedésre.

A fizika témakörében – így a nemegyensúlyi statisztikus fizikában is – számos olyan problémát találunk, amelyek megválaszolására az analitikus, illetve a kísérleti megközelítések önmagukban nem bizonyulnak elegendőnek. Ilyen esetekben a numerikus módszerek alapvető fontosságú információval járulnak hozzá a megoldáshoz.

A numerikus megközelítés lényeges előnye az elméleti, analitikus módszerekhez képest a flexibilitás: általa kezelhetővé válik az adott probléma megkerülhetetlen komplexitása. Például a diffúzió-limitált aggregáció [5] (5-7. fejezet) leírására három évtized alatt sem született egy koherens elméletet, míg eközben rengeteg numerikus eredmény felhalmozódott. A szimulációknak fontos szerep jut az elméleti megközelítés kifejlesztésében is. Erre jó példa a statikus szemcsés anyagok erőhálózatainak skálainvarianciája (11. fejezet). Itt az elméleti sejtéseket numerikus szimulációim segítségével sikerült igazolni, és így megalapozni ennek az univerzalitás osztálynak a meglétét.

A numerikus módszereknek számos előnye van a kísérletekkel szemben is. Egyrészt míg a kísérletekben tipikusan csak kiválasztott mennyiségek kerülnek megmérésre, addig a modell állapotáról minden információ rendelkezésre áll, az is ami praktikusan nem mérhető vagy túl költséges lenne (például megfelelő térbeli és időbeli felbontás, vagy mérési pontosság miatt). Másrészt a különböző effektusok be- és kikapcsolásában sokkal nagyobb a szabadság, ami többek között alapvető lehet egy olyan minimális modell megalkotásában,

amely már produkálja a vizsgált jelenségeket. Éppen ezért a kísérletek és a szimulációk hatékonyan kiegészíthetik egymást. Jó példa erre a fémkristályok alacsony indexű felületeinek felső rétegében végbemenő, vakanciák által hajtott diffúziós folyamat felismerése, amelyben kísérleti kollégáim mérési eredményeit numerikus modellezésem (2. fejezet) és számolásaim (3. fejezet) segítségével lehetett értelmezni.

Numerikus szimulációimban a „minél több fizika” elvét igyekeztem követni, a minél nagyobb rendszerek szuperszámítógépeken való modellezése helyett; így már közepes méretű szimulációkból is érdekes eredményeket lehet kihozni. Ez az adott problémát kezelő leghatékonyabb algoritmus kiválasztásától a mélyebb fizikai összefüggések felhasználásáig többféle módon történt. Az előbbire példa a rugalmas hullámok terjedése rendezetlen szemcsés rendszerekben (13. fejezet), amelyben a kis amplitúdójú hullámok időfejlődését egy lineárizált rendszerben határoztam meg, lineáris algebra alkalmazásával. Így az időfejlődés molekuladinamikával történő követése helyett egyszeri befektetéssel (a rezgési sajátmódusok meghatározásával) tetszőleges időben felírhattuk a rendszer mozgásállapotát, a sajátmódusok ismerete pedig további lényeges információt szolgáltatott a rendszerről. (Természetesen sok más esetben a molekuladinamikát [6] használtam, mivel ez volt a legjobb alternatíva.) Az algoritmus megfelelő választására a 2. fejezetben találunk majd példát, ahol rácson történő bolyongásnál a visszatérési valószínűségeket nem Monte-Carlo típusú módszerrel számoltam, hanem a valószínűségek iteratív közvetlen kiértékelésével, amelynek gyorsabb a konvergenciája.

Az olyan érett, gazdag múlttal rendelkező területeken, mint a diffúzió-limitált aggregáció (5-7. fejezet), valóban csak nagyobb skálájú szimulációkkal lehetett haladást elérni. Itt olyan kifinomult technikákat használtam, mint például hierarchikus távolság térképek használata a modell rácsmentes változatában. Az aszimptotikus viselkedés pontosabb megértéséhez figyelembe vettem az adott rendszer nyújtotta, elméleti úton megalapozott lehetőségeket, mint például a zajcsökkentést és a skálázási korrekciók vizsgálatát (amely a skálázásban az első szubdomináns tag viselkedésén alapul). A diffúzió-limitált növekedés nemlineáris modelljében kidolgoztam egy olyan, a rendszer tulajdonságait erősen kihasználó algoritmust (6. fejezet), amelyben ki lehetett váltani egy rendkívül számolásigényes lépést (eredetileg minden hozzáadott részecskénél meg kellett oldani a Laplace egyenletet egy bonyolult határfeltétel mellett).

Végül egy olyan módszer kidolgozását említtem (9. fejezet), amely alapján egy adott rendszerben a fundamentális tulajdonságok megfelelő kihasználásával mind az elméleti, mind a numerikus megközelítés egyszerűbbé válik: táguló térben végbemenő skálainvariáns folyamatok aszimptotikus viselkedését visszavezettük rögzített (nem táguló) térben végbemenő folyamatok véges idejű állapotára.

Az alábbiakban mindegyik témakörnél egy bevezető fejezetben ismertetem a problémakört az előzményekkel és irodalmi áttekintéssel, melyet az eredményeim bemutatása követ.

Ezen munka irodalomjegyzékében a következő jelölést használjuk:

- S előtagot kapnak (pl. [S1]) az értekezés alapjául szolgáló Saját publikációim, lista a 96. oldalon kezdődik,
- E előtagot kapnak (pl. [E1]) az értekezéshez kapcsolódó Egyéb publikációim, ezek listája a 98. oldalon kezdődik,
- előtag nélkül (pl. [1]) szerepelnek az általános irodalomjegyzék publikációi, listájuk a 100. oldalon kezdődik.

Elterjedt rövidítések (sokszor angolból; első előfordulásakor a szövegben is definiálva):

1D, ...	– one dimensional, ...	egydimenziós (hasonlóan 2D, 3D)
DBM	– dielectric breakdown model	dielektromos letörési modell
DEM	– discrete element method	diszkrét elem módszer
DLA	– diffusion-limited aggregation	diffúzió-limitált aggregáció
EAM	– embedded atom method	beágyazott atom módszer
HL	– Hastings-Levitov	
KPZ	– Kardar-Parisi-Zhang	
STM	– scanning tunneling microscope	pásztázó alagútmikroszkóp

I. Diffúziós jelenségek modellezése

I.A. Diffúziós jelenségek kristályfelületeken

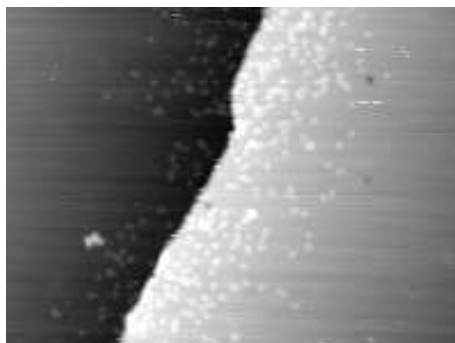
A következő néhány fejezetben egy, a fém egykristályok felületén végbemenő nagyon érdekes diffúziós folyamatot mutatunk be. Már hosszú ideje ismert, hogy alacsony indexű kristályfelületeken az olvadáspontnál jóval alacsonyabb hőmérsékleten is van atomi átrendeződés, amelyen tipikusan a felső atomi réteg tetején mozgó adatomok mozgását értjük: ezek az atomi lépcsők mentén vagy között mozognak, ami a lépcsők és szigetek mobilitásához vezet [13]. Az alábbiakban megmutatjuk, hogy az egykristály felső rétegének atomjai is mobilisak, annak ellenére, hogy szomszédjaik szorosan körbezárják őket.

Erre a diffúziós mechanizmusra egy erősen leegyszerűsített, de szemléletes analógiaként gondolhatunk úgy, mint egy atomi méretű 15-ös lyuktologató kirakójátékra: egy vakancia, amely kizárólag a legfelső atomi rétegben mozog, véletlen bolyongást végez, és eközben átrendezi az útjába kerülő atomokat.

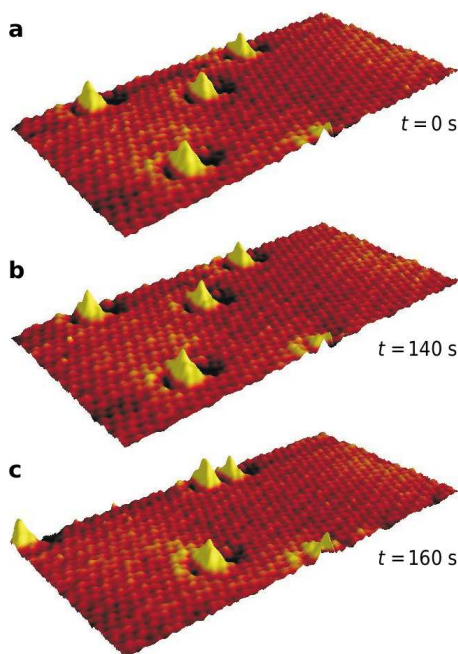
1. BEVEZETÉS: NYOMJELZŐ ATOMOK DIFFÚZIÓJA ALACSONY INDEXŰ FÉMKRISTÁLYOK FELÜLETÉN

Kísérleti kollégáimmal azt vizsgáltuk, hogy mi történik indium (In) atomokkal réz (Cu) egykristályok felületén, nevezetesen Cu(001) felületen. Ez a kombináció azért érdekes, mert a Cu(001) felület epitaxiális, vagyis gázfázisból történő és a hordozó felület kristályrácsát követő növesztésekor a steril esetben megjelenő durva, háromdimenziós struktúrák [3] helyett az In atomok jelenlétében lapos, rétegről rétegre történő növekedés történik [14]. Depozíció után az In atomok adatomként, vagyis a felső atomi réteg tetején diffundálva a lépcsőkhöz vándorolnak, és ott beépülnek a felső atomi rétegbe szubsztitúciós formában (egy-egy Cu atomot kicserélve) [15, 16]. Ezt egy olyan pásztázó alagútmikroszkóppal (angol rövidítéssel STM) vizsgáltuk, amely széles hőmérséklettartományban is rendkívül alacsony termális drifttel rendelkezik [17]. Az 1. ábrán látszik, hogy mivel az In atomok látszólagos magassága a környező Cu atomokhoz képest $0.4 \text{ \AA}$, az In atomok a felső atomi rétegbe vannak beágyazva, és egy ideig a lépcső környezetében tartózkodnak.

Az In atomok további mozgását úgy vizsgáltuk, hogy nagy felbontású STM felvételek sorozát készítettük a felület ugyanazon részéről. Meglepő módon ezek az atomok jónéhány rácsállandónyi ugrásokat tesznek, az ugrások között pedig jelentős idő telik el. Ráadásul az egymáshoz közeli In atomok gyakran ugyanabban az időben ugranak, lásd a 2. ábrán. Az STM felvételek sebessége nem tette lehetővé, hogy szobahőmérsékleten egy ugrás időbeli lefolyását felbontsuk; az is előfordult például, hogy egy felvétel közepén az egyik scanline még mutatta az In atom egyik felét, a következő scanline-on már nem volt ott. Alacsony



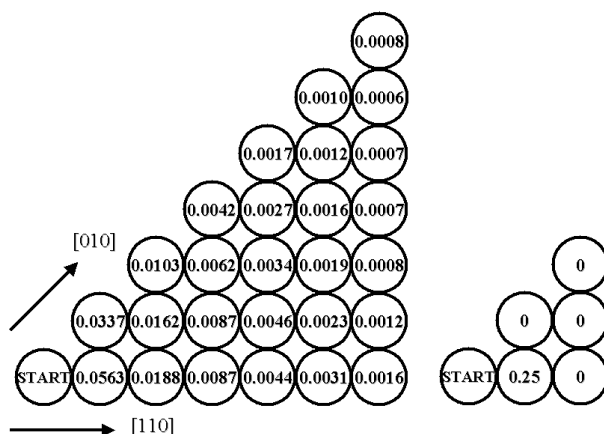
1. ábra: STM felvétel Cu(001) felület egy lépcsőjének $55 \times 41 \text{ nm}^2$ -es környékéről, 42 perccel azután, hogy 0.03 monoréteg In lett depozitálva szobahőmérsékleten. A környező Cu atomoknál nagyobb In atomok világos foltokként jelennek meg. [S2]



2. ábra: STM felvételek egy $14 \times 7 \text{ nm}^2$ Cu(001) felületről különböző időpillanatokban. A vörös szubsztrátum a Cu kristály felületét mutatja atomi felbontásban, a sárga kiemelkedések In atomok, melyek egyenként egy-egy felületi Cu atomot helyettesítenek. Az (a) és (b) felvételek között 140 s telt el, az In atomok pozíciója azonos; további 20 s alatt viszont a négy In atom közül három jónéhány rácsállandónyi ugrást végzett. [S1]

hőmérsékleten viszont az ugrások lesznek rendkívül ritkák. Lehetőség volt viszont arra, hogy az ugrásvektorok gyakoriságát meghatározzuk, amit a 3. ábrán mutatunk. Megjegyezzük, hogy bár a kisebb ugrásoknak nagyobb a valószínűsége, még az öt rácsállandójú ugrásoké is jelentős.

Amint a 3. ábrán látszik, az ugrásvektorok eloszlása fundamentálisan különbözik a szomszédos rácspontra való lépésektől, vagyis az In atomok diffúziója nem a szomszédos Cu

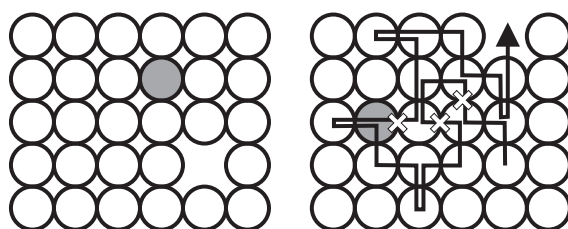


3. ábra: Az ugrásvektorok eloszlása, amit 320 K hőmérsékleten STM felvételek alapján határoztunk meg. A számok azt jelzik, hogy mekkora valószínűséggel ugrik az In atom a jelölt pozícióba; csak a nem ekvivalens pozíciókat tüntettük fel. Összehasonlításként az egyszerű diffúzió lépésének eloszlását mutatjuk a jobboldalon. [S2]

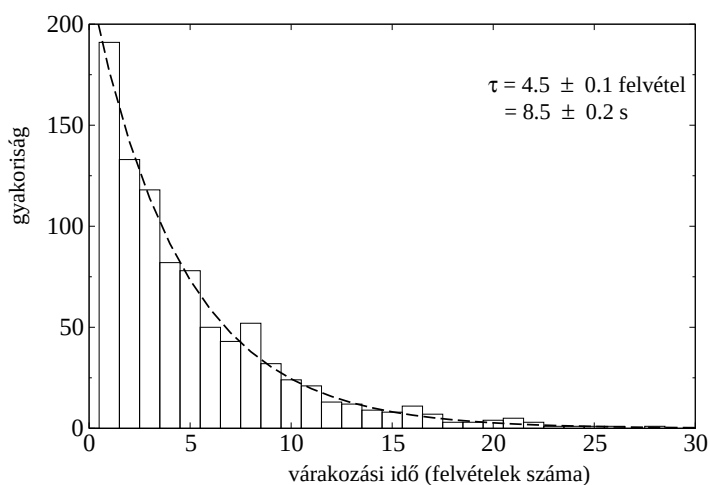
atomokkal való helycserén alapul. Így arra gondolhatunk, hogy a folyamat egy „segéd részecske” segítségével történik, amit lehet adatom (Cu atom a felső atomi réteg tetején) vagy vakancia (hiányzó atom a felső atomi rétegből). Az első lehetőséget kizárhatjuk az 1. ábra alapján: egy In atom a Cu adatommal való helycsere után adatommá válna, majd az In adatom az atomi lépcsőkhöz diffundálna anélkül, hogy előtte belépne a felső atomi rétegbe. Ebben az esetben a beágyazott In atomok eltűnnének az STM felvételtől, és teljesen máshol (a lépcsők környékén) bukkannának fel; viszont egyáltalán nem ezt tapasztaljuk.

Így arra a következtetésre jutunk, hogy a felületi rétegbe ágyazott In atomok a mobilitásukat felületi vakanciáknak köszönhetik. A 4. ábra azt illusztrálja, hogy egyetlen felületi vakancia hogyan helyezhet át egy felületi atomot (akár In, akár Cu atomot) több rácsállandónyi távolságra. Ebben a mechanizmusban az In atomok ugrásának hossza attól függ, hogy hányszor találkoznak ugyanazzal a vakanciával, és ezeknek a találkozásoknak az iránya mennyire korrelált. Minden egyes ugrás pedig egy-egy új vakanciával való találkozás következménye.

Meghatároztuk az egyes ugrások között eltelt idő eloszlását (5. ábra). Az ugrások kö-



4. ábra: Példa egy olyan diffúziós eseményre, amelyben az In atom több rácsállandónyi elmozdulást szenved. Az In-vakancia helycserék $\times$ -szel vannak jelölve, melyek mutatják az In atom útját a kezdeti- és a végállapot között. [S2]



5. ábra: A várakozási idő statisztika In atomok ugrási eseményei között, mely 320 K hőmérsékleten végzett STM felvételesorozat kiértékelésével készült, a felvételek között 1.88 s telt el. A szaggatott vonal $\tau = 8.5$ s időállandójú exponenciális illesztést mutat. [S2]

zötti várakozási idő exponenciális eloszlású, ami arra enged következtetni, hogy az egyes ugrások időben korrelálatlanok, így azokat különböző vakanciák okozták, melyek függetlenül, véletlen időben keletkeztek. Mivel egy vakancia tipikusan több In atommal is találkozhat, természetesen adódik, hogy egymáshoz közeli In atomok egy időben ugranak.

Nem meglepő, hogy az STM felvételeken sohasem láttunk vakanciákat, valamint a felvételesorozatokon nem lehetett felbontani a hosszú ugrásokat sem elemi lépésekre. Molekuladynamikai szimulációk segítségével kiszámoltuk a felületi vakanciák keletkezési energiáját, valamint a diffúziós energiagátak értékét az In atom közelében. Ehhez a „beágyazott atom módszer” alkalmaztuk (angol rövidítéssel EAM) [18], ahol a fématomok közötti kölcsönhatásra a Finnis-Sinclair potenciált [19] használtuk; a számítást egy $15 \times 15 \times 15$ atom méretű Cu tömbön végeztük. A számítások alapján szobahőmérsékleten minden kb. 6×10^9 felületi Cu atom közül egy hiányzik, és ez a vakancia kb. 10^8 Hz frekvenciával lép a szomszédos rácspontra. Ezek az értékek tipikusak alacsony indexű fémfelületekre, és azt is mutatják, hogy miért olyan nehéz látni a vakanciák diffúzióját. Olyan alacsony hőmérsékleten, amelyen a vakancia mozgása már elég lomha ahhoz, hogy egy inherensen lassú berendezéssel, mint az STM követni lehessen a mozgását, a vakanciák megtalálási valószínűsége reménytelenül közel van nullához. Olyan hőmérsékleten viszont, ahol már elfogadható a vakanciák sűrűsége, túl gyorsan mozognak ahhoz, hogy a felvételeken követni lehessen a mozgásukat.

2. ATOMI MODELL

A fenti jelenség mögötti mechanizmust kvantitatívan ebben a fejezetben egy diszkrét modell segítségével mutatjuk be. Az ebben és a következő fejezetben bemutatott eredmények egy olyan elméleti-kísérleti kollaborációban jöttek létre, amelynek az elméleti oldalát én vezettem, és (az előző fejezetben már említett EAM energiagát számolások kivételével) én

dolgoztam ki. Jelen fejezet eredményei alkotják a T1a tézispontot, amely az [S1, S2, S3, S4] publikációimon alapul, továbbá az [E1, E18] publikációk is szorosan kapcsolódnak hozzá.

Az általánosabb problémafelvetés kedvéért ezentúl az idegen In atomot *nyomjelző* atomnak fogjuk hívni. A nyomjelző atomok vakanciák általi mozgása érdekes statisztikus fizikai probléma, amelyet már többen is vizsgáltak. A legegyszerűbb esetet Brummelhuis és Hilhorst oldotta meg [20], akik torzítatlan vakancia-diffúziót feltételeztek (vagyis a vakancia mozgása szempontjából a nyomjelző és a többi atom azonosan viselkedett), a rács pedig kétdimenziós végtelen négyzetrács volt. Ebben a modellben egyetlen, végtelen élettartalmú vakancia van jelen, amely rendszeres időközönként helyet cserél egy véletlenszerűen kiválasztott szomszédjával. A megoldás a vakancia és a nyomjelző atom mozgásának szétválasztásával kapható: a nyomjelző atom egyes lépéseinek korreláltságát abból tudjuk kiszámolni, hogy mi a valószínűsége annak, hogy a vakancia visszatér a nyomjelző atomhoz ugyanabból az irányból, merőlegesen, vagy ellentétes irányból, mint amelyik irányból utoljára elhagyta azt. A nyomjelző atom megtalálási valószínűsége időben szétterül, és hosszú idő után a következő függvénnyel lehet közelíteni:

$$P_t(\mathbf{r}) = \frac{2(\pi - 1)}{\log t} K_0 \left(\frac{r}{[\log t / (4\pi(\pi - 1))]^{1/2}} \right), \quad (1)$$

ahol K_0 a módosított Bessel függvény, a t idő a vakancia lépéseit számolja, és a $t = 0$ időpillanatban a vakancia a nyomjelző atom mellett van. Az eloszlás nem-Gauss-i jellege tipikus a vakanciák által hajtott diffúzióra. A nyomjelző atom térbeli eloszlása gyengén (logaritmikusan) divergál az idővel, ami annak a következménye, hogy a véletlen bolyongás visszatérési valószínűsége két dimenzióban még éppen egységnyi (kettő a marginális dimenzió). Magasabb dimenzióban ugyanis a véletlen bolyongást végző vakancia 1-nél kisebb valószínűséggel tér vissza a kiindulási helyére, ami ahhoz vezet, hogy a nyomjelző atom elmozdulása aszimptotikusan is véges marad.

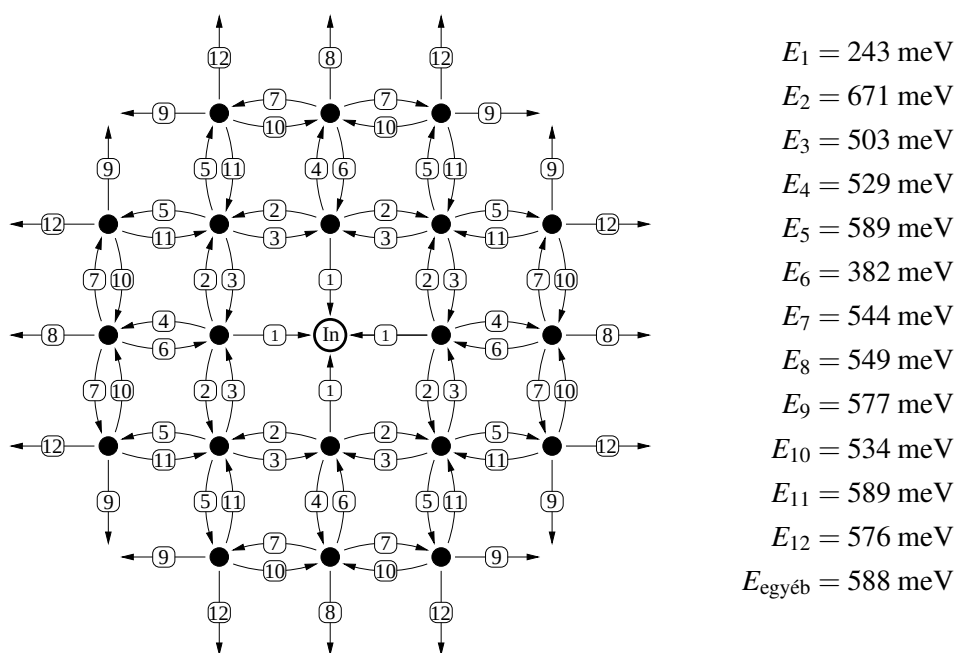
Ugyanez a problémát Toroczkai más módszerrel oldotta meg általános dimenzió esetére [21]. Ebből a megoldásból kiszámolható a vakancia-nyomjelzőatom helycserék száma t ideig: ez a szám két dimenzióban geometriai eloszlású, $(\log t)/\pi$ várható értékkel. A probléma folytonos változatát egy végtelen rendű perturbációs elméletben számolták ki [22], amely megoldás visszaadja a rácsmodell aszimptotikus alakját. A rács alapú számolásokat általánosították arra az esetre, amikor a vakancia diffúziója szempontjából a nyomjelző atom és a szubsztrátum atomok nem voltak ekvivalensek [23]: ebben a modellben a vakancia-nyomjelzőatom és a vakancia-szubsztrátumatom helycserék valószínűségének aránya szabad paraméter volt, míg a vakancia lépéseinek rátája konstans maradt. Taszító kölcsönhatás csökkenti, míg enyhén vonzó kölcsönhatás növeli a nyomjelző atom eloszlásának szétterülését.

A fenti analitikus megoldások szorosan kapcsolódnak az In/Cu(001) kísérleti rendszerünkhöz, és helyesen megjósolják annak több karakterisztikus tulajdonságát (mint például az eloszlás távolság szerinti függését a Bessel függvény írja le, szélessége logaritmikus). Viszont a kísérletekkel való kvantitatív összehasonlításhoz további módosítások szükségesek (gondoljunk itt a megfelelő határfeltételre és a véges vakancia élettartamra), amit az alábbiakban mutatunk be.

Numerikus modellem egy $\ell \times \ell$ méretű kétdimenziós négyzetrácson alapul, amely a Cu

kristály felső atomi rétegének felel meg, a határok pedig az atomi lépcsőket jelentik. A rácspontokat kettő kivételével szubsztrátum atomok foglalják el. A kezdeti időpillanatban a rács közepére helyezett origóban van a nyomjelző atom, mellette pedig az (1,0) helyen a vakancia. Ez annak az állapotnak felel meg, amikor a vakancia és a nyomjelző atom éppen először cseréltek helyet.

Az időfejlődés során az az egyetlen megengedett lépés, amelyben a vakancia helyet cserél a négy szomszédja közül az egyikkel. A helycserék rátája függ a lokális környezettől, vagyis a vakancia és a nyomjelző atom relatív elhelyezkedésétől. A vakancia diffúziós rátájának környezetfüggése az atomok soktest-kölcsönhatásának következménye, amit az EAM számítások is megpróbálnak figyelembe venni. (Az az egyszerűsített kép sem áll messze a valóságtól, még ha mi nem is ezt az utat követtük, mely szerint a Cu atomoknál nagyobb méretű In atom lokálisan deformálja az atomrácsot, amely a vakancia környezetében létrejövő ellentétes előjelű deformációval egy effektív kölcsönhatást eredményez.) A hőmérséklet-aktivált diffúziós rátát arányosnak vesszük az $e^{-(\Delta E/k_B T)}$ Boltzmann-faktorral, ahol ΔE a diffúziós lépés aktivációs energiája. Ezeket az energiagát értékeket az előző fejezetben említett EAM módszerrel számoltuk ki az In/Cu(001) rendszerre, és a 6. ábrán mutatjuk be. Mivel az energiagát különbségek nagyok a $k_B T$ hőmérsékleti energiánál (szobahőmérsékleten kb. 25 meV), a diffúziós ráták között óriási az eltérés.



6. ábra: Vakancia diffúzió energiagát értékek a Cu(001) felső rétegében egy In atom közelében, az EAM módszerrel számolva. A nyilak a vakancia mozgásának irányát mutatják. [S3]

Amikor a vakancia eléri a rács szélét, véletlen bolyongását leállítjuk, ami fizikailag az atomi lépcsőknél való rekombinációnak felel meg. A vakancia a véges élettartama alatt elmozdítja az útjába került atomokat, sokat közülük többször is. Így a nyomjelző atom is más

helyre kerülhetett, mint a kiindulási pozíciója. Sok független vakancia hatását kiátlagolva ez egy eloszlást ad arra az elmozdulásvektorra, amit a nyomjelző atom egyetlen vakancia következtében elszenved. A rács véges méretéből adódó határfeltételek és a diffúziós ráta relatívpozíció-függése miatt ez a modell analitikusan nem oldható meg.

A modell numerikus megoldásakor szétválasztjuk a vakancia és a nyomjelző atom mozgását, hasonlóan a korábban említett Brummelhuis-Hilhorst analitikus megoldáshoz. A véges rácsméret miatt ez esetünkben egy közelítés bevezetését jelenti, ami akkor érvényes, ha a nyomjelző atom közel marad a rács közepéhez. (Tipikusan kisebb mint 8 rácsállandónyi elmozdulást fogunk vizsgálni a rács széleitől 100–200 rácsállandónyi távolságban, és az eredmények csak gyengén, logaritmikusan függenek a rács méretétől.)

Először kiszámoljuk, hogy a vakancia, miután a nyomjelző atom melletti rácspontban elengedtük, mekkora valószínűséggel tér vissza a nyomjelző atomhoz azonos irányból (p_{azonos}), merőleges irányból ($p_{\text{merőleges}}$), illetve ellentétes irányból ($p_{\text{ellentétes}}$), valamint mekkora annak valószínűsége, hogy rekombinálódik a rács szélén ahelyett, hogy visszatérne ($p_{\text{rekombináció}}$). Természetesen $p_{\text{azonos}} + 2p_{\text{merőleges}} + p_{\text{ellentétes}} + p_{\text{rekombináció}} = 1$. Ezeknek a visszatérési és rekombinációs valószínűségeknek az ismeretében a nyomjelző atom mozgását írjuk le, amely egy véges hosszúságú torzított véletlen bolyongást végez. Minden lépés iránya az előző lépéshez képest, valamint az, hogy egy lépés az utolsó volt-e, a visszatérési és rekombinációs valószínűségek függvénye. Így elveszítjük ugyan az egy vakancia hatására bekövetkező elmozdulás időfejlődésének részleteit, de a kísérletekkel való összehasonlítás szempontjából ez úgysem számít az STM felvételek időfelbontása miatt.

A gyakorlatban a visszatérési és rekombinációs valószínűségeket, valamint a nyomjelző atom mozgását is a valószínűségek közvetlen kiértékelésével végezzük, ami jobb konvergencia tulajdonságokkal bír, mint a Monte-Carlo típusú módszerek.

Először tekintsük a visszatérési és rekombinációs valószínűségek kiszámolását. Minden $\mathbf{r}$ rácsponthoz rendelünk egy $q(\mathbf{r}, s)$ változót, ami azt a valószínűséget méri, hogy a vakancia s atomi lépés után ezen a helyen van, és még nem cserélt helyet a nyomjelző atommal (és természetesen még nem rekombinálódott). A kezdeti $s = 0$ pillanatban ez mindenhol nulla, kivéve az $\mathbf{r} = (1, 0)$ helyen, ahol értéke 1: itt indítjuk el a vakanciát. A rács széle, valamint a nyomjelző atomot tartalmazó $(0, 0)$ rácspont nyelőhely a vakancia számára. A vakancia minden egyes atomi lépésére párhuzamosan felülírjuk a q változókat: minden egyes rácsponthoz tartozó értéket szétosztunk a négy szomszédja között a lokálisan értelmezett diffúziós ráták arányában. A lépések során feljegyezzük, hogy kumulatíván mennyi valószínűség áramlik be az origóban elhelyezett nyelőpontba a különböző irányokból, valamint mennyi áramlik ki a rács szélén. A vakancia összes lépésére felösszegezve ezek adják a visszatérési és rekombinációs valószínűségeket. Ez az iteráció gyorsan konvergál, melyet könnyen mérhetünk az összes rácspont q értékeinek összegével, mely nullához tart.

A másik számítás, amely a nyomjelző atom mozgását írja le, hasonló, csak kicsit összetettebb. Első közelítésben (később látni fogjuk, hogy ezen miért kell majd finomítani) itt minden rácspont minden belépő éléhez rendelünk egy számot, amelyik azt a valószínűséget méri, hogy n lépés után (minden lépés a vakancia egy visszatérésének felel meg) a nyomjelző atom az adott rácsponton van, és az adott él mentén érkezett. Ezen felül minden rácsponthoz rendelünk egy másik változót is, amely annak a valószínűségét összegzi fel, hogy a nyom-

jelző atom ezen a helyen vált immobilissá. Ezeket az érkezési és immobilissá-válási valószínűségeket az előzőekben kiszámolt vakancia-visszatérési és rekombinációs valószínűségek felhasználásával párhuzamos felülírással iteráljuk.

A modell első tesztjeként a torzítatlan vakancia-diffúzió esetét vizsgáltuk, amely a végtelen hőmérsékletnek felel meg. A nyomjelző atom ugrásainak eloszlása hasonló volt, mint a kísérletekben, de kvantitatívan csak akkor közelítette meg, ha az egyetlen fennmaradó paramétert (az ℓ rácsméretet) csillagászati méretűvé választottuk. Ez világosan mutatja, hogy az In/Cu(001) rendszert nem lehet mindenhol azonos diffúziórátaival közelíteni.

Az EAM számításokból kapott energiagátak felhasználásával, a kísérletekben tipikusan használt $T = 320$ K hőmérsékleten és $\ell = 401$ rácsméret esetén (ami a tipikus terasz szélességnek felel meg), a visszatérési és rekombinációs valószínűségekre a következők adódnak: $p_{\text{azonos}} = 1 - 2.4 \times 10^{-7}$, $p_{\text{merőleges}} = 1.1 \times 10^{-7}$, $p_{\text{ellentétes}} = 4.2 \times 10^{-9}$, és $p_{\text{rekombináció}} = 1.1 \times 10^{-8}$. Ezek az értékek gyengén függenek ℓ -től, például a nyomjelző atom ebből kiszámolt átlagos négyzetes elmozdulása logaritmikus:

$$\langle r^2 \rangle \propto \log(\ell/\ell_0). \quad (2)$$

Ez arra vezethető vissza, hogy a véletlen bolyongás visszatérési valószínűségének marginális dimenziója kettő, ugyanúgy mint a Brummelhuis-Hilhorst megoldás $\log t$ szerinti időfüggése.

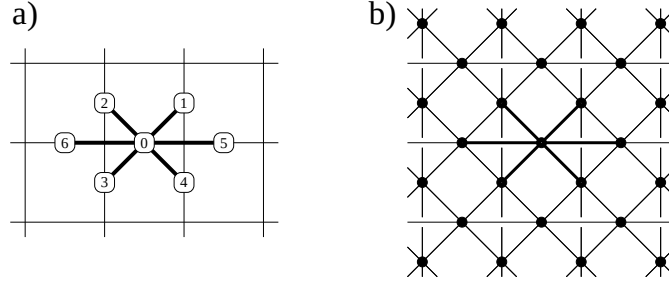
Az In/Cu(001) rendszer esetében a vakancia In atommal való felcserélési energiagátja jelentősen kisebb, mint a többi energiagát. Így legtöbb esetben a vakancia az előző eltávozásával azonos irányból tér vissza, és a nyomjelző atom egyes lépései erősen antikorreáltak. A numerikus és az elméleti megközelítést is jelentősen segíti, ha nem követjük a nyomjelzőatom-vakancia pár jelentős számú oda-vissza helycseréjét. Ebből a célból jelöljük ε -nal annak a valószínűségét, hogy a vakancia nem tér vissza az utolsó eltávozásával azonos irányból: $p_{\text{azonos}} = 1 - \varepsilon$; az előző bekezdésben említett paraméterek esetén $\varepsilon = 2.4 \times 10^{-7}$. Vezessük be a következő mennyiségeket:

$$\begin{aligned} \hat{p}_{\text{merőleges}} &= p_{\text{merőleges}}/\varepsilon \\ \hat{p}_{\text{ellentétes}} &= p_{\text{ellentétes}}/\varepsilon \\ \hat{p}_{\text{rekombináció}} &= p_{\text{rekombináció}}/\varepsilon \end{aligned} \quad (3)$$

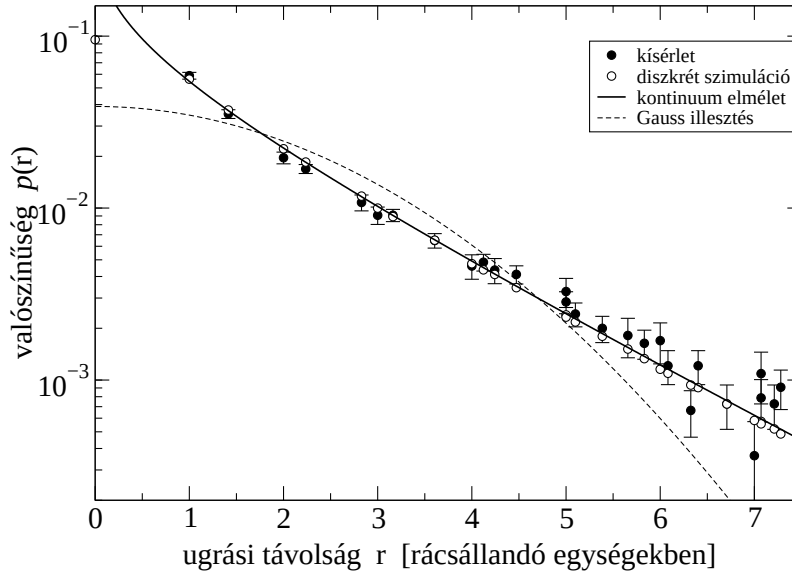
így

$$2\hat{p}_{\text{merőleges}} + \hat{p}_{\text{ellentétes}} + \hat{p}_{\text{rekombináció}} = 1. \quad (4)$$

Rendeljük a kvázi-kötött nyomjelzőatom-vakancia párt, mely nagyon sokszor (átlagosan $1/\varepsilon$ -szor) cserél helyet, az eredeti atomi rács *egy éléhez*. Így a nyomjelzőatom-vakancia pár az atomi rács élein bolyong (7. ábra). Egy lépés során a pár a négy merőleges él valamelyikére lép $\hat{p}_{\text{merőleges}}/2$ valószínűséggel, a két párhuzamos élre pedig $\hat{p}_{\text{ellentétes}}/2$ valószínűséggel. Az $1/2$ faktor abból adódik, hogy a vakancia a kvázi-kötött állapotot jelölő él egyik végén lép ki, melynek valószínűsége kis ε esetén mindkét oldalon nagyon jó közelítéssel $1/2$ -nek adódik. Ennek a megközelítésnek az egyik előnye, hogy a nyomjelző atom mozgását jóval kevesebb lépéssel írhatjuk le (ami a numerikus számolást könnyíti meg), másik pedig hogy az élről-élre történő lépések függetlenek (ez pedig az analitikus számolást segíti).



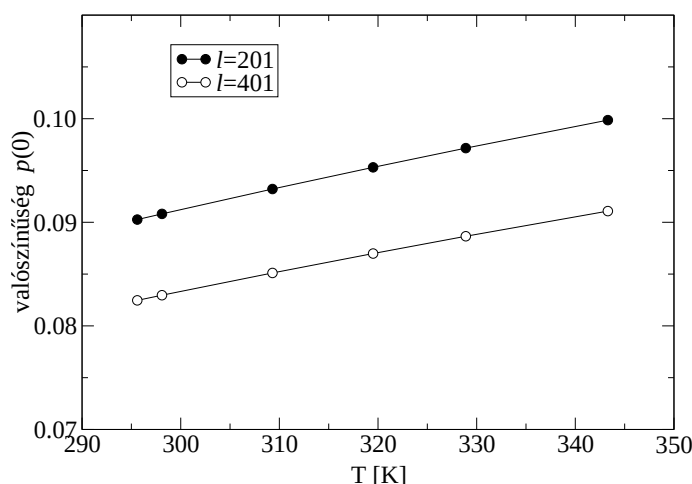
7. ábra: (a) A vakancia-nyomjelző atom pár lépései a rácséleken. Ha a vakancia-nyomjelző párt a rácsél közepéhez rendeljük, akkor a pár a kijelölt helyekre ugorhat. A négyzetes atomi rácsot vékony vonal jelöli. (b) Az atomi rács éleiből alkotott rács, amin a vakancia-nyomjelző pár mozog. Vastag vonal jelöli azokat a szomszédokat, amelyek a középső rácspontból egy lépéssel elérhetőek. Ez a rács tekinthető egy négyzetrácsnak, ami az atomi rácshoz képest 45° -kal el van forgatva, bizonyos extra élekkel kiegészítve. [S3]



8. ábra: A nyomjelző atom ugrásainak valószínűsége $T = 320$ K hőmérsékleten $\ell = 401$ méretű rácsra. A fekete körök felelnek meg a kísérleti méréseknek, a fehér körök az atomi modell eredményei, a folytonos vonal jelöli a kontinuum megoldást (következő fejezet). Az adatok azt mutatják, hogy nincs jelentős irány szerinti függés, tehát jó közelítéssel az ugrás hosszúságának függvényében monoton viselkedést tapasztalunk. – Mindegyik adatsort egyenként normáltuk úgy, hogy az $1 \leq |\mathbf{r}| \leq 6$ ugrások valószínűségének összege egységnyi legyen (ezen ugrásokat lehet elfogadható hibával mérni kísérletileg). Ez azt eredményezi, hogy az ábrázolt értékekben szerepel egy 1-hez közeli szorzófaktor, amit elsősorban a normalizációban figyelembe nem vett $p(0)$ befolyásol, lásd a 9. ábrát. – Összehasonlítás kedvéért szaggatott vonallal tüntettük fel a diffúziós rendszerekben gyakran előforduló Gauss függvényt, ami jelen esetben egyáltalán nem illeszkedik a mért és számolt adatpontokra. A folytonos vonallal jelölt kontinuum elméletet a következő fejezetben tárgyaljuk. [S2, S3]

A fentieket felhasználva a nyomjelző atom mozgását a következők szerint írhatjuk le: a nyomjelző atom először egy kvázi-kötött párt alkot egy vakanciával az eredeti pozíciójával határos négy él egyikén, utána a pár az élekből alkotott rácson bolyong, majd végül (amely minden lépés után $\hat{p}_{\text{rekombináció}}$ valószínűséggel következik be) kiszabadul az utoljára látogatott él egyik véletlenül kiválasztott végén. Az így kiszámolt elmozdulásvektor eloszlását a 8. ábra mutatja, mely kiváló egyezést mutat a kísérleti eredményekkel. Megjegyezzük, hogy a numerikus eredmények nem tartalmazznak illesztési paramétert.

A numerikus modellezés általános előnyei közé tartozik, hogy olyan mennyiségek is könnyen hozzáférhetőek, amelyek kísérletileg elérhetetlenek. Esetünkben ilyen annak a valószínűsége, hogy a nyomjelző atom találkozott egy vakanciával, de az eredő elmozdulása nullának adódott. Ennek a mennyiségnek a hőmérsékletfüggését mutatjuk a 9. ábrán. Mivel ez az érték kicsi, és csak gyengén függ a paraméterektől, ez lehetőséget ad arra, hogy a (csak nem-nulla elmozdulást mérő) kísérleti mérésekből további következtetéseket vonjunk le, mint például meghatározzuk a felületi vakanciák keletkezési energiáját [S4].



9. ábra: Annak a valószínűsége, hogy a nyomjelző atom találkozott egy vakanciával, de a többszörös találkozásból származó eredő elmozdulás nulla. A mennyiség hőmérséklet- és rácsméret-függése viszonylag gyenge. [S3]

Adott energiagát értékek esetén a modell két paramétert tartalmaz: a hőmérsékletet és a rácsméretet. A kísérletekkel való összehasonlításakor mindkettő függetlenül mérhető, vagyis nincs illesztési paraméterünk. A 8. ábrán a $T = 320$ K hőmérsékleten számolt értékek, ha $\ell/2$ -t a legközelebbi atomi lépcsőtől mért távolságra állítjuk, nagyon jó egyezést mutatnak a kísérleti mérésekkel. Más hőmérsékleten végzett mérések esetén viszont a legjobb egyezést akkor kaptuk, ha a numerikus modellben a rácsméretet a kísérletileg meghatározottnál 2-3-szoros faktorral kisebbre állítottuk [S4]. Habár ez a korrekciós faktor nagynak tűnik, a visszatérési valószínűségekben ez sokkal kisebb változást okozott, mivel azok logaritmikusan függenek a rácsmérettől. A legvalószínűbb magyarázat az, hogy a kísérleti rendszerben olyan nem detektált rácshibák fordultak elő, amelyek nyelőpontként hatottak a vakanciára, és közelebb voltak az In atomhoz a legközelebbi atomi lépcsőnél.

3. KONTINUUM MODELL

Az előző fejezet diszkrét modellje jó numerikus egyezést tudott találni az In/Cu(001) kísérleti rendszerrel, de hátránya, hogy (különösen a nyomjelző atom környezetében megváltozott diffúziós energiagátak miatt) nem írható le kevés paraméterrel. Ezt megoldandó egy olyan kontinuum modellt mutatunk be, amely az ugrások valószínűségét írja le egyetlen paraméter felhasználásával. Az itt közölt eredmények alkotják a T1b tézispontot, mely az [S2, S3] publikációimon alapul.

Legyen $\rho(\mathbf{r}, n)$ annak a valószínűsége, hogy a nyomjelzőatom-vakancia pár az $\mathbf{r}$ helyen van, miután ez a pár n lépést tett. Mivel a pár egymást követő lépései függetlennek tekinthetjük, felírhatunk egy effektív diffúziós egyenletet:

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, n)}{\partial n} = D_{\text{eff}} \nabla^2 \rho - c \rho. \quad (5)$$

A jobboldal első tagja azoknak a lépéseknek felel meg, amelyet a pár az atomi rács éleiből alkotott rácson tesz meg, itt D_{eff} az egy lépés átlagos négyzetes elmozdulását jelöli. A második tag a vakancia rekombinációjának felel meg, itt felbomlik a pár. A térbeli koordinátát és az n -et folytonosnak tekintve, Dirac-delta kezdeti feltétel esetén a megoldás

$$\rho(\mathbf{r}, n) = \frac{1}{4\pi D_{\text{eff}} n} \exp\left(-\frac{r^2}{4D_{\text{eff}} n} - cn\right). \quad (6)$$

A nyomjelző atom vakancia-rekombináció utáni aszimptotikus eloszlását az (5). egyenlet veszteség-tagjának n -szerinti integrálja adja:

$$p(\mathbf{r}) = \int_0^\infty c \rho(\mathbf{r}, n) dn = \frac{1}{2\pi} \frac{c}{D_{\text{eff}}} K_0\left(\frac{r}{\sqrt{D_{\text{eff}}/c}}\right), \quad (7)$$

ahol K_0 a nulladrendű módosított Bessel-függvény. Ennek a megoldásnak a függvényalakja hasonló az (1) Brummelhuis-Hilhorst rács-megoldáshoz, minden különbségük ellenére (pl. határfeltétel, véges vakanciaélettartam, torzított/torzítatlan vakanciadiffúzió).

Itt megállapíthatjuk, hogy aszimptotikus ($n \rightarrow \infty$) viselkedés esetén az egyetlen releváns paraméter a D_{eff}/c . Például a nyomjelző atom átlagos négyzetes elmozdulása $\langle r^2 \rangle$ arányos (rácskorrekciókkal) a Bessel-függvény szélességének négyzetével: $\langle r^2 \rangle \propto D_{\text{eff}}/c$. A hátralevő feladatunk a kontinuum modell és az atomi modell összekapcsolása, vagyis a D_{eff} és a c kifejezése a visszatérési valószínűségekből.

Jelölje $P_0^{(n)}$ annak valószínűségét, hogy a vakancia-nyomjelző pár n lépés után az atomi rács egy tetszőlegesen kiválasztott, „0”-val jelölt élén tartózkodik. A $P_0^{(n+1)}$ értékét az 1, 2, ..., 6 élek járuléka adja (lásd a 7. ábrát):

$$P_0^{(n+1)} = \frac{\hat{P}_{\text{merőleges}}}{2} \left(P_1^{(n)} + P_2^{(n)} + P_3^{(n)} + P_4^{(n)} \right) + \frac{\hat{P}_{\text{ellentétes}}}{2} \left(P_5^{(n)} + P_6^{(n)} \right). \quad (8)$$

Egy lépés alatt P_0 változása, (4) felhasználásával:

$$P_0^{(n+1)} - P_0 = \frac{\hat{P}_{\text{merőleges}}}{2} (P_1^{(n)} + P_2^{(n)} + P_3^{(n)} + P_4^{(n)} - 4P_0^{(n)}) + \frac{\hat{P}_{\text{ellentétes}}}{2} (P_5^{(n)} + P_6^{(n)} - 2P_0^{(n)}) - \hat{P}_{\text{rekombináció}} P_0^{(n)}. \quad (9)$$

A jobboldalon szereplő különbség az n szerinti deriváltat közelíti, a baloldalon levő tagok pedig a Laplace rács-közelítését adják:

$$\nabla^2 P = a_{\text{merőleges}}^{-2} (P_1 + P_2 + P_3 + P_4 - 4P_0)$$

valamint

$$\partial_x^2 P = a_{\text{ellentétes}}^{-2} (P_5 + P_6 - 2P_0) \approx \frac{1}{2} \nabla^2 P, \quad (10)$$

ahol $a_{\text{merőleges}} = 1/\sqrt{2}$, és $a_{\text{ellentétes}} = 1$ az atomi rács rácsállandójának egységeiben; a (10). egyenletben feltételeztük, hogy a második deriváltak átlagosan minden irányban ugyanakkorak. Így a következő egyenletet kapjuk:

$$\frac{\partial P_0}{\partial n} = \underbrace{\frac{\hat{P}_{\text{merőleges}} + \hat{P}_{\text{ellentétes}}}{4}}_{D_{\text{eff}}} \nabla^2 P - \underbrace{\hat{P}_{\text{rekombináció}}}_{c} P_0, \quad (11)$$

ahonnan az (5). egyelettel összehasonlítva leolvashatjuk a D_{eff} és c együtthatókat.

Így a nyomjelző atom átlagos négyzetes elmozdulására a következő kifejezést kapjuk:

$$\langle r^2 \rangle \propto \frac{D_{\text{eff}}}{c} = \frac{\hat{P}_{\text{merőleges}} + \hat{P}_{\text{ellentétes}}}{4\hat{P}_{\text{rekombináció}}}. \quad (12)$$

A (7) kontinuum megoldást a fenti paraméter értékek mellett összehasonlítottuk az atomi modellel és a kísérletekkel a 8. ábrán. Jó egyezést találtunk még kis r értékeknél is, ahol elvileg jelentősebb rácskorrekciókra lehet számítani.

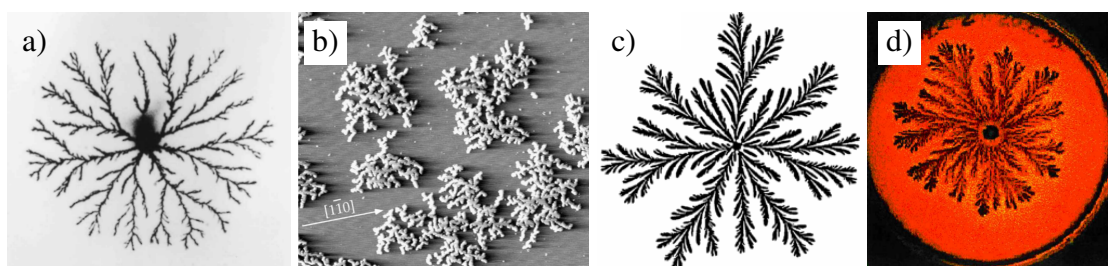
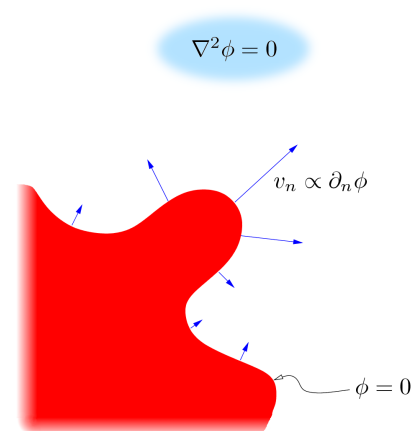
A fentiekben ismertetett atomi- és kontinuum modell jó leírását adja a kísérletileg vizsgált In/Cu(001) rendszernek. Várákozás szerint az itt bemutatott mechanizmus rendszerek széles skálájánál releváns: ez határozza meg az alacsony indexű fémkristályok felső rétegében található atomok mobilitását.

I.B. Diffúzió-dominált növekedési folyamatok

Az egyensúlytól távoli jelenségek körében egy fontos csoportot alkotnak azok a növekedési rendszerek, amelyekben a domináns, vagyis a lokális növekedési rátát meghatározó folyamat diffúzív jellegű. Annak ellenére, hogy a magukra hagyott, egyensúlyhoz közelítő rendszerekben a diffúzió azok homogenizációjához vezet, a hajtott, egyensúlytól távoli diffúzió-dominált növekedési folyamatokban mintázatképződést figyelhetünk meg, mely gazdag térbeli struktúrákat eredményez.

A legegyszerűbb esetet véve tekintsünk egy frontot, amely egy növekedő tartományt határol. A front mozgását egy olyan ϕ skalármező segítségével írjuk le, amely a front terjedési irányába eső fél-térben van definiálva, itt kielégíti a Laplace-egyenletet. Peremfeltételként a fronton felvett értéke konstans, amit vehetünk nullának, a front lokális sebessége pedig minden egyes pontban arányos a mező gradiensevel.

A fenti egyenletek fizikai folyamatok széles skáláját írhatják le (10. ábra): például fémek elektrodepozícióját alacsony sókoncentráció és alacsony katód-anód feszültségkülönbség mellett [24, 5], atomok irreverzibilis adszorpcióját kristályfelületen megfelelően alacsony hőmérsékleten [25], viszkózus ujjasodást, melyben két nagyon közeli párhuzamos üveglapból álló Hele-Shaw cellában nem-viszkózus anyag (például levegő) kiszorít egy viszkózus folyadékot [26, 27], valamint bizonyos biológiai növekedési rendszereket [28, 29]. A ϕ skalármező a különböző esetekben különböző fizikai mennyiséget takar: jelentheti egy diffundáló



10. ábra: (a) Cink elektrodepozíciója vizes oldatból 0.1 mm vastagságú cellában, alacsony ZnSO_4 koncentráció és alacsony feszültség mellett [24, 5]. (b) STM felvétel Ag aggregátumokról Pt(111) felületen 110 K hőmérsékleten [25]. (c) Viszkózus ujjasodás 0.13 mm vastagságú Hele-Shaw cellában, levegő (feketével jelölve) szorít ki olajat [26]. (d) Paenibacillus dendritiformis baktériumkolónia, kemény agaragaron és rendkívül alacsony tápanyagkoncentráció mellett [5]. A keletkező struktúrák átmérője (a) 3 cm, (b) 500 Å (egy sziget átmérője), (c) 20 cm, (d) 10 cm.

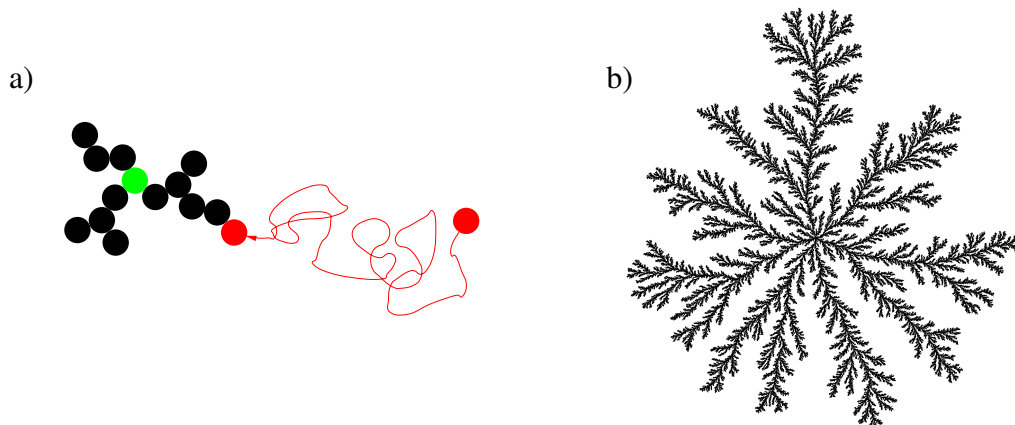
anyag koncentrációját, amely a növekedő aggregátumon kívüli térben forrás- és nyelőtagok hiányában, lassan mozgó határfeltételek esetén kielégíti a Laplace-egyenletet. Az aggregátum határa nyelőként nulla koncentrációt tart fenn, a határ pedig a beérkező anyag fluxusával, vagyis a koncentráció gradiensevel arányos sebességgel terjed. Más esetekben a ϕ mező elektrosztatikus potenciált reprezentál, vagy például a viszkózus ujjasodás esetében a nyomásnak felel meg: a növekedő levegőbuborékban, így annak határán is a nyomás konstans. A viszkózus folyadékban viszont a kicsi résvastagság miatt a Darcy-törvény alkalmazható, vagyis a folyadék sebessége (a határon is) arányos a nyomás gradiensevel, ami összenyomhatatlan folyadék esetén azt eredményezi, hogy a nyomás a folyadék belsejében kielégíti a Laplace-egyenletet.

Ezek a rendszerek, amint már említettük, gazdag térbeli struktúrákat hoznak létre. A mintázatképződési jelenségek mögött különböző instabilitások állhatnak [7, 8], amely esetünkben a Mullins-Sekerka instabilitás [30, 31]. Ha ugyanis a sima front tartalmaz egy kicsi perturbációt, például egy kitüremkedést, akkor a front ezen része nagyobb fluxust gyűjt be, mint a környezete (ezen az elven működik a villámhárító is). Ennek következtében kicsit gyorsabban fog növekedni a környezeténél, ami az instabilitáshoz vezet. Az exponenciálisan növekedő perturbáció hamar kiér a lineáris tartományból, és ha követjük az előző oldal egyenleteinek megoldását, a fronton véges idő alatt egy cusp szingularitást fejlődik ki [32], amely időpillanatot követően már nem lehet folytatni az időfejlődést. Valós rendszerekben mindig jelen van egy olyan, az eddig említetteken túli fizikai jelenség, ami megakadályozza a szingularitás kialakulását. Ez sok esetben a felületi felszűrés, amely megakadályozza a túl kicsi görbületi sugarú részek kialakulását; más esetben viszont a mikroszkopikus részecskék (pl. atomok, baktériumok) véges mérete jelent korlátot a görbületre.

4. BEVEZETÉS: DIFFÚZIÓ-LIMITÁLT AGGREGÁCIÓ

A diffúzió-dominált növekedési folyamatok részecske modelljét 1981-ben alkotta meg Witten és Sander [33]. Ebben a „diffúzió-limitált aggregáció”-nak (DLA) nevezett modellben a növekedő fázist egy részecskékből álló fűrt reprezentálja. Kezdetben a fűrt egyetlen rögzített mag részecskéből áll. Ezután a fűrtől távol szabadon eresztünk egy részecskét, amely véletlen bolyongást végez, mely során ha ütközik a fűrttel, akkor irreverzibilisen hozzátapad és annak részévé válik [11(a) ábra]. Ezután egymás után újabb részecskéket engedünk el, de egyszerre mindig csak egy részecske bolyong, ami infinitezimálisan kicsi fluxusnak felel meg. Nagyon sok részecske hozzáadása után bonyolult, elágazó struktúrát kapunk [11(b) ábra].

A DLA néhány éven belül nagy érdeklődést keltett [34, 35, 36, 37], és hamarosan az egyensúlytól távoli mintázatképző rendszerek egyik ikonikus modelljévé vált – ezt meggyőzően demonstrálja az eredeti publikációra [33] kapott több mint 3600 hivatkozás. A modell egyszerű, fizikailag plauzibilis mikroszkopikus lépésekből áll, viszont egy bonyolult, skálázódó de erős skálázási korrekciókkal rendelkező makroszkopikus objektumokat generál. A numerikus módszerek jelentős fejlődésen mentek keresztül, például kihasználva azt, hogy a véletlen bolyongást a fűrtől távol közelítésektől mentesen is lehet nagy ugrásokkal helyettesíteni; a fűrtől való távolságról az információt egy hatékonyan működő hierarchikus térkép



11. ábra: (a) A diffúzió-limitált aggregáció (DLA) generálásának sematikus ábrázolása. A zöld mag elhelyezése után az egyenként érkező piros diffundáló részecskék a fürttel való első érintkezéskor irreverzibilisen hozzáragadnak ahhoz. (b) 50 000 000 részecskéből álló rácsmentes DLA fürt.

struktúra¹ biztosítja [38]. A modellt rácson kezdték alkalmazni, viszont hamar kiderült, hogy nagyobb fürtök esetén a rács nagyon erős anizotrópiát okoz [38, 39]. (Itt megjegyezzük, hogy például három dimenzióban a különböző rácsok okozta anizotrópia érdekes eredményekhez vezet [E4].) Ez az anizotrópia kiküszöbölhető a rács elhagyásával: a részecskék korongok (két dimenzióban, 2D) vagy gömbök (3D), Brown mozgást végeznek amíg nem ütköznek tetszőleges irányból a fürttel, amikor is pontban az ütközés helyén rögzítjük őket. Megfelelő algoritmusok felhasználásával hatékonyan generálható a rácsmentes DLA: az általam írt program például ekvivalens azzal, hogy a 2D korong alakú részecskék kicsi, az átmérőjük 10^{-3} -szorosának megfelelő hosszúságú ugrásokat végeznek a véletlen bolyongás során; egy $N = 10^6$ részecskéből álló fürt egy modern CPU-magon fél percen belül elkészül, a CPU-idő méretfüggése pedig közel lineáris, empirikusan $\sim N^{1.1}$.

Két dimenzióban a Laplace-i terek és a (komplex) konform függvények szoros kapcsolatát felhasználva egy gyökeresen különböző módszer is létezik a DLA generálására: a komplex egységkört a bonyolult alakú DLA fürt körvonalára képező konform függvény iteratív konstruálásával, ahol minden érkező részecske egy iterációnak felel meg [40, 41]. Ennek a Hastings és Levitov (HL) által kidolgozott módszernek számos előnye mellett (például a „harmonikus mérték”, vagyis a növekedési valószínűség eloszlása, a fürt peremén minden pontban azonnal elérhető), hátrányai is vannak: egyrészt lassú (a CPU-idő méretfüggése N^2 -es), másrészt a részecskék alakja nem jól kontrollálható, ugyanis előfordulnak nagyon elnyújtott részecskék is.

A DLA és az előző fejezetben említett Laplace-i (diffúzió-dominált) növekedés, például viszkózus ujjasodás közötti kapcsolatot sokan vizsgálták (például [42, 43]). Köztük két alapvető különbség van. Egyrészt míg a Laplace-i növekedés determinisztikus, a DLA sztochasztikus, amit az egyenként érkező részecskék sörétzaja jellemez. Ezt a különbséget

¹ A hierarchikus térkép struktúra rácsmentes változatára későbbi példa a 30. ábrán.

kontrollálni lehet az ún. zajcsökkentés módszerével, amit az 5. fejezetben fogunk bemutatni. A másik különbség a mikroszkopikus méretskálájú regularizációban van. A Laplace-i növekedésnél tipikusan (például a viszkózus ujjasodás esetén) a felületi feszültség az, ami korlátozza a túl kicsi görbületi sugarú helyek kialakulását: különböző sebességgel növekedő csúcsok esetén különböző limitáló görbületi sugarat eredményez. A DLA esetén viszont az azonos méretű részecskék miatt a görbületi sugar mindenhol egyenlő.

Ez utóbbi különbség jelentőségét egy érdekes eredményünk [E2, E3] emeli ki igazán, amit, mivel elméleti jellegénél fogva nem illik bele ezen doktori mű dominánsan numerikus fő sodrásába, csak röviden ismertetek. A diffúzió-dominált növekedés kiterjeszthető egy kétparaméteres rendszerré: egyrészt a határfelület lokális növekedési sebessége lehet hatványfüggvénye a Laplace-i mező gradiensének: $v \propto |\nabla\phi|^\eta$, ami $\eta = 1$ esetben visszaadja a szokásos diffúzió-dominált növekedést, általános η esetén a DLA-hoz hasonló részecske-modell pedig dielektromos letörési modell (dielectric breakdown model, DBM) néven lett ismert [44]. Másrészt pedig a mikroszkopikus regularizációt úgy értelmezzük, hogy az a hosszúságskála (görbületi sugar) a , aminél kisebb méretskálákön a regularizációs mechanizmus sima növekedést okoz, szintén hatványfüggvény szerint függ a Laplace-i mező gradiensétől: $a \propto |\nabla\phi|^{-m}$. Itt $m = 0$ jelenti a konstans görbületet (mint például a DLA modellben), a viszkózus ujjasodás növekedő ujjaira a felületi feszültség hatásának pedig $m = 1/2$ felel meg [7, 45]. A már említett harmonikus mérték szinguláris, multifraktál tulajdonsággal bír, aminek az a következménye, hogy minden pontra a körülötte vett r sugarú tartományon belül (ahol $r \gtrsim a$) a mérték integrálja (vagyis annak valószínűsége, hogy a következő lépésben a növekedés a tartományon belül következik be) hatványfüggvénye a sugárnak: $\mu(r) \sim r^\alpha$ [46, 47]. Megmutattuk, hogy az (η, m) és az (η', m') modell akkor ekvivalens (bennük a különböző csúcsok növekedési rátájának aránya akkor azonos), ha

$$\frac{1 + m(1 + \alpha - d)}{\eta} = \frac{1 + m'(1 + \alpha - d)}{\eta'}, \quad (13)$$

ahol d a befoglaló tér dimenziója, α pedig a vezető csúcsok szingularitási expenense, mivel ezek a csúcsok dominálják a keletkező fűrt alakját. Így például az $(\eta = 1, m = 1/2)$ viszkózus ujjasodásnak az $(\eta' = 2/[3 + \alpha - d], m' = 0)$ DBM modell felel meg. A vezető csúcsok szingularitása $\alpha = D - 1$, ahol D a fűrt fraktáldimenziója, ha feltételezzük, hogy a növekedést a vezető csúcsok környezete dominálja [48]. Így a viszkózus ujjasodással ekvivalens DBM modell nemlinearitási expenense két dimenzióban $\eta \approx 1.2$ lesz.

5. DIFFÚZIÓ-LIMITÁLT AGGREGÁCIÓ SKÁLÁZÁSA

Ebben a fejezetben megvizsgáljuk azokat az állításoknak, melyek szerint a DLA modellben definiálható hosszúságskála között találhatók olyanok, amelyek skálázási expenense különbözik egymástól, illetve hogy a fraktáldimenzió függene a fűrt középpontjától mért távolságtól. Ezek az eredmények adják a T2 tézispontot, amely az [S5] és [S6] publikációimban található numerikus eredményeimen alapul.

A DLA-ban egy olyan modell került megalkotásra, amely váratlanul összetett struktúrákat eredményez. Az intenzív elméleti erőfeszítés ellenére (csak néhány példa: [48, 49,

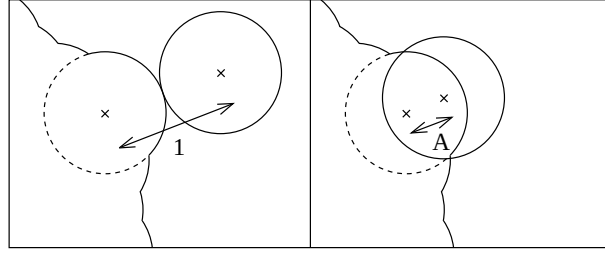
50, E2]), melyek kétséget kizáróan adtak hasznos hozzájárulást, a mai napig nincs olyan analitikus elmélet, amely kielégítő módon (például kontrollálatlan feltételezések felhasználása nélkül) adná a DLA leírását. Ennek következtében hangsúlyos szerepet kapnak a numerikus eredmények, amelyek értelmezése viszont problémákat rejthet magában. Az egyik ilyen probléma az, hogy az aszimptotikus viselkedés megértése érdekében végzett szimuláció „elég nagy”-e, vagyis például egy skálázási törvény empirikusan meghatározott exponense nem változik-e jelentősen, ha jóval nagyobb mértetű fürtöket vizsgálunk. Ennek kiküszöbölésére tett lépés a végesméret-skálázás, amelyet ebben a fejezetben (is) alkalmazni fogunk.

A DLA irodalmában, különösen a korai szakaszban, amikor még csak viszonylag kis skálájú numerikus szimulációk voltak elérhetőek, megjelentek olyan állítások, amelyek kétségbe vonták a DLA skálainvariáns voltát. A skálainvariancia jelen esetben azt jelenti, hogy aszimptotikusan (a részecskeszám $N \rightarrow \infty$ limeszében) minden távolság dimenziójú mennyiség vagy a mikroszkopikus (részecskeátmérő) vagy a makroszkopikus (a fürt átmérője) távolságskála szerint skálázódik; e kettőtől eltérő skálázás nincs.

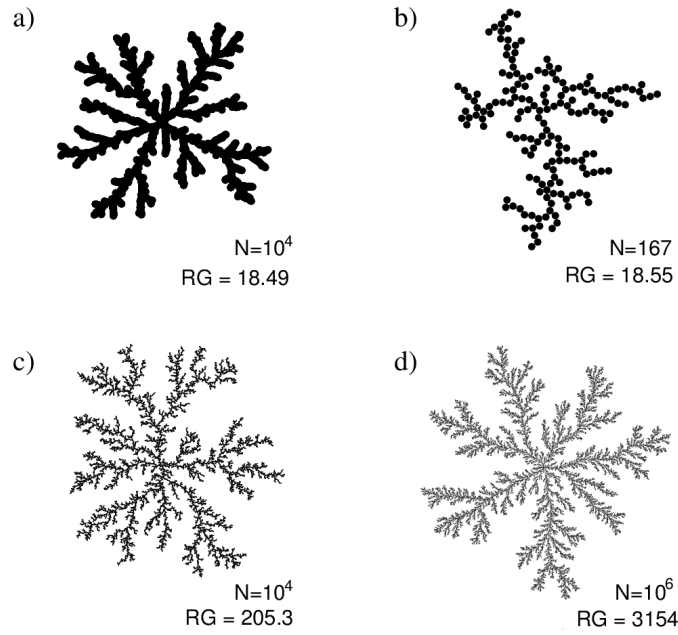
Jelöljük r -rel az N -edik részecske távolságát a magtól (az elsőként elhelyezett részecskétől), amely fluktuáló mennyiség, hiszen mindegyik fürt realizációra más és más. Az N -edik részecske átlagos távolságát a magtól természetesen ennek sokaságátlagával definiáljuk ($R_{\text{dep}} := \langle r \rangle$, „depozíciós sugár”). Abban mindenki egyetért, hogy a depozíciós sugár (aszimptotikusan) egyszerűen skálázódik: $R_{\text{dep}} \sim N^{1/D}$, ahol $D \approx 1.71$ a fraktáldimenzió. Az r szórása viszont, amely azt jelzi, hogy milyen széles az a zóna, ahol a részecskék becsapódnak (ξ , „behatolási mélység”), már nem ennyire egyértelmű, ugyanis állították róla azt, hogy különbözően skálázik R_{dep} -től [37]. További hosszúság dimenziójú mennyiség az effektív vagy Laplace-i sugár (R_{eff}), amely (2D-ban) egy olyan egyenletesen töltött kör sugara, melynek elektrosztatikus potenciálja távol (a multipólus sorfejtés legalacsonyabb rendjében) megegyezik a fürtével, ha azt a növekedési valószínűség-eloszlással, vagyis a harmonikus mértékkel megegyező töltéseloszlással ruházzuk fel. Az effektív sugár δR_{eff} sokaságon belüli szórásáról korábban azt állítottuk egy korábbi publikációnkban [41], hogy aszimptotikusan elhanyagolható az átlagértékhez képest. További egzotikus állítás, hogy a DLA multiskálázódik, vagyis a fraktáldimenzió függ a fürt közepétől mért relatív (a fürt sugarával normált) távolságtól [51, 52].

Az alábbiakban megmutatjuk, hogy ezek az állítások tévesek, vagyis a DLA skálázása konzisztens az egyszerű skálainvarianciával. A fent említett látszólagos anomális skálázási tulajdonságok azért merülhettek fel, mert egy lassan lecsengő szubdomináns skálázási korrekció megtévesztheti a viszonylag kis méretű numerikus méréseket. Numerikus vizsgálatunkat két lényeges eszköz segítette, amit az alábbiakban ismertetek: rácsmentes zajcsökkentés, valamint véges méret skálázás.

A *zajcsökkentést* rács-alapú DLA-ra azért vezették be [53, 54], hogy enyhítsék a részecskék egyenkénti érkezéséből származó sörétzajt. Ennek implementációja úgy történt, hogy minden egyes potenciális növekedési helyet jelentő rácspontra elhelyeztek egy számlálót, amely értéke eggyel növekedett. Amikor az adott helyre érkezett egy új részecske, a részecskét eldobták. Amikor egy számláló elért egy előre meghatározott (minden helyen azonos) értéket, akkor helyeztek csak el ott egy új részecskét.



12. ábra: Rácsmentes zajcsökkentés. Az új részecske diffundál addig, amíg nem érintkezik a fürttel. Ezután rátöljük arra a részecskére, amelyikkel érintkezett úgy, hogy a középpontjaik távolsága A -szorosára csökkenjen, majd ezen a helyen rögzítjük. [S5]



13. ábra: Az (a) fürt $A = 0.03$ rácsmentes zajcsökkentéssel készült. Ezt összehasonlítjuk zajcsökkentés nélküli fürtökkel: a (b) fürtnek ugyanakkora a sugara, a (c) fürt ugyanannyi részecskéből áll, a (d) fürtnek pedig azonosak a skálázási korrekciói (például ugyanakkora a $\Xi = \xi / R_{\text{dep}}$ relatív behatolási mélység). A feltüntetett értékek a részecskeszám és a tehetetlenségi sugár (radius of gyration; azon kör sugara, melynek egyenlő a tömege és a tehetetlenségi nyomatéka a fürtével). [S5]

Ezt a zajcsökkentési módszert úgy adaptáltuk a rácsmentes DLA modellre, hogy az újonnan érkezett részecskéket rácúsztattuk arra a részecskére, amelyikkel érintkezett, úgy, hogy a két részecske középpontjának távolsága az átmérőjük helyett annak A -szorosa legyen (12. ábra), ahol A a zajcsökkentési paraméterünk. Ez azt jelenti, hogy a fürt-höz egy részecskével egy lapos kiemelkedés kerül hozzáadásra, valamint hogy $1/A$ számú részecskének kell érkeznie közel ugyanott ahhoz, hogy valahol egy részecskeátmérőnyi növekedés következzen be. Egy ilyen zajcsökkentéssel készült DLA fürtöt mutatunk a 13(a) ábrán. (Egy másik módszer a rácsmentes DLA zajcsökkentésére a már említett HL iterált konform leképezés

módszerével történik, ahol a generátor függvény alakjának változtatásával lehet hangolni a kiemelkedés vastagságát [40, 41].)

Most áttérünk a *végisméret skálázásra*, amely segít kiküszöbölni az empirikusan mért skálázási exponensek értékében a szubdomináns tagok zavaró hatását. Tegyük fel, hogy van egy részecskeszámtól függő $Q(N)$ mennyiségünk, amely az $N \rightarrow \infty$ határesetben egy véges Q_∞ értékhez konvergál. Nagy N -re feltehetjük, hogy

$$Q(N) = Q_\infty(1 + CN^{-\nu} + \text{alacsonyabb rendű tagok}) . \quad (14)$$

Ha most ábrázoljuk a $dQ(N)/d(\ln N)$ mennyiséget a $Q(N)$ függvényében, akkor nagy N -re aszimptotikusan egy egyenest kapunk, melynek meredeksége $-\nu$, az x tengelyt pedig a Q_∞ helyen metszi, mindkettő függetlenül a C értékétől. A 14. ábra felső panelén ezt az analízist mutatjuk a $\Xi = \xi/R_{\text{dep}}$ relatív behatolási hosszra. Az illesztésből a Ξ_∞ aszimptotikus relatív behatolási hosszra és a ν skálázási korrekció exponensre a következő értékeket kapjuk:

$$\Xi_\infty = 0.121 \pm 0.003 , \quad \nu = 0.33 \pm 0.06 . \quad (15)$$

További mennyiségeket is vizsgáltunk, például növekedési valószínűség-eloszlás normalizált multipólus amplitúdóit. Jelöljük q -val a növekedési valószínűség-eloszlást (amely megegyezik azzal az elektrosztatikus töltéseloszlással, amely a fűrt peremén keletkezik, ha a fűrt elektromosa vezetővé tesszük és egységnyi töltést adunk neki). 2D-ban az n -edik multipólus momentumot a fűrt peremén vett (azt topologikusan végigkövetve) integrállal definiáljuk:

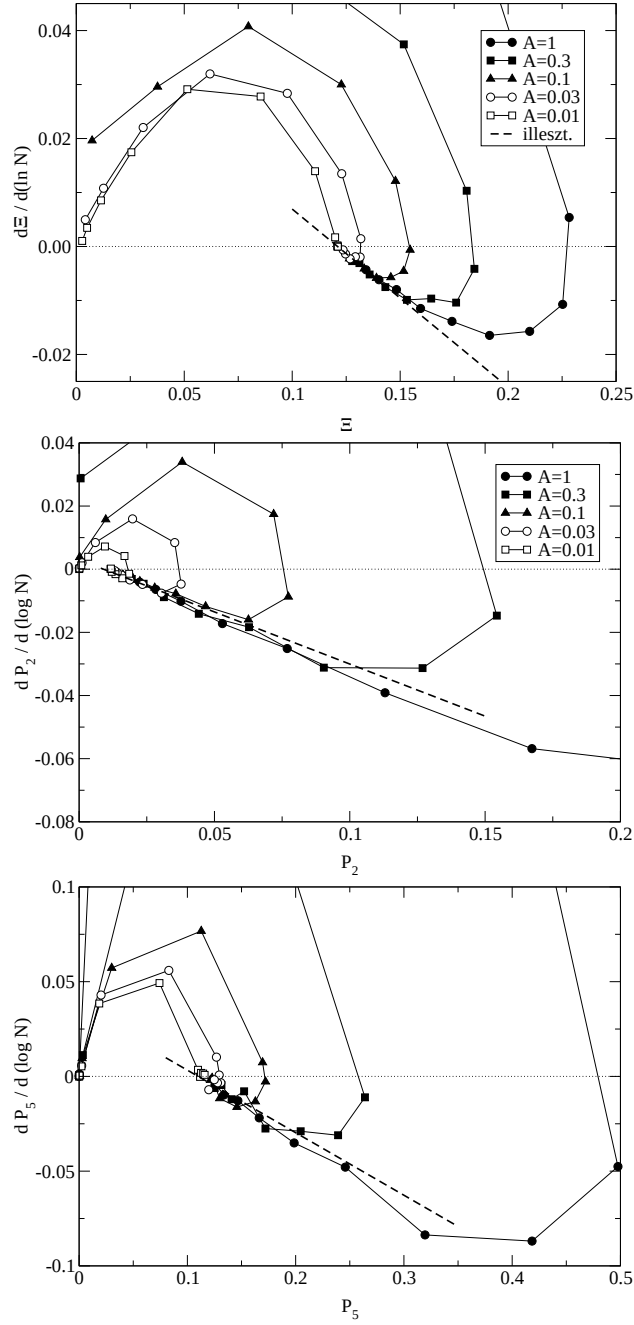
$$M_n = \int dq (x + iy)^n , \quad (16)$$

ahol (x, y) az adott pont koordinátája, i pedig az imaginárius egység (M_n komplex mennyiség). Az M_n értékek összessége pozitív n -ekre meghatározza (invertálhatóan) a komplex egységkörről a fűrt peremére képező konform leképezés Laurent-együtthatóit [41], vagyis a fűrt teljes leírását adják. A q növekedési valószínűség-eloszlást és a komplex integrálást részecske-alapú (tehát nem iterált konform leképezéssel kapott) DLA fűrtökre végeztem el nagy számú (a fűrtöt nem növesztő) teszt részecske felhasználásával. Ezt a módszert részletesebben a 40. oldalon fogom ismertetni. A

$$P_n = \frac{|M_n|^2}{R_{\text{eff}}^{2n}} \quad (17)$$

normalizált multipólus amplitúdók az $N \rightarrow \infty$ limeszben konstans határértékhez tartanak. A P_2 és P_5 végisméret-skálázását a 14. ábra középső és alsó panelén mutatjuk, a skálázási korrekció exponenseit pedig az 1. táblázat tartalmazza. A Ξ és P_n mennyiségek végisméret-skálázása hibahatáron belül mind kompatibilis egy közös, $\nu = 0.33$ skálázási korrekció exponenssel. Ez egy erős indikáció arra, hogy a DLA fűrtöknek van egy aszimptotikus geometriája, amelyhez tartó konvergenciát az univerzális $\nu = 0.33$ skálázási korrekció exponens határozza meg.

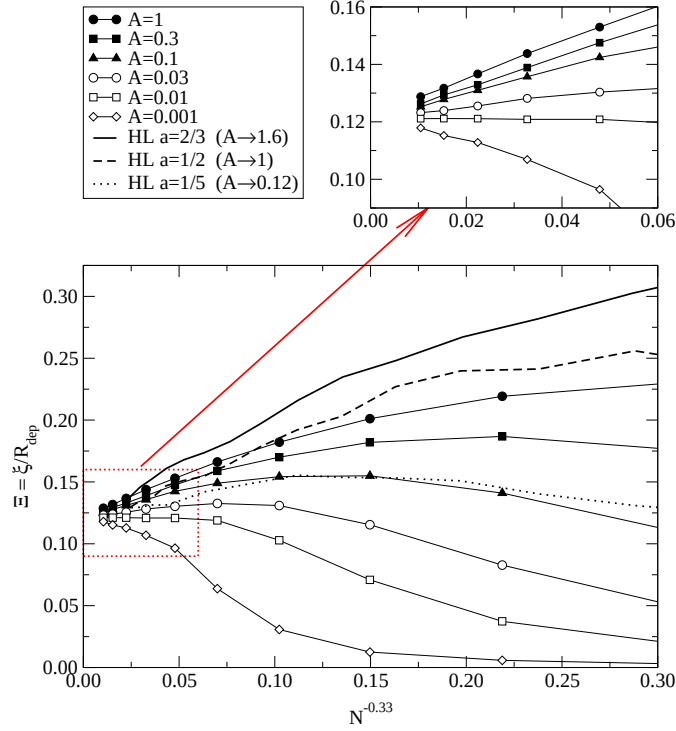
Ezt a ν értéket felhasználva bemutatjuk a 15. ábrán a Ξ relatív behatolási mélység végisméret-skálázását különböző A zajcsökkentési paraméter értékek mellett. Jól látható, hogy a



14. ábra: A végesméret-skálázás exponensének közvetlen meghatározása a Ξ relatív behatolási mélységre (felső panel), valamint a P_2 és P_5 normalizált multipólus együtthatókra (középső és alsó panel). A Q mennyiségre (ahol $Q = \Xi, P_2$, vagy P_5) a (14) kifejezés szerint $dQ/d(\ln N)$ lineárisan függ Q -tól (aszimptotikusan), ahol a meredekség a $-v$ végesméret-skálázási exponens, a tengelymetszet pedig a Q_∞ aszimptotikus érték. A mért értékeket a (15). képletek és az 1. táblázat mutatja. [S5]

	P_2	P_3	P_4	P_5
ν :	0.41 ± 0.08	0.27 ± 0.06	0.41 ± 0.12	0.40 ± 0.12

1. táblázat: A $P_2 \dots P_5$ normalizált multipólus amplitúdók skálázási korrekció exponensei. Mértük a $P_6 \dots P_{10}$ -hez tartozó exponenseket is, ezek valamivel nagyobb látszólagos értéket adtak nagyobb hibahatárral.

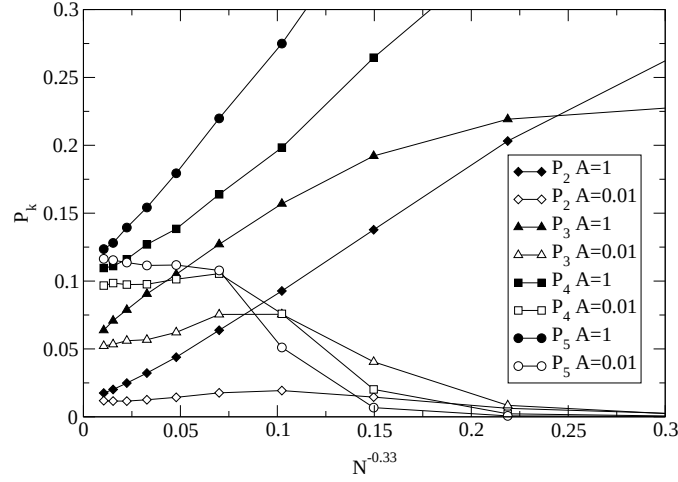


15. ábra: Végesméret-skálázás a $\Xi = \xi/R_{\text{dep}}$ relatív behatolási mélységre különböző zajszinteken. Minden adatsor a közös $\Xi_{\infty} = 0.121 \pm 0.003$ aszimptotikus értékhez konvergál. Megjegyzésként megadom a társszerzőim által számolt Hastings-Levitov (HL) iterált konform leképezéssel készült adatsorokat is, amelyben a generátor függvény paraméterét változtatva szintén változtatható a zajszint; feltüntettük az összehasonlító A értékeket. [S5]

különböző A értékekhez tartozó adatsorok egy közös Ξ_{∞} értékhez tartanak. Ugyanezt ábrázoljuk a $P_2 \dots P_5$ normalizált multipólus amplitúdókra a 16. ábrán, mindenhol a közös $\nu = 0.33$ exponens értéket használva.

A fentiekben a fűrtök középpontját a q növekedési valószínűség-eloszlás súlypontjának tekintettük, ami természetes választás, ha egy rögzített méretű fűrt vizsgálunk. Az alábbiakban közvetlenül hasonlítjuk össze egy fűrt különböző növekedési stádiumait, amihez a kézenfekvő választás a mag részecskét tekinteni középpontnak.

Ennek megfelelően vizsgáltam jónéhány hosszúság dimenziójú mennyiség sokaságátlagának végesméret-skálázását. Például a mag részecskét középpontnak tekintve másképpen is definiálhatjuk a behatolási mélységet, amit ξ_0 „sokaság behatolási mélységnek” fogunk



16. ábra: A $P_2 \dots P_5$ normalizált multipólus amplitúdók végesméret-skálázása. Ezúttal a jobb átláthatóság kedvéért csak az $A = 1$ és $A = 0.01$ zajszinteket mutatjuk. [S5]

hívni:

$$\xi_0 = \sqrt{\langle r^2 \rangle - \langle r \rangle^2} \quad (18)$$

Az eredeti definíció szerint fűrtönként számoljuk a szórásnégyzetet, majd vesszük ennek sokaságátlagát:

$$\xi = \sqrt{\left\langle \int dq r^2 - \left(\int dq r \right)^2 \right\rangle} \quad (19)$$

Amennyiben egy R hosszúság dimenziójú mennyiség a fraktáldimenzióval skálázódik, akkor a (14) kifejezés analógiájára a végesméret korrekciót a legmagasabb rendben így írhatjuk fel:

$$R(N) \approx \hat{R} N^{1/D} (1 + \tilde{R} N^{-\nu}) . \quad (20)$$

Jónéhány hosszúság dimenziójú mennyiség végesméret-skálázását mutatja a 17. ábra, ezen mennyiségek definícióját és az illesztett $\hat{R}$ és $\tilde{R}$ értékeket pedig a 2. táblázatban gyűjtöttem össze. A vizsgált mennyiségek mindegyike kivétel nélkül aszimptotikusan $N^{1/D}$ -vel skálázódik, kisebb-nagyobb skálázási korrekcióval. Bizonyos mennyiségek, például δR_{eff} és ξ_0 korrekciójának $\tilde{R}$ amplitúdója elég nagy; ez okozhatta azt, hogy kis skálájú numerikus szimulációkban $1/D$ -től eltérő látszólagos exponenst lehetett kapni.

A skálázási korrekció exponensek nem függetlenek, könnyen levezethető például a sugár négyzetes középértékére

$$\hat{R}_2 = \sqrt{\hat{R}_{\text{dep}}^2 + \hat{\xi}_0^2} \quad \text{és} \quad \tilde{R}_2 = \frac{\tilde{R}_{\text{dep}} \hat{R}_{\text{dep}}^2 + \tilde{\xi}_0 \hat{\xi}_0^2}{\hat{R}_{\text{dep}}^2 + \hat{\xi}_0^2} , \quad (21)$$

valamint a tehetelenségi sugárra

$$\hat{R}_{\text{gyr}} = \frac{\hat{R}_2}{\sqrt{1 + 2/D}} \quad \text{és} \quad \tilde{R}_{\text{gyr}} = \frac{1 + 2/D}{1 - \nu + 2/D} \tilde{R}_2 . \quad (22)$$

A mért együtthatók hibahatáron belül kielégítik ezeket az összefüggéseket.

A következőkben a *multiskálázás* kérdését fogjuk vizsgálni, amely szerint a fraktáldimenzió függene a magtól mért (a fűrt sugarával normált) távolságtól. Az [51] referenciában feltették, hogy egy N részecskéből álló fűrt $g_N(r)$ részecske-sűrűsége r távolságra a magtól a következő alakban írható fel:

$$g_N(xR_{\text{gyr}}) = A(x) R_{\text{gyr}}^{-d+D(x)}, \quad (23)$$

ahol a $D(x)$ fraktáldimenzió függ a magtól mért $x = r/R_{\text{gyr}}$ relatív távolságtól. A fenti kifejezésből megkaphatjuk $D(x)$ -et rögzített x -re:

$$-d + D(x) = \left. \frac{\partial \ln g_{N(R_{\text{gyr}})}(xR_{\text{gyr}})}{\partial \ln R_{\text{gyr}}} \right|_x. \quad (24)$$

Egyszerű skálainvariancia x -től független dimenziót adna, tehát $D(x) = D$; viszont közepes méretű ($N = 10^4 \dots 10^5$) fűrtök vizsgálatával nem konstans $D(x)$ -et kaptak [52], amit a 19. ábrán is mutatunk; később ezt cáfolták [55] majd megerősítették [56].

E kérdés eldöntése érdekében mi is meghatároztuk a $D(x)$ mennyiséget, de közvetlen numerikus mérések helyett felhasználtuk a fenti skálázási korrekció eredményeket, amiket utána könnyen extrapolálhatunk az $N \rightarrow \infty$ határértékre.

Tekintsük az r mennyiséget, amely az újonnan érkező részecske távolságát méri a magtól; ennek átlaga R_{dep} , szórása pedig ξ_0 . Az r valószínűsége-sűrűség-eloszlását felírhatjuk

$$\frac{1}{\xi_0(N)} h\left(\frac{r - R_{\text{dep}}(N)}{\xi_0(N)}\right) \quad (25)$$

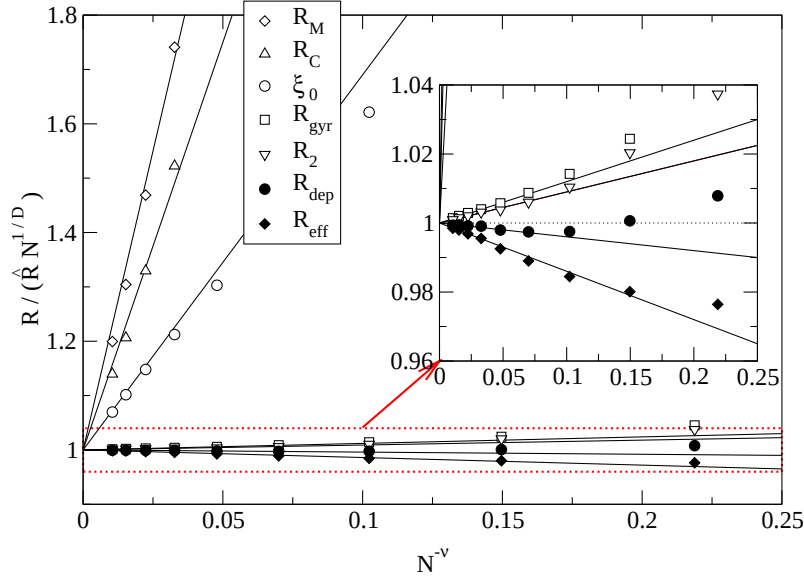
alakban, ha feltételezzük, hogy az eloszlás h függvényalakja nem függ N -től. A részecskék járulékanak összegét integrálra cserélve azt kapjuk, hogy

$$2\pi r g_N(r) = \int_0^N dN' \frac{1}{\xi_0(N')} h\left(\frac{r - R_{\text{dep}}(N')}{\xi_0(N')}\right), \quad (26)$$

melyhez hasonló összefüggést korábban is javasoltak [57]. Mivel ismerjük az $R_{\text{gyr}}(N)$, $R_{\text{dep}}(N)$ és $\xi_0(N)$ mennyiségek skálázását az első korrekcióval együtt (20), a (24). és a (26). képletek segítségével ki tudjuk számolni $D(x)$ -et. Egyetlen mennyiség hiányzik, a h függvény alakja, ami közvetlen numerikus méréseim alapján jó közelítéssel standard normális eloszlásúnak adódott (18. ábra), így a továbbiakban h -t a standard normális eloszlással helyettesítjük.

A 19. ábrán összehasonlítjuk a végesméret-analízisünk alapján kiszámolt $D(x)$ függvényeket az [52] referencia értékeivel. Jól látható, hogy a végesméret-analízisünk alapján kiszámolt $D(x)$ visszaadja a közepes méretű DLA fűrtökből közvetlenül kapott értékeket, az $N \rightarrow \infty$ limeszben viszont konstanshoz tart. Így megállapíthatjuk, hogy a korábban, közepes méretű DLA fűrtökből számolt látszólagos nem-konstans $D(x)$ csak a skálázási korrekcióból adódó végesméret-effektus, ami aszimptotikusan eltűnik.

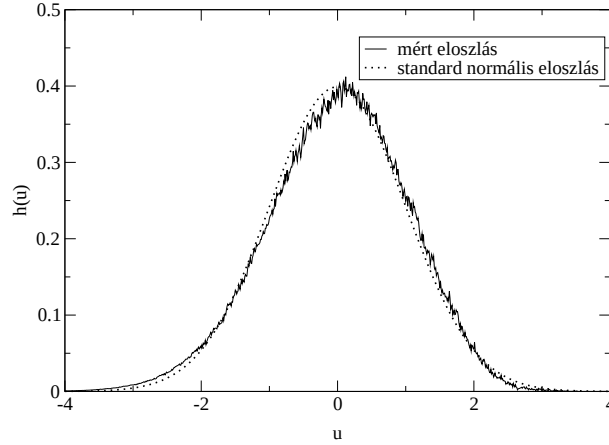
Konklúzióként megállapíthatjuk, hogy az itt bemutatott eredmények alapján a DLA konzisztens az egyszerű aszimptotikus skálázással. Jelen vannak viszont jelentős szubdomináns



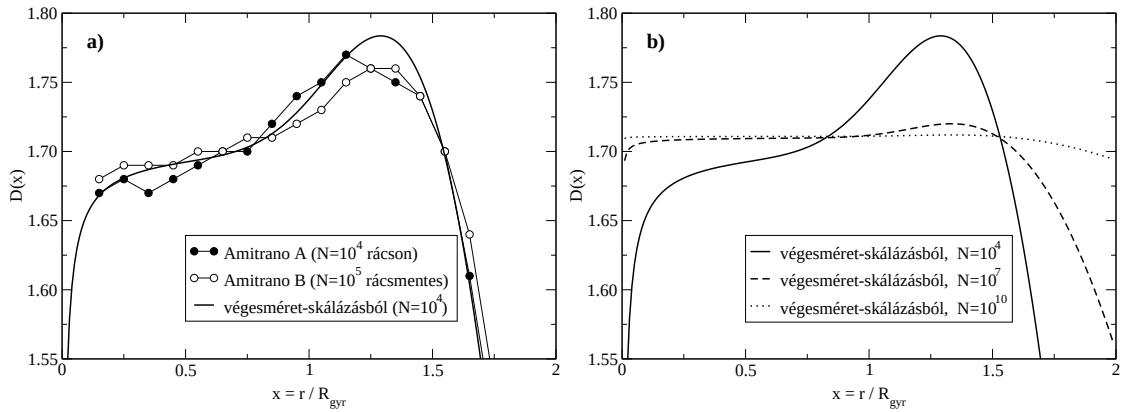
17. ábra: Néhány hosszúság dimenziójú mennyiség végesméret-skálázása zajcsökkentés nélkül ($A = 1$), $D = 1.711$ és $\nu = 0.33$ mellett. A mennyiségek definícióját és az illetett $\hat{R}$ és $\tilde{R}$ értékeket (néhány további mennyiségre is) a 2. táblázat tartalmazza. [S6]

	definíció	$\hat{R}$	$\tilde{R}$
depozíciós sugár	$R_{\text{dep}} = \langle r \rangle$	0.733(1)	-0.04(2)
sugár négyzetes középértéke	$R_2 = \sqrt{\langle r^2 \rangle}$	0.738(1)	0.09(2)
tehetetlenségi sugár	$R_{\text{gyr}} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{N'=1}^N \langle r^2 \rangle_{N'}}$	0.501(1)	0.12(2)
effektív (Laplace-i) sugár	$R_{\text{eff}} = \langle \exp(\int dq \ln r) \rangle$	0.726(1)	-0.14(3)
effektív sugár szórása	$\delta R_{\text{eff}} = \sqrt{\text{var}[\exp(\int dq \ln r)]}$	0.0086(10)	15
maximális sugár	$R_{\text{max}} = \langle \max_q r \rangle$	0.892(3)	1.0
maximális sugár szórása	$\delta R_{\text{max}} = \sqrt{\text{var}[\max_q r]}$	0.034(2)	13.
mag és q súlypontjának távolsága	$R_C = \sqrt{\langle \int dq \mathbf{r} ^2 \rangle}$	0.027(3)	15.(10)
mag és tömegközéppont távolsága	$R_M = \sqrt{\langle \frac{1}{N} \sum_{N'=1}^N \mathbf{r}_{N'} ^2 \rangle}$	0.016(1)	22.(6)
sokaság behatolási mélység	$\xi_0 = \sqrt{\langle r^2 \rangle - \langle r \rangle^2}$	0.091(1)	6.9(8)

2. táblázat: A skálázási korrekció együtthatói jónéhány hosszúság dimenziójú mennyiségre a (20). egyenlet szerint, $D = 1.711$ és $\nu = 0.33$ felhasználásával. r az N -edik részecske távolságát jelöli a magtól, $\langle \cdot \rangle$ a sokaságátlag, és $\int dq$ a növekedési valószínűség-eloszlás mértéke szerinti integrál egy rögzített fűrtre. Zárójelben az utolsó számjegy hibája van feltüntetve (amennyiben ezt meg lehetett határozni). [S6]



18. ábra: Az r normalizált eloszlásfüggvénye, h , melyet részecske-alapú DLA fürtök analizálásával kaptam, a hisztogram osztályok szélessége $\Delta u = 0.01$ volt. A pontozott vonallal jelölt standard normális eloszlás jól közelíti a mért eloszlást. [S5]



19. ábra: A multiskálázás $D(x)$ függvényének összehasonlítása közvetlen mérésekből (Amitrano és munkatársai [52]) és a végesméret-skálázásból. (a) A végesméret-analízisből számolt $D(x)$ jól visszaadja a közvetlen mérésekből kapott értékeket, ez utóbbiak fürt-mérete esetén. (b) N növelésével a végesméret-analízisből számolt $D(x)$ konstanshoz tart, de a konvergencia lassú. [S5, S6]

skálázási korrekció tagok, amelyek vezethettek a korábbi egzotikus skálázási tulajdonságok feltételezésére, mint például különböző exponenssel skálázó hosszúság dimenziójú mennyiségek jelenléte, vagy a multiskálázás. A végesméret-analízis, amely egy domináns korrekció hatásait vizsgálja, magyarázatot ad ezekre a korábbi megfigyelésekre, még olyan összetett mennyiség esetén is mint a $D(x)$.

Megjegyzés: Az ebben a fejezetben bemutatott eredményeket egyenként 10^6 részecskéből álló DLA fürtökből számoltam, ahol a sokaságok az $A = 0.3, 0.1, 0.03, 0.01$ zajcsökkenés paraméter értékekre egyenként 1000 fürtből álltak, az $A = 1$ sokaság 4000 fürtöt és az $A = 0.001$ sokaság pedig 25 fürtöt tartalmazott. A fürtök növekedésének bizonyos pontjain egyenként 10^5 tesztrészecskével határoztam meg a növekedési valószínűség-eloszlást.

6. NEMLINEÁRIS NÖVEKEDÉSI MODELL MINTAVÉTELEZÉSEL

Ebben a fejezetben bemutatunk egy olyan numerikus algorimust, amellyel a dielektromos letörési modell (dielectric breakdown model, DBM) rácsmentes változatát lehet nagyon jó hatékonysággal generálni. A kapott nagyméretű fűrtökön végzett mérések pontosítják néhány skálázási exponens korábban meghatározott értékét. Ez a fejezet adja a T3 tézispontot, amely a [S7] publikációmban található numerikus eredményeimen alapul.

Fizikai analógiák, valamint elméleti eredmények (például [E2, E3]) is felvetették, hogy érdemes legyen vizsgálni a DLA modell olyan kiterjesztését, amelyben a növekedés nemlineárisan függ a Laplace-i mező gradiensétől. A DBM modellt Niemeyer, Pietronero és Wiesmann vezette be 1984-ben [44], melyben (amint azt röviden a 19. oldalon már említettük) a növekedési valószínűség alakját hatványfüggvény írja le: $v_n \propto |\nabla\phi|^\eta$, ahol $\eta > 0$ a nemlinearitási paraméter. Először tekintsük a szélsőséges eseteket: az $\eta \rightarrow 0$ limeszben a növekedési valószínűség függetlenné válik a Laplace-i mezőtől; ez az Eden modell [58], amely sűrű fűrtöket eredményez, és csak a határvonal (felület) durva. Az $\eta \rightarrow \infty$ határesetben pedig a növekedés egyetlen helyre koncentrálódik, amely stabilizálja ennek a növekedési csúcshoz a kitüntetett szerepét, ami egydimenziós, nem elágazó struktúrákhoz vezet. Ez a viselkedés feltételezések szerint nemcsak az $\eta \rightarrow \infty$ határesetben, hanem egy felső kritikus érték felett is ($\eta > \eta_c$) bekövetkezik, ahol $\eta_c = 4$ [50, 59, 60, 61]. Az $\eta = 1$ pedig természetesen a DLA modellt adja vissza.

Mivel egy bolyongó részecske ϕ megtalálási valószínűsége kielégíti a Laplace egyenletet, fluxusa pedig arányos $\nabla\phi$ -vel, a DLA bolyongó részecske alapú generálása egyedül az $\eta = 1$ esetben működik. Ettől különböző η -ra az egyik lehetőség, hogy minden egyes részecske hozzáadása előtt numerikusan megoldjuk a Laplace egyenletet (például rácson, iteratív módszerekkel [44]), ami egy rendkívül időigényes művelet, majd minden potenciális növekedési helyen kiértékeljük $|\nabla\phi|^\eta$ -t, amelyek felhasználásával kiválasztjuk a sztochasztikus növekedés következő lépését. Másik lehetőség a Hastings-Levitov iteratív konform leképezés megfelelő adaptációja [59], amely minden előnye mellett hátrányokkal is rendelkezik, például szintén nem túl hatékony (ahogy korábban említettük, számításigénye N^2 -es), és csak két dimenzióban működik. Az alábbiakban bemutatunk egy harmadik módszert, amelynek előnyei közé tartozik, hogy hatékony, valamint tetszőleges dimenzióban alkalmazható (a bemutatott eredmények két dimenzióra vonatkoznak). Hátránya, hogy tartalmaz közelítést; ennek következményeit a modell paramétereinek megfelelő választásával tudjuk korlátozni.

Tekintsük először azt a kérdést, hogy a véletlen bolyongást végző részecskék mintavételezésével hogyan mérhető a növekedési valószínűség-eloszlás. Egy befagyasztott fűrt esetén megfelelően nagy számú teszt részecskét felhasználva jól mérhetőek a határ viszonylag nagyobb növekedési valószínűségű szakaszai ([62], részletesebb leírás a 40. oldalon), viszont most azt a kérdést tesszük fel, hogy milyen információt nyerhetünk egyetlen részecske felhasználásával. Először felosztjuk a fűrt peremét kis tartományokra, a részecskékből álló fűrt esetén kézenfekvően ezek egy-egy részecske felületei. Jelöljük μ -vel az egy ilyen tartományon bekövetkező növekedés valószínűségét. Most indítsunk el egymás után sok függet-

len véletlen bolyongást végző tesztrészecskét, amelyeknek megjegyezzük a fűrrel való első érintkezésének helyét, de utána eldobjuk őket. Tegyük fel, hogy egy tesztrészecske érkezik egy adott helyre, ahova már korábban is érkezett tesztrészecske. Jelöljük a -val azon tesztrészecskék számát, amelyek a két tesztrészecske között indultak (beleszámolva az újonnan érkezett részecskét is). Ebből egyszerű becslést kaphatunk μ -re: $\mu_1 = 1/a$ (vagyis korrelálatlan események gyakoriságát becsljük standard módon a visszatérési időből). A μ_1 becslés valószínűség-eloszlása Poisson statisztikát követ:

$$p_1(a|\mu) = \mu e^{-\mu a},$$

ha a μ valódi valószínűség kicsi ($\mu \ll 1$), és így a folytonos változónak tekinthető. Megbízhatóbb becslést is tudunk adni, ha az előző k -adik ide beérkező tesztrészecskétől kezdjük számolni az indított tesztrészecskék a_k számát: ennek eloszlása

$$p_k(a_k|\mu) = \mu e^{-\mu a_k} \frac{(\mu a_k)^{k-1}}{(k-1)!}, \quad (27)$$

ami alapján a becslés $\mu_k = k/a_k$.

Az alábbiakban ezen mennyiségek $M_q = \sum \mu^q$ momentumait fogjuk vizsgálni, ahol az összegzés a fűr peremének felosztott tartományaira történik. Ezt értelmezhetjük $M_q = \langle \mu^{q-1} \rangle$ szerint is, ahol az átlagolást a μ mérték szerint vesszük, amiről a beérkező tesztrészecskék adnak mintavételezést. Vagyis minden beérkező tesztrészecske a_k -ja segítségével becsljük a μ^{q-1} hozzájárulást, ami az

$$M_{q,k} = A(k,q) \left\langle \left(\frac{a_k}{k} \right)^{1-q} \right\rangle$$

becsléshez vezet, ahol az átlag az összes beérkező tesztrészecskére vonatkozik, $A(k,q)$ pedig egy egyszerű szorzófaktor, amelyet a következőkben határozzunk meg.

A célunk most a becslés konvergenciájának és torzítatlanságának biztosítása. A (27) eloszlás integrálásával azonnal látszik, hogy $M_{q,k}$ akkor konvergál M_q -hoz, ha $k > q-1$, valamint a szorzófaktor

$$A(k,q) = \frac{k^{1-q}(k-1)!}{(k-q)!}$$

kell hogy legyen. Ez azt jelenti, hogy megfelelően nagy k értéket használva ki tudjuk számolni a momentumokat. Később látni fogjuk, hogy a módszer tényleges limitációja nem a nagy q , hanem a nagy abszolút értékű negatív q értékeknél jelentkezik.

A növekedési valószínűség-eloszlás fenti módon vett mintavételezésének hasznos tesztje a multifraktál spektrum mérése a DLA esetére. Mivel a multifraktalitás nem központi témája ezen doktori műnek, itt csak a legalapvetőbb dolgokat vázoljuk fel, részletesebb taglalás a [47] klasszikus cikkben vagy a [2] könyvben található. Ahogy korábban már említettük, növekedési valószínűség-eloszlást mértékként tekintve ez szinguláris, azaz minden pontra a körülötte vett r sugarú tartományon belül (ha $r \gtrsim a$) a mérték integrálja (vagyis a tartományon belüli növekedés valószínűsége) hatványfüggvénye a sugárnak: $\mu(r) \sim r^\alpha$. Azok a

pontok, amelyek szingularitása egy adott α érték, fraktált alkotnak, melynek fraktáldimenziója $f(\alpha)$. Másik megközelítés a box-counting fraktáldimenzió általánosítása: egy ℓ rácscsillagú rácscsal való lefedéskor azt találjuk, hogy az $M_q(\ell) = \sum \mu^q$ összeg (ahol az összegzés a rács azon ℓ oldalú tartományaira történik, amelyekre az azokban található μ mérték pozitív) kis ℓ -re hatványfüggvény szerint függ attól: $M_q(\ell) \sim \ell^{(q-1)D_q}$. Itt D_q -t általánosított fraktáldimenzióknak hívják (például D_0 a box-counting dimenzió), valamint az $f(\alpha)$ és a $\tau(q) = (q-1)D_q$ függvények egymás Legendre transzformáltjai, vagyis a szinguláris mérték térbeli struktúráját ekvivalens módon írják le más-más formában.

A mi esetünkben ez azt jelenti, hogy egy N részecskéből álló fűrtre $M_q \sim N^{-\tau(q)/D}$, ahol a D fraktáldimenzió adja meg a fűrt R sugarának N -től való függését: $N \sim R^D$. Definiáljuk most a $Z(q, t, N)$ mennyiséget az M_q momentumok N -szerinti, N^{t-1} súlyfaktorról vett összegével, amely N -független prefaktorok elhagyásával így becsülhető:

$$Z(q, t, N) = \sum_{n=1}^N a^{1-q} n^{t-1},$$

ahol az összegzés most azok szerint a részecskék szerint történik, amelyek a fűrtöt felépítik, az a értékeket pedig szintén ezen részecskék érkezése alapján számoljuk. Az $N \rightarrow \infty$ limeszben t értékétől függően Z vagy gyorsan (hatványfüggvény szerint) divergál, vagy kicsi marad. A [47] referencia szellemében $\tau(q)/D = t$ definiálja $\tau(q)$ -t a két viselkedést elválasztó t segítségével. A várakozások szerint ekkor Z logaritmikusan divergál N -nel, vagyis

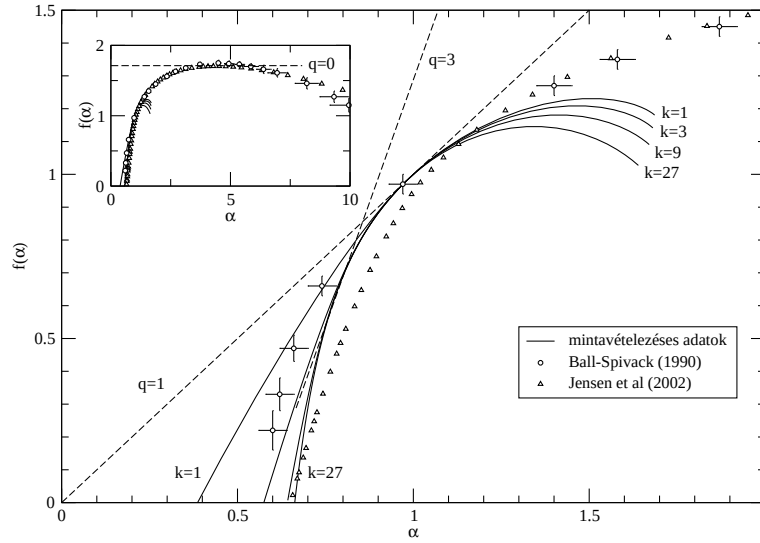
$$Z(q, t, N) - Z(q, t, \varepsilon N) = \sum_{n=\varepsilon N+1}^N a^{1-q} n^{t-1}$$

rögzített ε -ra és nagy N -re független lesz N -től. Ezt a $Z(q, t', N) - Z(q, t', \varepsilon N) \propto N^{t'-t(q)}$ skálázás segítségével használjuk fel konkrét méréseknél, ahol t' -t úgy választjuk meg, hogy az adatok viszonylag egyenletes súlyozással legyenek figyelembe véve, majd $\tau(q)$ -t a $\tau(q) = Dt(q)$ relációból nyerjük.

Ezen módszerrel kétdimenziós DLA-ra a standard $D = 1.71$ felhasználásával (amely értéktől a végeredmény nem függ érzékenyen) kiszámoltam az $f(\alpha)$ multifraktál spektrumot, ami a 20. ábrán látható. A $q \geq 1$ (vagyis $\alpha \leq 1$) tartományban ez a módszer nagyon sikeres: sokkal jobban kielégíti a Makarov tételt [63] ($q = 1$ tangens az ábrán), valamint Halsey elektrosztatikus skálázási törvényét [64] ($q = 3$ tangens az ábrán, a releváns nagyobb k értékekre), mint a korábbi számítások.

Nagyobb α értékekre viszont a módszerünk már nem ad jó eredményt. Ez a limitáció teljesen érthető, hiszen az $f(\alpha)$ spektrum ezen részei a fűrt nagyon lassan növekedő, leárnyékolt szakaszainak felel meg, amit a növekedési részecskéken alapuló mintavételezés nagyon rossz felbontással vizsgál. (Az ilyen, erősen leárnyékolt szakaszokat az ebben a doktori disszertációban nem taglalt [E10] publikációmban vizsgáljuk célzottan úgy, hogy ezen szakaszok mintavételezését jelentősen megnöveljük. Így extrém kicsi, akár 10^{-80} valószínűségeket is kontrolláltan tudunk meghatározni.)

Mivel a mintavételezéses módszer a leggyorsabban növekedő részekre, vagyis a csúcsok környékére adja a legpontosabb méréseket, érdemes utánajárni annak a kérdésnek, hogy a



20. ábra: A DLA növekedési valószínűség-eloszlásának multifraktál spektruma a $k = 1, 3, 9, 27$ -edrendű mintavételezéssel mérve, amit összehasonlítottunk Ball és Spivack [65] valamint Jensen és munkatársainak [66] eredményeivel. A mintavételezéses adatok nagyon jól illeszkednek a $q = 1$ tangenshez (Makarov tétel [63]), valamint különösen magasabb k értékek esetén a $q = 3$ tangenshez (Halsey elektrosztatikus skálázási törvénye [64]). Nagyobb α esetén, mint azt a kis ábra is mutatja, a mintavételezéses módszer a várakozás szerint nem alkalmazható. A mérés 10 db egyenként $N = 10^7$ részecskét tartalmazó kétdimenziós fürt felhasználásával történt, $A = 0.1$ zajcsökkentés mellett. [S7]

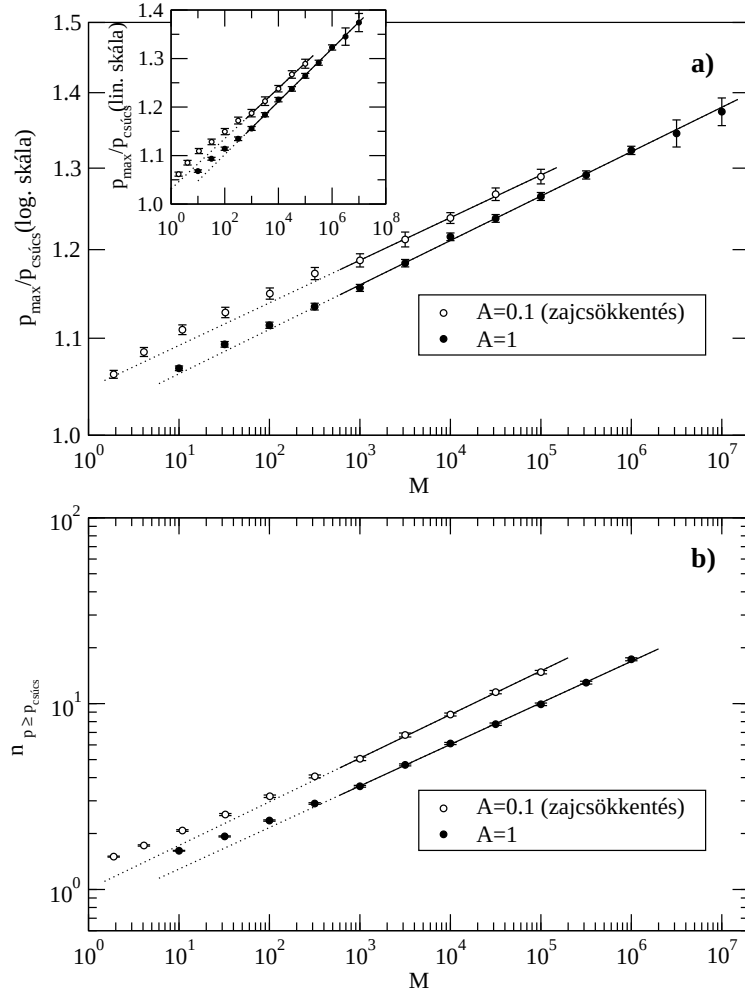
leggyorsabban növekedő rész valóban a csúcs-e [67]. Nagy skálájú numerikus méréseim azt mutatják, hogy a csúcs skálázási exponense és a leggyorsabban növekedő tartomány szingularitási exponense közötti különbség a következő korlátok közé szorítható:

$$0 \leq \alpha_{\text{csúcs}} - \alpha_{\min} \leq 0.03 \pm 0.005,$$

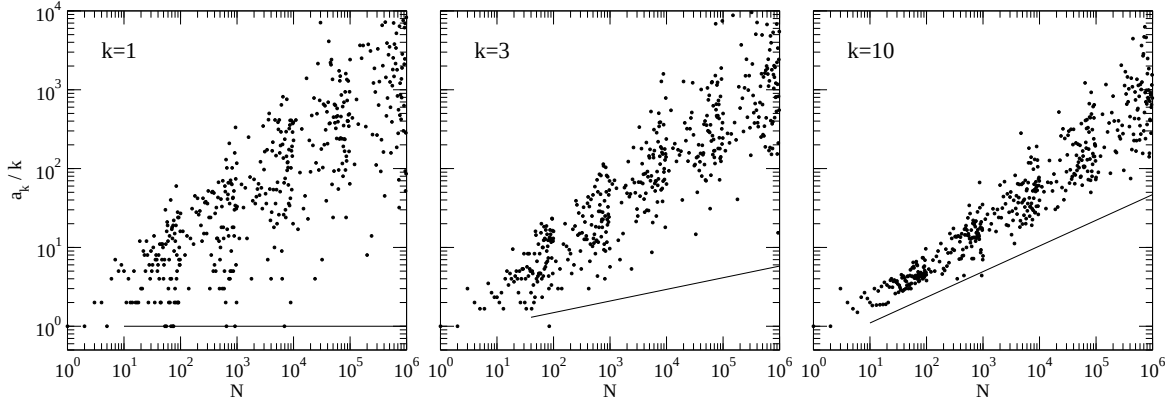
ami cáfolja a Hastings-Levitov iterált konform leképezéssel mért, kisebb skálájú szimulációkon alapuló állításokat [67]. Részleteket a 21. ábrán láthatunk.

A következőkben felállítunk egy rácsmentes DBM modellt, amely a fentiekben bemutatott, a részecskék visszatérési gyakoriságán alapuló mintavételezést használja. Ebben a modellben a szokásos módon véletlen bolyongó részecskéket indítunk egyenként, amelyek a μ növekedési valószínűség-eloszlást lineárisan mintavételezik. Amikor a bolyongó részecske eléri a fürtöt, az a_k mennyiség felhasználásával (ami az érkező részecske k -adik elődje óta érkező, a fürtöt építő részecskék száma) kapjuk a $\mu_k = k/a_k$ becslést, amely alapján az újonnan érkező részecskét úgy helyezzük el, hogy az $Aa_k^{1-\eta}$ nagyságú növekedést okozzon.

Feladatunk most a paraméterek, A és k megfelelő megválasztása. Az egyik korlát abból származik, hogy a mintavételezéssel meghatározott, vagyis sztochasztikus tényezőt is tartalmazó lokális növekedés átlagban megfeleljen az eredeti modellnek: $\langle a_k^{1-\eta} \rangle \propto \mu^{\eta-1}$, ami azt kívánja, hogy $k > \eta - 1$. A második korlát azzal kapcsolatos, hogy a mintavételezéshez a hatékonyság érdekében nem fagyaszthatjuk be a növekedést, hanem tesztészecskék helyett a



21. ábra: DLA fürtök csúcsainak és leggyorsabban növekedő tartományainak vizsgálata. Tesztrészecskék becsapódásait rögzítettem befagyasztott fürtökre, ezáltal ki lehetett számolni a növekedési valószínűséget a perem minden részére, így a (középponttól legmesszebb levő) csúcsra is. (a) A legnagyobb növekedési valószínűség és a csúcs növekedési valószínűségének hányadosa. A hányados lassan növekedő függvénye az M fürt tömegnek. Legjobban hatványfüggvény illeszthető: $p_{\max}/p_{\text{csúcs}} \sim M^{(\alpha_{\text{csúcs}} - \alpha_{\min})/D}$, ahol $\alpha_{\text{csúcs}} - \alpha_{\min} = 0.03 \pm \pm 0.005$. Viszont, amint az a betétábrán is látható, nem lehet kizárni, hogy csak egy logaritmikus korrekciót látunk; ebben az esetben $\alpha_{\text{csúcs}} = \alpha_{\min}$. (b) A perem azon szakaszainak (részecskéinek) száma, amelyeknek a növekedési valószínűsége nagyobb, mint a csúcsé. Ez a fürt sugarának hatványfüggvénye szerint skálázódik, ahol az exponens a csúcsok fraktáldimenziója: $n_{p \geq p_{\text{csúcs}}} \sim R^{f_{\text{csúcs}}} \sim M^{f_{\text{csúcs}}/D}$. Ez az exponens nagyobb, mindenképpen elhatárolható nullától: $f_{\text{csúcs}} = 0.38 \pm 0.03$. Mindkét ábrán egyrészt standard DLA ($A = 1$) adatsorait látjuk, az átlagolásnál a sokaságok nagysága mérettől függően $10^4 \dots 10^5$ között volt, valamint zajcsökkentett DLA-t ($A = 0.1$), ahol a sokaságok nagysága $4200 \dots 10^4$ közötti volt. A tesztrészecskék számát úgy állítottam be, hogy minden egyes fürt csúcsa 2500 becsapódást kapjon. A folytonos vonalak a legjobban illeszkedő egyenesek az alattuk levő adatpontokra, a pontozott vonalak ezen illesztés extrapolációi az illesztésből kizárt adatpontok felé. [S7]



22. ábra: Az a_k/k értékek DLA-ra ($\eta = 1$, $A = 1$). Nagy N -re az áttekinthetőség kedvéért az adatpontoknak csak töredékét ábrázoltuk. Az egyenesek a (28) becslést mutatják, amely megfelelően konzervatíván követi a minimum a_k/k értékeket. [S7]

fürtöt alkotó részecskéket használjuk. Ez viszont azt jelenti, hogy egy adott részecskét véve a k -adik előd érkezése óta már változott a lokális geometria, történt növekedés. Ennek hatását limitáljuk úgy, hogy kikötjük, hogy a k -adik előd nem lehet messzebb, mint egy részecske-átmérő. Naivan ez azt jelenti, hogy $A < 1/k$ (ha $\eta > 1$) illetve $A < N^{\eta-1}$ (ha $\eta < 1$), ahol N a részecskék száma.

Ezen jelentősen tudunk javítani, ha megengedjük, hogy A változzon N függvényében. Ehhez azt kell tudnunk, hogy mik a legkisebb várható a_k értékek az N függvényében. A leggyorsabban növekedő csúcsokat vizsgálva (ahol a_k a legkisebb) egy rövid számolás [S7] azt adja, hogy

$$\min\{a_k\} = \min \begin{cases} (R^{\tau(k+1)-\tau(2+\eta)}A)^{1/k} \\ 1 \end{cases}. \quad (28)$$

Ezt közvetlenül tudjuk tesztelni numerikusan, például DLA-ra, ahol $\eta = 1$ és $\tau(3) = D$. A 22. ábrán láthatjuk, hogy a (28) becslés megfelelően konzervatív.

Azt megkövetelve, hogy a lokális növekedés mindig kisebb legyen egy részecske átmérőnél, vagyis $\delta m \ll 1$, arra jutunk, hogy

$$A \approx R^{(\eta-1)[\tau(k+1)-\tau(2+\eta)]/(k+1-\eta)} \quad (29)$$

A $k+1 > \eta$ korlátot figyelembe véve azt látjuk, hogy az R hatványkitevője monoton csökken k -val az $(\eta-1)/\alpha_{\min}$ aszimptotához, ahogy $k \rightarrow \infty$.

A gyakorlatban nem tudjuk k -t túl nagyra állítani, mert a k -függő prefaktorok kezdik ellensúlyozni az R hatványkitevőjének optimalizálását, de $k = 10$ már elég közel visz a határértékhez. Továbbá a (29) kifejezést nem tudjuk közvetlenül használni, mert a $\tau(k+1)$ és $\tau(2+\eta)$ értékeket nem ismerjük előzetesen. Viszont, mivel tudjuk hogy létezik egy ilyen aszimptotikus skálázás, az $A = A_0 k^{\eta-2} N^\beta$ empirikus skálázás paramétereit úgy állítjuk be, hogy a korlátok ki legyenek elégítve. Így a gyakorlatban használt képlet a lokális növeke-

η	k	A_0	β
0.5	1	0.8	-0.45
1.5	10	0.85	0.138
2	10	0.8	0.234
3	10	0.85	0.32

3. táblázat: A mintavételezéses DBM algoritmus paraméterei néhány η értékre. A növekedési szabályt a (30). képlet mutatja. [S7]

désre (minden új részecske ennyivel nyúlik túl az eddigieken):

$$\delta m = \frac{A_0}{k} N^\beta \left(\frac{a_k}{k} \right)^{1-\eta}, \quad (30)$$

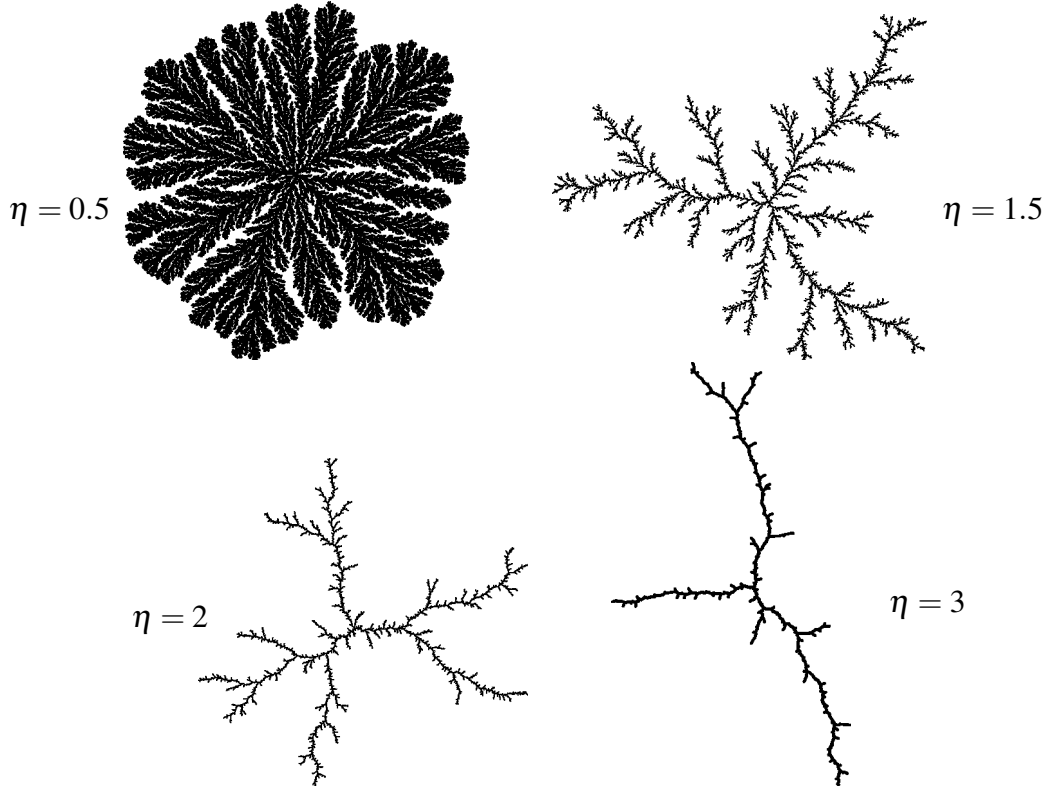
ahol a paraméterek értékeit néhány η -ra a 3. táblázatban gyűjtöttem össze. A módszer az 1-hez közeli η értékekre a legeffektívebb, ami magában foglalja a felület feszültség regularizáció [E2, E3] miatt fontos $1 \leq \eta \leq 2$ tartományt; itt olyan méretű fürtök generálását teszi lehetővé, amely más módszerek számára elérhetetlen. Nagyobb η értékekre (kb. $\eta \gtrsim 3$) ez az előny már elveszik.

A fentiekben leírt módszerrel generált DBM fürtök közül mutatok néhányat a 23. ábrán a $0.5 \leq \eta \leq 3$ paraméter-tartományban.

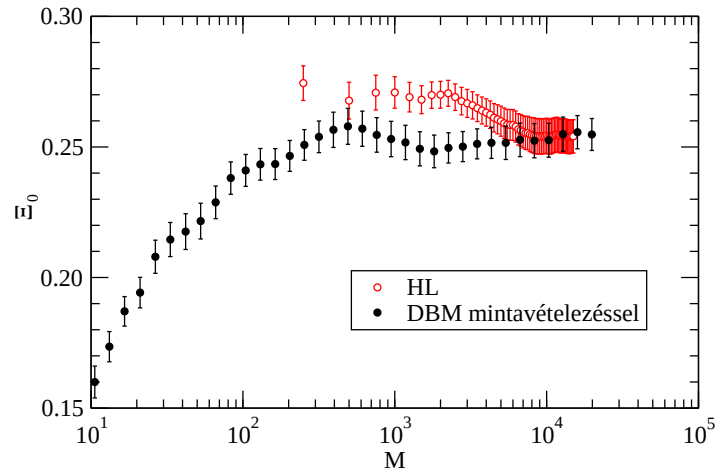
A módszer validálására a $\Xi_0 = \sqrt{\langle r^2 \rangle - \langle r \rangle^2} / \langle r \rangle$ „relatív sokaság behatolási mélység” mennyiséget választottuk, amelynek M függését összehasonlítottuk a már szélesebb körben elfogadott Hastings-Levitov iterált konform leképezéssel $\eta = 2$ DBM-re. Amint az a 24. ábrán látható, mindkét módszer esetében ugyanahhoz az aszimptotikus értékhez tart a konvergencia. A mintavételezéses módszer esetén a konvergencia gyorsabb, ami érthető, hiszen itt nagyobb a zajcsökkentés.

Az új módszer felhasználásával kapott legfontosabb numerikus mérések eredményeit láthatjuk a 25. ábrán. Két mennyiséget, az $\alpha_{\text{csúcs}}$ exponens és a D fraktáldimenziót mértem az η függvényében. A négy ábrázolt adatsor a hibahatáron belül konzisztens egymással, $0 \leq \eta \leq \eta_c$ között sima monoton viselkedést látunk. (A mintavételezéses DBM-en kívül szerepel a társszerzőim számolt, valamint a [59] referenciából vett Hastings-Levitov iteratív konform leképezéssel kapott eredmények, valamint a Shraiman-Bensimon egyenletből számolt értékek²). A hibahatáron belül viszont látunk különbségeket: a HL módszerek szerint az $1 \leq \eta \lesssim 2$ tartományban $\alpha_{\text{csúcs}}$ alig változik (látszólag megerősítve a korábbi sejtéseket [E2, E3]), míg a mintavételezéses DBM módszer nem mutat ilyen vonást. A másik különbség, hogy nagyobb η -kra a mintavételezéses DBM alacsonyabb értékeket ad mind az $\alpha_{\text{csúcs}}$ -ra, mind a D -re mint a HL módszer. Habár a mintavételezéses DBM módszerrel nem volt praktikus méréseket végezni $\eta > 3$ -ra, ezen adatsor extrapolációja jobban konzisztens az $\eta_c = 4$ állítással.

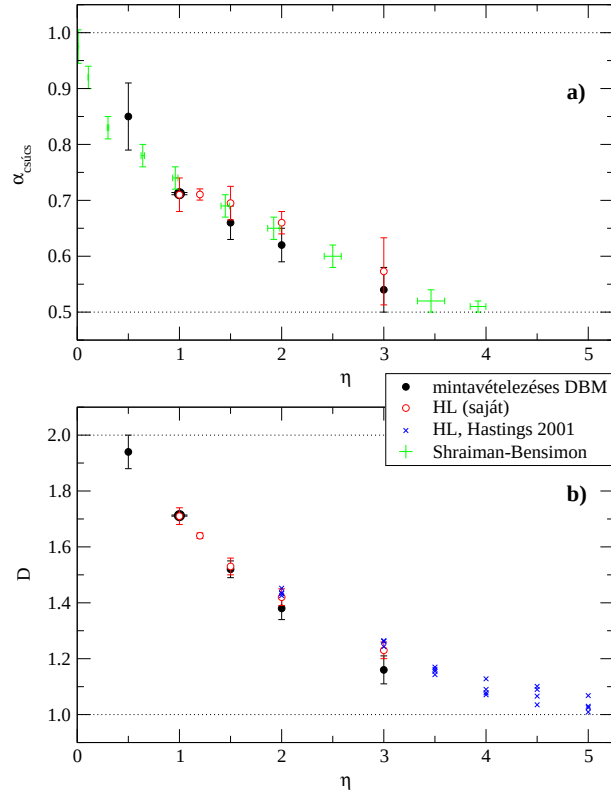
² A kétdimenziós DLA-ra felírt, a ϕ Laplace-i skalármező komplex kiterjesztésének evolúcióját leíró Shraiman-Bensimon egyenlet [32] kiterjeszthető DBM-re [E2, E3], aminek direkt integrálásából kapható az ábrázolt (társszerzőim által számolt) adatsor. Részletek az [S7] referenciában találhatók.



23. ábra: Egyenként $N = 10^6$ részecskéből álló, mintavételezéses algoritmussal növesztett DBM fűrtök különböző η értékekre. [S7]



24. ábra: A $\Xi_0 = \sqrt{\langle r^2 \rangle - \langle r \rangle^2} / \langle r \rangle$ relatív behatolási mélység összehasonlítása a mintavételezéssel illetve Hastings-Levitov iterált konform leképezéssel készített $\eta = 2$ DBM fűrtökre. Mindkét esetben a sokaságok nagysága 30 volt, és fűrtönként 3000 nem-növesztő tesztészecskét használtunk. Mindkét módszer ugyanahhoz az értékhez konvergál, a mintavételezéses módszer esetén a konvergencia valamivel gyorsabb. [S7]



25. ábra: (a) Az α_{csucs} skálázási exponens és (b) a D fraktáldimenzió az η nemlinearitási paraméter függvényében. Az adatsorok: • mintavételezéses DBM, ○ társszerzőim által számolt Hastings-Levitov iteratív konform leképezés eredmények, × HL eredmények Ref. [59] alapján, és + a Shraiman-Bensimon egyenletből számolt értékek. Mivel ez utóbbiakat az $\eta_0 = \eta_1/\alpha$ képlettel konvertáltuk rögzített η_1 mellett végzett méréseinkből, mind az α , mind az η koordinátának van statisztikai bizonytalansága, amit a hibavonal jelöl. A „mintavételezéses DBM” $\eta = 1$ esetére valójában DLA mérés (nagyon kicsi mérési hibával) az [S8] publikációm alapján, és az $\alpha_{\text{csucs}} = D - 1$ képlet felhasználásával. A pontozott vonalak a két korlátot jelölik: sűrű kétdimenziós növekedés ($\eta = 0$), illetve nem elágazó egydimenziós növekedés ($\eta \geq \eta_c$). [S7]

7. DIFFÚZIÓ-LIMITÁLT AGGREGÁCIÓ HATÁROLT TARTOMÁNYOKBAN

Ebben a fejezetben határolt, csatorna és ék alakú tartományokban vizsgáljuk a diffúzió-limitált aggregáció viselkedését. Egyrészt kielégítő választ adunk arra a vitatott kérdésre, hogy a DLA fraktáldimenziója különböző-e szabad síkban és csatorna geometriában, másrészt vizsgáljuk azt, hogy a zajos DLA fürtök átlaga megegyezik-e a determinisztikus Laplace-i növekedés megoldásával, mely csatorna és ék alakú tartományokban aszimptotikusan sima megoldásokat mutat. Jelen fejezet adja a T4 tézispontot, amely az [S8, S9] publikációimban található numerikus eredményeimen alapul.

Az irodalomban több vitatott állítás is felbukkant a DLA-val kapcsolatban. Ezek közül

az egyik az, hogy a DLA fraktáldimenziója függ a határfeltételektől: különböző lenne szabad síkbeli és csatorna geometriákban. Ez az állítás többnyire kis skálájú szimulációkból [68, 69, 70], vagy kis skálájú számolásokból ered [71, 72]. Meglehetősen zavaró lenne ha ez igaz lenne, még akkor is, ha a diffúzió-dominált növekedési folyamatok témakörében találunk példát arra, hogy a határfeltétel fundamentálisan befolyásolja a megoldást (a viszkozus ujjasodás nyílt sík geometriában aszimptotikusan is elágazó struktúrákat eredményez, csatorna geometriában viszont az instabilitás kezdeti következményeinek hátrahagyása után egy sima, a csatorna kb. felét kitevő ún. Saffman-Taylor megoldás alakul ki [27]).

Nagy skálájú³ vizsgálatot végeztem a rácsmentes DLA dimenziójának meghatározására csatorna geometriában. A csatorna a síkban az $x > 0$ és $-w/2 < y < w/2$ által meghatározott tartomány, ahol w a csatorna szélessége. Három mérést végeztem: (1) periodikus határfeltétellel (az $y = \pm w/2$ határokon), (2) tükröző határfeltétellel, és (3) periodikus határfeltétellel zajcsökkentés mellett $A = 0.1$ paraméterrel. A tükröző határfeltétel implementációja úgy történt, hogy dupla széles csatornát használtam periodikus határfeltétel mellett, és minden egyes lerakott részecskével elhelyeztem annak tükröképét is.

Csatorna geometriában a domináns makroszkopikus távolságskála a csatorna szélessége (és nem a csatorna mentén a fürt hossza), így a fraktáldimenziót is ennek segítségével lehet mérni. A sűrűség például (a részecskék száma egységnyi területen) hatványfüggvény szerint függ w -tól, az exponenst a kodimenzió adja:

$$\rho(w) \sim w^{D-2}.$$

A tranziensek elkerülése érdekében a fürtök első és utolsó $3w$ hosszú részét elhagytam, és a sűrűséget csak a megmaradt középső szakaszon számoltam.

DLA fürtöket generáltam $w = 50, 100, 200, 500, 1000, 2000$, és 5000 részecske-átmérő szélességű csatornában, egyenként 8×10^6 és 32×10^6 közötti számú részecskével. A sokaság mérete minden w értékre több száz és több ezer között változott, több és nagyobb fürtöket számlálva a szélesebb csatornák estére, hogy hasonló statisztikai bizonyosságot lehessen elérni az átlagos sűrűség számolásakor.

A 26. ábra mutatja a $D_{\text{eff}} = 2 + d \ln \rho / d \ln w$ effektív dimenzió függését a w csatornaszélességtől. A fraktáldimenzió aszimptotikus értéke $D = 1.712 \pm 0.002$, függetlenül a határfeltétel választásától, amely érték konzisztens a nyílt sík geometriában mért $D = 1.712 \pm 0.003$ értékkel [55]. A zajcsökkentés sem változtatja meg a dimenziót, csak felgyorsítja az annak aszimptotikus értékéhez való konvergenciát.

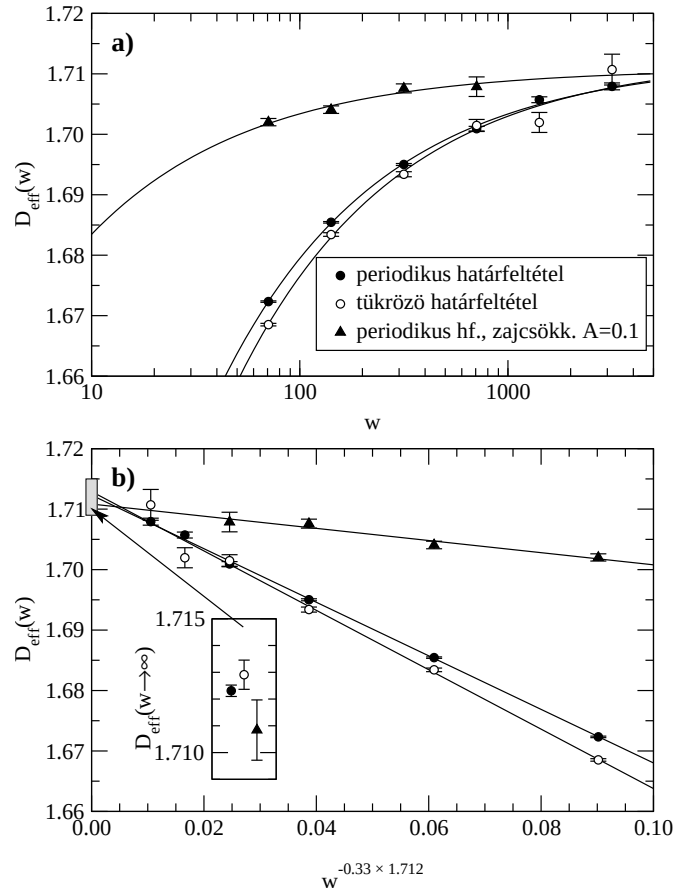
Most áttérünk az átlagos DLA profil kérdésére. A Laplace-i növekedésnek már hosszú ideje ismert egy sima (nem elágazó) megoldása, amely egy fix profil transzlációja a csatorna mentén az idő függvényében. A felületi feszültség mentes esetben a megoldások egy egy paraméter szerinti családot (Saffman-Taylor megoldás) alkotnak [27]. A paraméter az ujj-szerű megoldások szélességének és a csatorna szélességének aránya: $\lambda = w_{\text{ujj}}/w$, a profil alakja pedig

$$x(y) = \frac{w(1-\lambda)}{2\pi} \ln \left[\frac{1}{2} \left(1 + \cos \frac{2\pi y}{\lambda w} \right) \right]. \quad (31)$$

³ A 26. ábrán bemutatott eredmény 1.7×10^{11} részecske felhasználásával készült.

Ezek közül a megoldások közül a $\lambda = 1/2$ a legfontosabb, mert a Hele-Shaw cellában végzett kísérletek ezt adták vissza a nagyon kicsi felületi feszültség limeszében [27]. Analitikus számolások [73, 74, 75] azt mutatták, hogy a felületi feszültség jelenlétében (amely itt szinguláris perturbáció) a megoldások egy diszkrét halmazt alkotnak, amelyek közül csak egy lineárisan stabil, és amelyek a zérus felületi feszültség limeszben mind a $\lambda = 1/2$ Saffman-Taylor megoldáshoz konvergálnak.

Az az állítás merült fel [76], hogy a $\lambda = 1/2$ Saffman-Taylor megoldás megegyezik a csatorna geometriában tükröző határfeltétel mellett növesztett DLA fürtök átlagos profiljával. Itt az átlagos profilt a sűrűség sokaság-átlagának egy szintvonalával definiálták. Később az állítás úgy módosult [77], hogy a maximum sűrűség 0.5-szeresének megfelelő szintvonal a $\lambda = 0.56$ Saffman-Taylor megoldással egyenlő, a $\lambda = 1/2$ Saffman-Taylor megoldást



26. ábra: (a) A DLA effektív fraktáldimenziója a csatornaszélesség függvényében. A statisztikai hiba nagyságát jelöltem külön mindhárom méréssorozatra. A görbék a (b) panel egyeneseseinek felelnek meg.

(b) Ugyanezen mennyiség végesméret-skálázása; az exponens megegyezik az 5. fejezetben kapott értékkel (15). Betétábra: mindhárom adatsor konzisztens a $D = 1.712 \pm 0.002$ aszimptotikus értékkel (a három adatpontot vízszintesen eltoltam a könnyebb átláthatóság érdekében). [S8]

pedig a maximum sűrűség 0.6-szeresének megfelelő szintvonal adja.

Mi az átlagos DLA profil meghatározására egy másik módszert választottunk, amely nem tartalmaz semmilyen paramétert (mint például a szintvonal magassága az előző esetben). Ez a módszer 2D-ban működik: minden egyes DLA fürt esetén vesszük azt a konform leképezést, amely leképi az egységkört a fürt (rendkívül elágazó) peremvonalára, majd vesszük ezen konform függvények sokaságátlagát. A klasszikus, bolyongó részecskékkel generált DLA esetén úgy kapjuk meg egy befagyasztott fürt konform leképezését [62], hogy indítunk M tesztrészecskét véletlen bolyongásra, megjegyezzük hogy ezek hol csapódtak be a fürtbe, majd eldobjuk őket. Ezek a pontok az egységkörön M egyenletes eloszlású pontnak felelnek meg. A tesztrészecskék becsapódási helyét ezután topologikusan sorszámozzuk úgy, ahogy találkozunk velük miközben végigjárjuk a DLA fürt határvonalát. Az m -edik becsapódási hely az egységkörön a $2\pi m/M$ szögnek felel meg, amelyben van ugyan egy $M^{-1/2}$ nagyságrendű hiba, de ez nagy M határértékben eltűnik.

Ezután kimértem az így definiált átlagos DLA profilt tükröző határfeltétel mellett különböző szélességű csatornákra $10 \leq w \leq 2000$ között. Minden csatornaszélességre növesztettem 10^5 rövid (kb. $10w$ hosszú) fürtöt, amiket egyenként 10^5 teszt részecskével szondáztam a konform leképezés meghatározásához; valamint néhány kiválasztott csatornaszélességre további 10^4 fürtöt szondáztam 10^6 teszt részecskével (mindösszesen 4×10^{11} részecskét használva).

Az így kapott átlagos DLA profilokat a 27. ábra mutatja. Jól látszik, hogy bár a csúcs környékén a $\lambda = 1/2$ Saffman-Taylor megoldás közel van az átlagos DLA profilokhoz, attól távolabb még a legszélesebb csatornához tartozó profil is jelentősen eltér. Az a Saffman-Taylor megoldás ($\lambda = 0.63$) pedig, amelyik visszaadja a széles csatornához tartozó DLA profilok szélességét, a csúcs környékén nem illeszkedik egyáltalán.

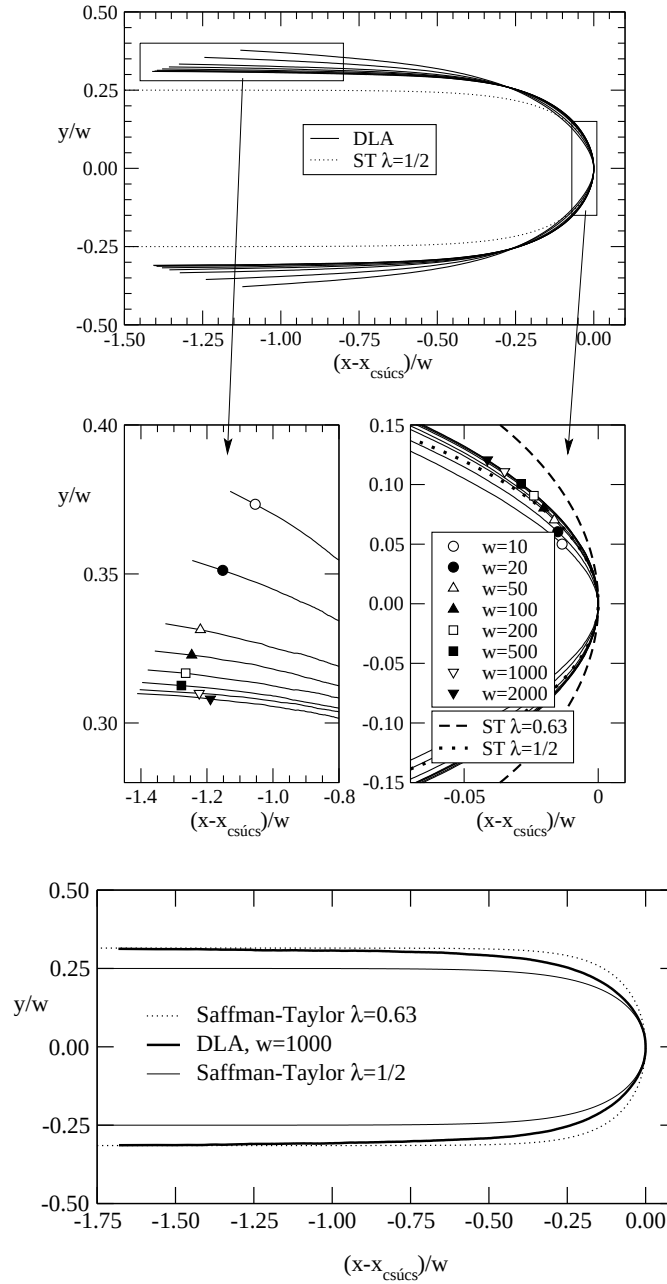
Az aszimptotikusan nagy csatornaszélesség vizsgálatára végeztem egy végesméret-skálázást, a DLA profilok szélességet három helyen mérve: $\xi = (x - x_{\text{csúcs}})/w = -0.5, -1$, és -1.5 (lásd a 28. ábra). Bár a profilok szélessége a $\xi \rightarrow \infty$ határértékben értendő, jól látható, hogy $w_{\text{ujj}}/w > 0.617$.

Megjegyzésként a 29. ábrán láthatjuk a HL iterált konform leképezés módszerével számolt átlagos DLA és DBM profilt néhány η értékre.⁴ A DLA-nak megfelelő $\eta = 1$ esetén a részecske-alapú szimulációimmal konzisztens módon az átlagos profil szélesebb, mint a $\lambda = 1/2$ Saffman-Taylor megoldás, érdekes módon viszont az $\eta = 1.2$ DBM közel áll hozzá – ez az az η érték, ami a már említett elméleti megfontolások szerint [E2, E3] megfelel a DBM modellek közül a felületi feszültség által regularizált Laplace-i növekedési rendszereknek.

Az átlagos DLA profilokat ék geometriában is kimértem. A tükröző határfeltételt használtam, amit úgy oldottam meg, hogy egy nyílt síkbeli DLA programot használva minden egyes lerakott részecskével a megfelelő számú (például 90° -os ék esetén 3) tükröképét is letettem. Így $180^\circ/n$ nyílásszögű ékeket lehet modellezni, ahol $n = 1, 2, \dots$. Példaként a 30. ábrán egy 90° -os ékben növesztett DLA fürt látható.

A 31. és 32. ábra 90° -os és 60° -os ékekre mutatja három profil összehasonlítását. Az első az adott geometriában növesztett DLA fürtök átlagos profilja, amit a csatorna esetével

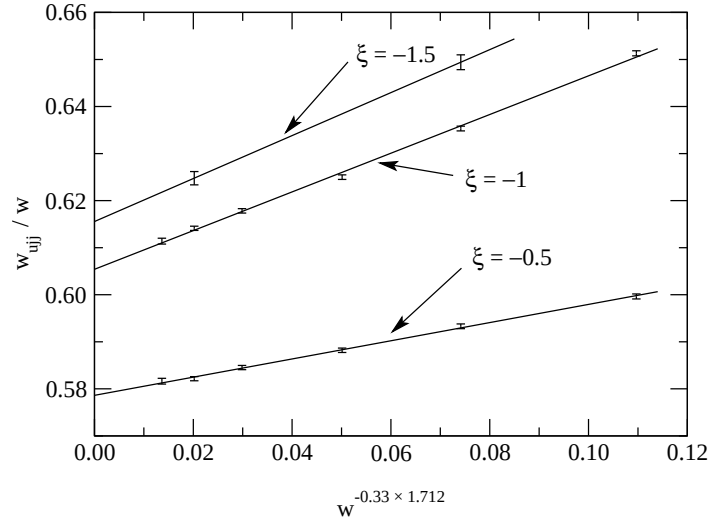
⁴ Ezt a számolást társzerzőim végezték.



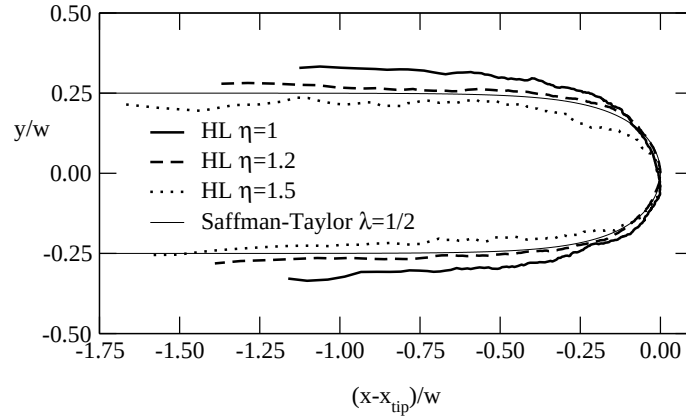
27. ábra: *Felső panel:* Átlagos DLA profilok $w = 10, \dots, 2000$ szélességű csatornában. Összehasonlításként a $\lambda = 1/2$ Saffman-Taylor megoldást is feltüntettük.

Középső panelek: A felső panel profiljaiból az oldalsó, illetve csúcs rész nagyítása.

Alsó panel: Az átlagos DLA profil és a Saffman-Taylor megoldások összehasonlítása, hasonlóan mint a felső panelen, csak a jobb áttekinthetőség kedvéért itt egyedül a $w = 1000$ széles csatorna DLA profilját tüntettük fel. Jól látszik, hogy sem a $\lambda = 0.5$, sem a $\lambda = 0.63$ Saffman-Taylor megoldás nem illeszkedik a DLA profilra. [S8]



28. ábra: Az átlagos DLA profil szélességének véges méret skálázása. A w_{ujj}/w redukált szélességet ábrázoljuk három különböző $\xi = (x - x_{csúcs})/w$ helyen mérve. Az illesztéshez csak az $50 \leq w \leq 2000$ méréseket használtuk fel. A véges méret skálázás a $w \rightarrow \infty$ aszimptotikus értéket adja (az egyenesek y-tengellyel való metszete). A másik, $\xi \rightarrow -\infty$ extrapoláció eredményéről csak annyit állapíthatunk meg, hogy $w_{ujj}/w > 0.617$. [S8]

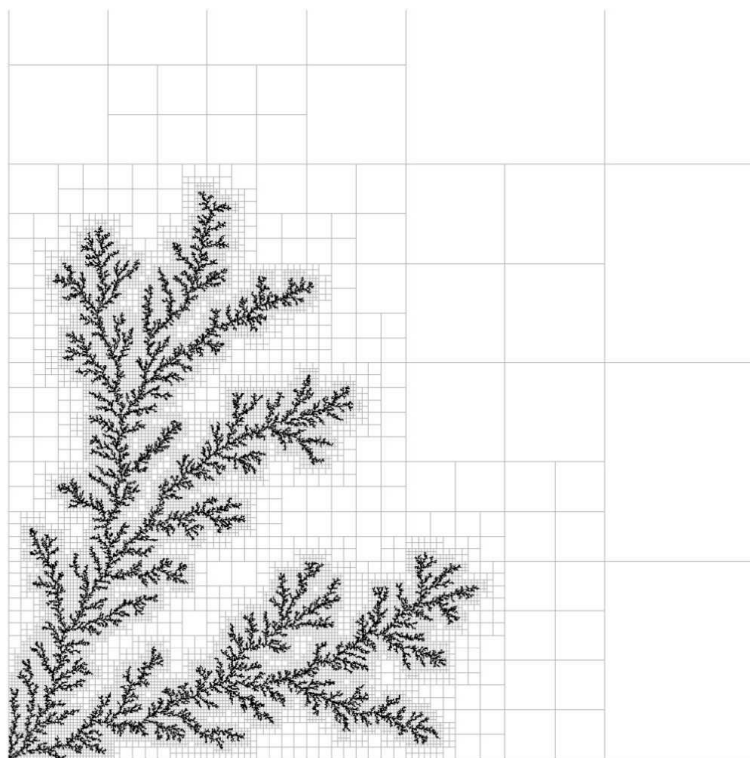


29. ábra: Az átlagos DLA és DBM profil a Hastings-Levitov iterált konform leképezés módszerrel számolva. A $\lambda = 1/2$ Saffman-Taylor megoldáshoz az $\eta = 1.2$ profil áll legközelebb. [S8]

teljesen analóg módon számoltam ki. A második profil az $\eta = 1.2$ DBM fűrtök átlagos profilja, amit a mintavételezett részecske alapú módszerrel számoltam. A harmadik profil pedig az adott geometriában kiszámolt, a felületi feszültség stabilizációja által kiválasztott szögű Saffman-Taylor megoldás [78, 79].

Az átlagos DLA ill. DBM profil összehasonlítása a zaj nélküli Laplace-i növekedés sima megoldásaival a három esetben (60° -os és 90° -os ék, illetve a csatorna, ami tekinthető az ék geometria 0° -os limeszének) összetett eredményre vezet:

- *csatorna geometria*: Az átlagos DLA profil nem illeszkedik a nagyon kicsi felületi



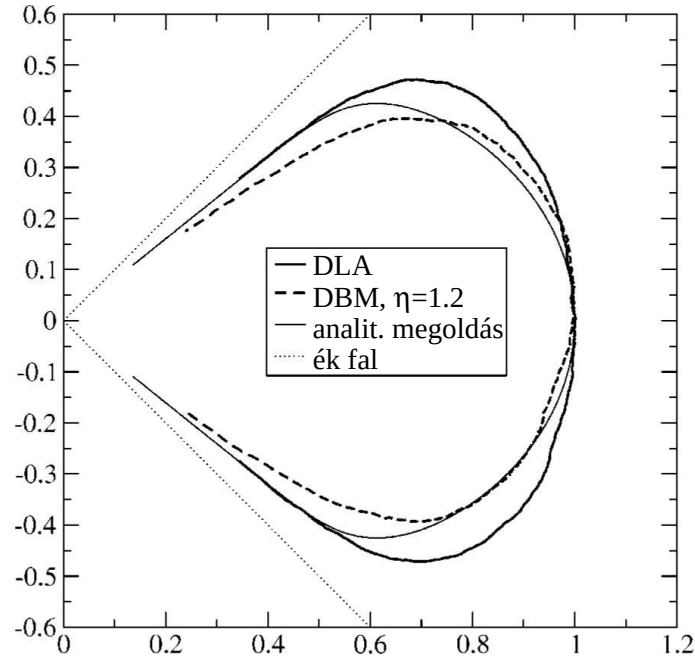
30. ábra: DLA fürt 90° -os ék geometriában, tükröző határfeltételekkel. Az ábrán a hierarchikus térkép struktúrája is látható. [S9]

felszűrttség által kiválasztott $\lambda = 1/2$ Saffman-Taylor megoldásra. Úgy tűnik, az $\eta = 1.2$ DBM profil, aminek egyes elméleti megfontolások alapján [E2, E3] legjobban kellene illeszkednie, közel áll hozzá, de ennél többet a DBM profil jelentős zaja miatt (amely iterált konform leképezés módszerrel készült) nem lehet állítani.

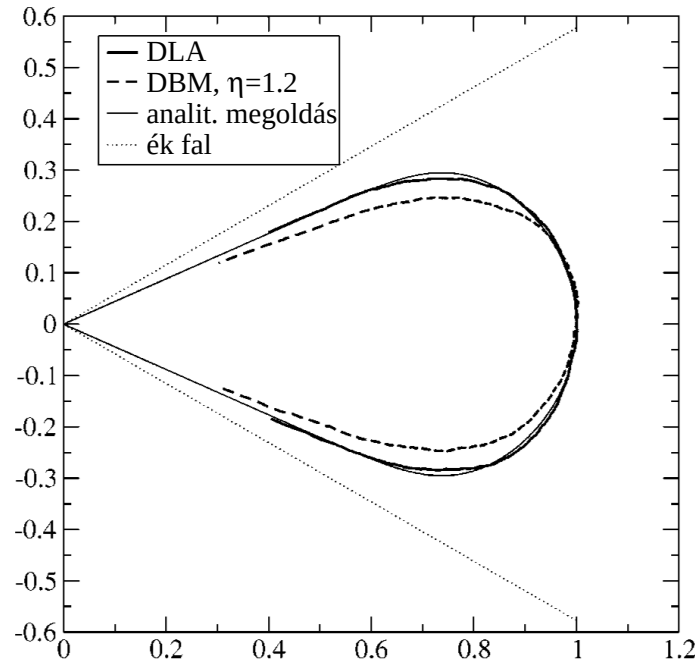
- 90° -os ék: Sem az átlagos DLA profil, sem a mintavételezett részecske alapú módszerrel számolt $\eta = 1.2$ DBM profil nem illeszkedik a kicsi felületi felszűrttség által kiválasztott Saffman-Taylor megoldásra, habár az átlagos DLA profil nyílásszöge egyezést mutat.
- 60° -os ék: Itt az átlagos DLA profil elég jó egyezést mutat a kicsi felületi felszűrttség által kiválasztott Saffman-Taylor megoldással (így a nyílásszögével is), a mintavételezett részecske alapú módszerrel számolt $\eta = 1.2$ DBM profil viszont jelentősen eltér tőlük.

Konklúzióként azt állapíthatjuk meg, hogy *általánosságban* nem igaz, hogy a zaj nélküli, determinisztikus diffúzió-dominált növekedés sima megoldása megegyezik ennek részecske-alapú, tehát sztochasztikus sörétzajjal terhelt modelljeinek átlagos profiljához, sem az $\eta = 1$ esetben (DLA), sem az $\eta = 1.2$ DBM esetében.

A teljes igazsághoz az is hozzátartozik azonban, hogy a különböző geometriákban néhol az $\eta = 1$, néhol az $\eta = 1.2$ részecskemodell átlagos profilja nagyon jó egyezést mutat,



31. ábra: Átlagos DLA és $\eta = 1.2$ DBM profil, összehasonlítva az analitikus Saffman-Taylor megoldással 90°-os ék geometriában. [S9]



32. ábra: Átlagos DLA és $\eta = 1.2$ DBM profil, összehasonlítva az analitikus Saffman-Taylor megoldással 60°-os ék geometriában. [S9]

viszont olyan eset is van, amikor egyik sem. Ez kapcsolatban lehet azzal, hogy az adott geometriában az az instabilitás, amely a csúcs felhasadásával jár (tip-splitting), jelen van-e. Szög-korrelációs mérések azt mutatják, hogy kellően nagy nyílásszögű ék geometriában a DLA fürtökben több független ág is együtt élhet, míg kis szögű ékek esetében csupán egyetlen permanens ág van [80]. (Ez azt jelenti, hogy kis szögű ékek esetén a DLA-ban mindig jelenlevő mikroszkopikus csúcs-hasadás következtében létrejövő ágak egy domináns ág kivételével mindig elhalnak, vagyis egy idő után nem fejlődnek tovább.) A két fajta viselkedést elválasztó nyílásszöget nehéz pontosan meghatározni, valahol 90° és 144° között húzódik.⁵

⁵ Korábban 60° -os éknél is jelentettek csúcs-hasadást [77], de ezt nagyon kicsi fürtök vizsgálatával találták.

I.C. Diffúzió táguló térben

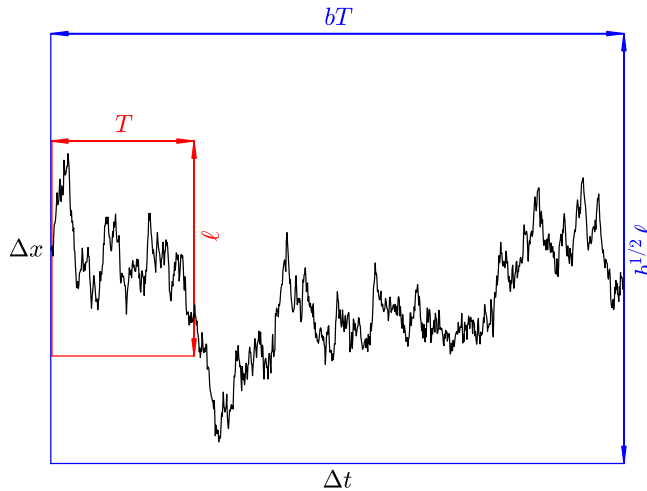
8. BEVEZETÉS : SKÁLAINVARIÁNS DINAMIKA ÉS TÁGULÓ TÉR

A természetben számos olyan folyamat található, amelyben a jelenségek mögötti fizika által kijelölt karakterisztikus méretskálák, például hosszúságskálák vagy időskálák nagyon eltérőek, az arányuk akár több nagyságrend is lehet. Az ilyen folyamatokat köztes méretskálán vizsgálva azt tapasztaljuk, hogy minden mért mennyiségben megjelenik az azonos nagyságrendbe eső karakterisztikus méretskálák hiánya, vagyis bármely köztes méretskálán ugyanazt látjuk: a jelenség skálainvariáns. Ezt a tulajdonságot a kvantitatív leírás is tükrözi, ami hatványfüggvény alakú viselkedést eredményez. A hatványkitevők nem minden esetben egész számok: tört hatványkitevőkre az alacsony dimenziós determinisztikus (kaotikus) rendszerektől kezdve az egyensúlyi fázisátalakulásokat keresztül az egyensúlytól távoli sztochasztikus folyamatokig nagyon sok példát találhatunk.

A skálainvariáns jelenségek, mint például az önhasznó térbeli struktúrák (fraktálok) különösen az 1980-as években kerültek a figyelem középpontjába [2, 1], de olyan eseteket mint a Brown mozgás vagy véletlen bolyongás, már jóval korábbról ismerünk. Ez utóbbinál az átlagos négyzetes elmozdulás arányos az idővel, vagyis a távolság dimenziójú mennyiség – az átlagos négyzetes elmozdulás négyzetgyöke – az eltelt idő $1/2$ hatványával arányos:

$$\sqrt{\langle \Delta x^2 \rangle} \sim \Delta t^{1/2}. \quad (32)$$

Ha egy ilyen sztochasztikus folyamat $\Delta x(\Delta t)$ függvénygráfját tekintjük, akkor egy rész felnagyítása statisztikailag az eredetivel azonos függvényt ad (33. ábra). Ehhez viszont a két tengelyt különböző arányban kell nagyítani.



33. ábra: Az egydimenziós Brown mozgás $\Delta x(\Delta t)$ gráfja. Egy kis részlet (piros doboz) felnagyítása statisztikailag azonos a függvény gráfjának egy nagyobb részével (kék doboz), de a két tengelyt különböző arányban kell nagyítani.

tengelyt különböző arányban kell nagyítani: a Δt tengelyt b -szeresére, a Δx tengelyt pedig b^γ -szorosára, ahol (32) alapján $\gamma = 1/2$. Az ilyen függvényeket önaffin függvényeknek hívjuk, ahol γ a Hurst vagy önaffin exponens.

A Brown-mozgást végző részecske előbb-utóbb tetszőleges távolságra eljut, vagyis egy dimenzióban minden pontot meglátogat. Viszont lassan halad, mert a kezdőponttól mért elmozdulás csak az eltelt idő négyzetgyökével arányos. Feltehetjük a kérdést, hogy akkor is mindon pontot meg fog-e látogatni, ha közben maga a tér is tágul. (Szemléletesen ezt úgy tudjuk elképzelni, hogy egy véletlen bolyongást végző hangyát egy folytonosan nyújtott gumiszálra teszünk.) Ebben az esetben a részecske bolyongásból származó haladása versenyez a tér tágulásával, és ahogy látni fogjuk, ha a tér elég gyorsan tágul, akkor a részecske nem tud vele lépést tartani.

A következő fejezetben ilyen, táguló térben bolyongó részecskéket fogunk vizsgálni, különös tekintettel lokálisan kölcsönható részecskékre. Vegyük például azt kölcsönhatást, amely szerint két részecske találkozáskor annihilálódik. Ezen kölcsönhatás esetén szignifikánsan különböző aszimptotikus állapothoz vezet, ha mozgásuk során a részecskék egymáshoz valószínűséggel találkoznak, vagy pedig ez a valószínűség egynél kisebb. Az előbbi esetben aszimptotikusan 0 vagy 1 részecske marad (attól függően, hogy kezdetben páros vagy páratlan számú részecske volt), míg az utóbbi esetben véges számú.

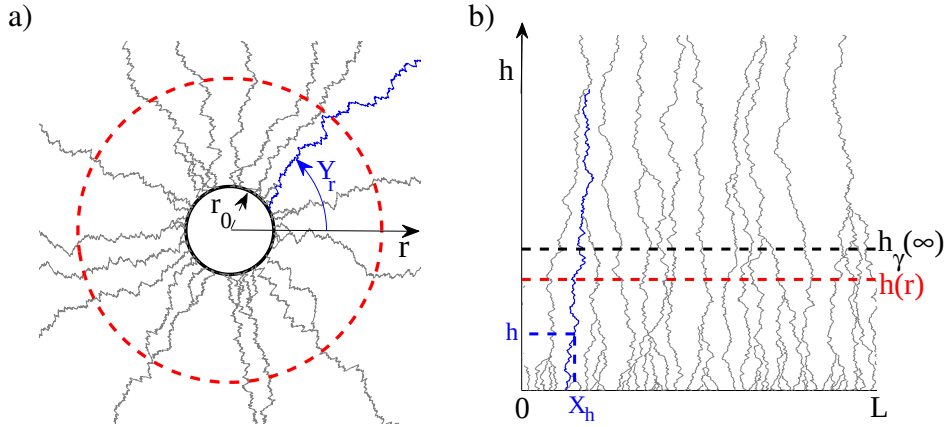
Az eredményeink nyilvánvaló alkalmazási területe a kozmológia, ahol a tágulást időfüggő metrika írja le (a tér két pontjának távolsága időben változik) [81]. A nem konstans metrika más területen, például a vékony lapok kontextusában is nagy érdeklődés keltett a közelmúltban [82, 83, 84]. Azon diffúziós folyamatok, amelyekben a diffúziós együttható időfüggő, például a változó hőmérséklet következtében [85, 86, 87], szintén leképezhetők időfüggő metrika szerinti leírásra. Biológiai kontextusban releváns, hogy a fajok életterének térbeli terjeszkedése gyakran szoros kapcsolatban áll a genetikai állomány változásaival [88], és ennek következtében erős hatással van természetes populációk génkészletére [89].

Az egyik legfontosabb alkalmazási terület az önaffin doménfalak fejlődésének leírása, melyek térbeli versengést leíró modellekben [90, 91] durva terjeszkedési frontok mögött alakulnak ki. Ezen modellek mikrobiológiai alkalmazásai érdeklődést váltottak ki a közelmúltban [92, 9]. A doménfalak fejlődését lokálisan kölcsönható részecskékkel is leírhatjuk; a következő fejezetben ezt a megközelítést fogjuk használni.

9. KÖLCSÖNHATÓ RÉSZESKERENDSZEREK IDŐFÜGGŐ GEOMETRIÁBAN

Ebben a fejezetben leírunk egy olyan leképezést, amely kapcsolatot teremt táguló térben illetve fix (nem táguló) térben lévő lokálisan kölcsönható részecskerendszerek skálainvariáns trajektóriái között. Ez a fejezet adja az [S10] publikáción alapuló T5 tézispontot. Ebben a munkában mint a kutatás egyik vezetője vettem részt, Adnan Ali doktori társ-témavezetőjeként¹.

¹ Az itt bemutatott eredmények Adnan Ali PhD disszertációjában találhatóak (University of Warwick, 2012).



34. ábra: (a) Radiálisan terjeszkedő struktúra, valamint (b) ennek ekvivalense fix szélességű tartományon. Az illusztráció összeoldvadó Brown mozgást végző részecskéket mutat ($\gamma = 1/2$). Az egymásnak megfelelő Y_r [(33). képlet] és X_h [(35). képlet] elmozdulás görbéi kékek. A radiális struktúrák eloszlása a középponttól mért r távolságban azonos a fix szélességű struktúrák eloszlásával $h(r)$ [(40). képlet] magasságban; ezt piros szaggatott vonal jelzi. Ennek a leképezésnek véges $h_\gamma(\infty)$ határértéke van $\gamma < 1$ esetén, amit a fekete szaggatott vonal mutat. (Az ábrán $L = 100$, $r_0 = L/2\pi$, a diffúziós együttható egységnyi, és kezdetben 100 ág indult.) [S10]

A leképezés erősen matematikai jellegű, technikai aspektusaival az [E15] publikációban foglalkozunk.

Tekintsük sztochasztikusan mozgó részecskék önaffin téridő trajektóriáit egy olyan térben, amelyben a metrika (a tér pontjai közötti távolság) térben homogén, de időben változik. Egy olyan leképezést keresünk, amely egy könnyebben kezelhető, konstans metrikájú térre képi le a rendszerünket, miközben megtartja a trajektóriák lokális skálainvarianciáját. A leképezés csak a metrika időfüggésétől és a trajektóriák önaffin exponensétől függ, és közvetlenül alkalmazható olyan kölcsönhatások esetére, amelyekben nincs távolságskála, mint például pontszerű részecskék annihilációja ($A + A \rightarrow \emptyset$) vagy egybeolvadása ($A + A \rightarrow A$). A részecskék kettéválása ($A \rightarrow A + A$), valamint véges méretű részecskék is kezelhetők a kölcsönhatási távolságskálák megfelelő (időfüggő) beállításával, amint azt később látni fogjuk.

A közérthetőség kedvéért a leképezést a következő példán keresztül mutatjuk be. Tekintsünk önaffin struktúrákat síkbeli radiális geometriában, például doménfalakat, melyek egy kör kerületéről indulva radiális irányban helyezkednek el. Ezek a struktúrák irányított ágakból állnak, amelyek tekinthetők egy-egy részecske téridőbeli trajektóriájának, ahol a részecske egydimenziós elmozdulásának a tangenciális irány (periodikus harárfeltétellel), az időnek pedig a radiális irány felel meg.

A 34(a) ábra egy ilyen struktúrát mutat: az r_0 sugarú körből induló önaffin görbék egydimenziós Brown mozgást végző, találkozáskor egybeolvadó részecskék lokálisan skálainvariáns trajektóriáinak felelnek meg, amelyek egy időben táguló körvonalon mozognak. A részecskék pozícióját a körvonal mentén jelöljük az r sugár függvényében Y_r -rel:

$$Y_r \in [0, 2\pi r), \quad \text{ahol} \quad r \geq r_0. \quad (33)$$

Ennek infinitezimális növekménye dr alatt

$$dY_r = Y_r \frac{dr}{r} + d\tilde{Y}_r, \quad (34)$$

ahol az első tag a tér tágulásának felel meg, a második pedig a lokális skálainvarianciát eredményező belső sztochasztikus fluktuációknak. A radiális (Y, r) koordináták helyett használhatunk (X, h) módosított poláris koordinátákat is, ahol a polárszög r_0 -szorosát jelöljük X_h , amely egy rögzített periódikus tartományban van:

$$X_h \in [0, L), \quad \text{ahol } h \geq 0, \quad (35)$$

a h és r közötti összefüggésre pedig hamarosan visszatérünk. Az $L = 2\pi r_0$ választás lehetővé teszi, hogy azonosítsuk az $X_{h=0}$ és $Y_{r=r_0}$ kezdeti feltételeket. Így

$$X_h = \frac{r_0}{r} Y_r, \quad (36)$$

az infinitezimális növekmény pedig (34) alapján

$$dX_h = \frac{r_0}{r} d\tilde{Y}_r. \quad (37)$$

Megköveteljük, hogy a két leírás közötti leképezés megőrizze az objektumok lokális struktúráját, amely esetünkben a skálainvariancia:

$$dX_h \sim (dh)^\gamma \quad \text{és} \quad dY_r \sim (dr)^\gamma, \quad (38)$$

ahol $\gamma > 0$ az önaffin exponens. Diffúzív fluktuációkra $\gamma = 1/2$, ballisztikus mozgásra pedig $\gamma = 1$. Az $1/2$ alatti illetve feletti értékek szub- illetve szuperdiffúzív viselkedésnek felelnek meg, például $\gamma = 2/3$ írja le a Kardar-Parisi-Zhang (KPZ) univerzalitás osztályhoz tartozó felületek által generált doménfalakat [91, 93, E14].

Ez h és r között egy összefüggést ad:

$$\frac{dh}{dr} = \left(\frac{dX_h}{d\tilde{Y}_r} \right)^{1/\gamma} = \left(\frac{r_0}{r} \right)^{1/\gamma}. \quad (39)$$

(A (38). kifejezésekben fel nem tüntetett multiplikatív szorzófaktorok egyenlőek, és így (39)-ből kiesnek.) Integrálás után explicit kifejezést kapunk $h(r)$ -re:

$$h(r) = \begin{cases} r_0 \frac{\gamma}{1-\gamma} \left(1 - (r_0/r)^{\frac{1-\gamma}{\gamma}} \right), & \gamma \neq 1, \\ r_0 \ln(r/r_0), & \gamma = 1, \end{cases} \quad (40)$$

amely minden $r > r_0$ -ra igaz. Tehát egy konkrét trajektóriára, melynek kezdeti feltételét azonosítottuk ($Y_{r_0} = X_0$), a két leírás azonos eloszlást ad minden $r > r_0$ -ra: $\frac{r_0}{r} Y_r \stackrel{\text{dist.}}{=} X_{h(r)}$. Alapvető eredmény, hogy ez az állítás részecskerendszerek trajektóriáinak *összességére* is igaz:

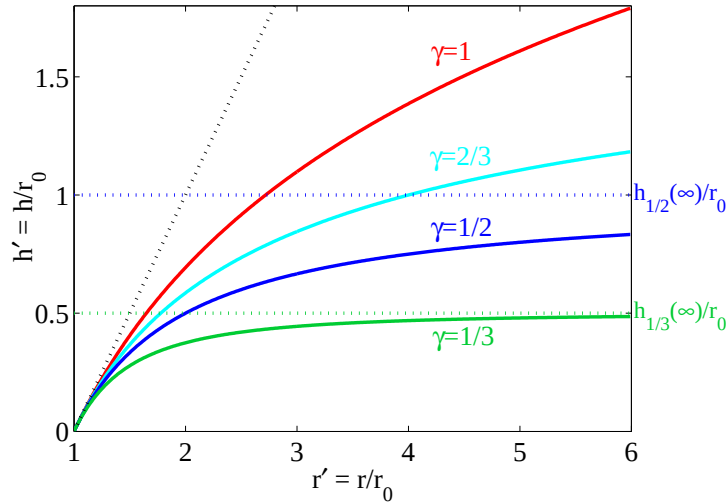
$$\left\{ \frac{r_0}{r} Y_r \right\} \stackrel{\text{dist.}}{=} \{ X_{h(r)} \} \quad \text{ahol } r \geq r_0, \quad (41)$$

amennyiben a részecskék csak lokálisan hatnak kölcsön. Ilyen kölcsönhatás az egymással egybeolvadó illetve az egymást annihiláló részecskék; később megmutatjuk, hogy ezt hogyan lehet tovább általánosítani. A 34. ábra ezt a megfeleltetést mutatja egymással egybeolvadó Brown mozgást végző részecskékre.

A leképezés tulajdonságait vizsgálva először azt állapítjuk meg, hogy vezető rendben, vagyis r_0 -hoz közeli r esetén $h(r) \approx r - r_0$, hiszen lokálisan a radiális és a fix szélességű modellek ekvivalensek. A két geometria közötti különbség $h(r)$ nemlineáris viselkedésében jelenik meg nagy r esetén, ami legmarkánsabban abban mutatkozik meg, hogy $0 < \gamma < 1$ esetén

$$h_\gamma(\infty) := \lim_{r \rightarrow \infty} h(r) = \frac{\gamma}{1 - \gamma} r_0 < \infty. \quad (42)$$

Ez a megfigyelés különösen érdekes egymással egybeolvadó vagy egymást annihiláló trajektoriák esetén, amelyeknél fix szélességű geometria esetén 0 vagy 1 ágból álló abszorbeáló végállapot van a $h \rightarrow \infty$ limeszben. Ilyen struktúrák gyakran előfordulnak populációk térbeli versengését leíró neutrális modellekben (a populációk azonos eséllyel indulnak) [91, 92], ahol az abszorbeáló végállapotban a kezdeti fajok közül egyetlen fennmaradása fixálódik. Standard gondolatmenet alapján a fixálódás bekövetkezéséig tartó idő $L^{1/\gamma} \sim r_0^{1/\gamma}$ szerint skálázódik, ami nagy rendszerekre sokkal nagyobb, mint $h(\infty) \sim r_0$. Így $\gamma < 1$ esetén nemcsak megerősítjük azt a korábbi, intuitív eredményt, hogy terjeszkedő populációk neutrális vetélkedése esetén nincs fixálódás, hanem expliciten megadjuk a fennmaradó fajok $\{X_{h(\infty)}\}$ térbeli eloszlását. Az X_h folyamatot sokkal könnyebb numerikusan kezelni, mint Y_r -et, tovább-



35. ábra: A $h(r)$ leképezés [(40). képlet] az r_0 egységekben [lásd (43). képlet], amely a radiális és a fix szélességű tartományban történő növekedés között teremt kapcsolatot. A két geometria lokálisan ekvivalens, így $h(r) \approx r - r_0$, ha $r \approx r_0$. A geometriák közötti különbség nagy r esetén nyilvánul meg, különös tekintettel arra, hogy $h(r)$ -nek véges $h_\gamma(\infty)$ határértéke van $\gamma < 1$ esetén [(42). képlet], míg h divergál ha $\gamma \geq 1$. Az aszimptotikus viselkedést pontozott vonal jelöli, kivéve a $\gamma = 2/3$ esetre, amikor a limesz az ábrán kívül található. [S10]

bá az előbbire gyakran elméleti eredmények is elérhetőek [E15]. Tőlünk függetlenül hasonló megközelítés alkalmaztak a közelmúltban a radiális Domany-Kinzel típusú modellekre a $\gamma = 1/2$ esetben [94].

A 35. ábrán a leképezést dimenziótlanított $r' = r/r_0$ és $h' = h/r_0$ változókon mutatjuk:

$$h'(r') = \begin{cases} \frac{\gamma}{1-\gamma} \left(1 - (1/r')^{\frac{1-\gamma}{\gamma}} \right), & \gamma \neq 1 \\ \log(r'), & \gamma = 1 \end{cases}, \quad (43)$$

ahol $r' \geq 1$. A $\gamma = 1$ esetben visszkapjuk azt a konform leképezést, amely a komplex egységkörön kívüli tartományt leképezi egy félvégtesen sávba, míg $\gamma \neq 1$ esetben a leképezés ezt általánosítja az önaffin rendszerekre. Érdekes megjegyezni, hogy általános γ -ra $h'(r') = -\log_q(r')$, ahol a q -logaritmus (a $q = 1/\gamma$ megfeleltetéssel) a nemextenzív statisztikus mechanikából ismert [95], amely így a konform leképezések általánosításaként is értelmezhető.

Érdekes meggondolni a befelé növekedő radiális struktúrák esetét, amikor $r \leq r_0$ (vagyis $r' < 1$), amely a fix szélességű tartományra negatív h -t, vagyis lefelé történő növekedést jelent. A

$$h'(1/r') = -(r')^{\frac{1-\gamma}{\gamma}} h'(r') \quad \gamma > 0 \quad (44)$$

reláció felhasználásával a kifelé történő növekedésre kapott eredményeket átfordíthatjuk a befelé növekedés esetére. Ekkor, a kifelé növekedéssel ellentétben, minden szub-ballisztikus ($\gamma < 1$) struktúra fixálódik, mivel $|h'(r')| \rightarrow \infty$ ahogy $r' \rightarrow 0$; a szuper-ballisztikus esetben viszont nem triviális aszimptotikus viselkedést kapunk. A befelé történő növekedésre kapott korábbi eredményeket [96] így egységes keretben értelmezhetjük [E15].

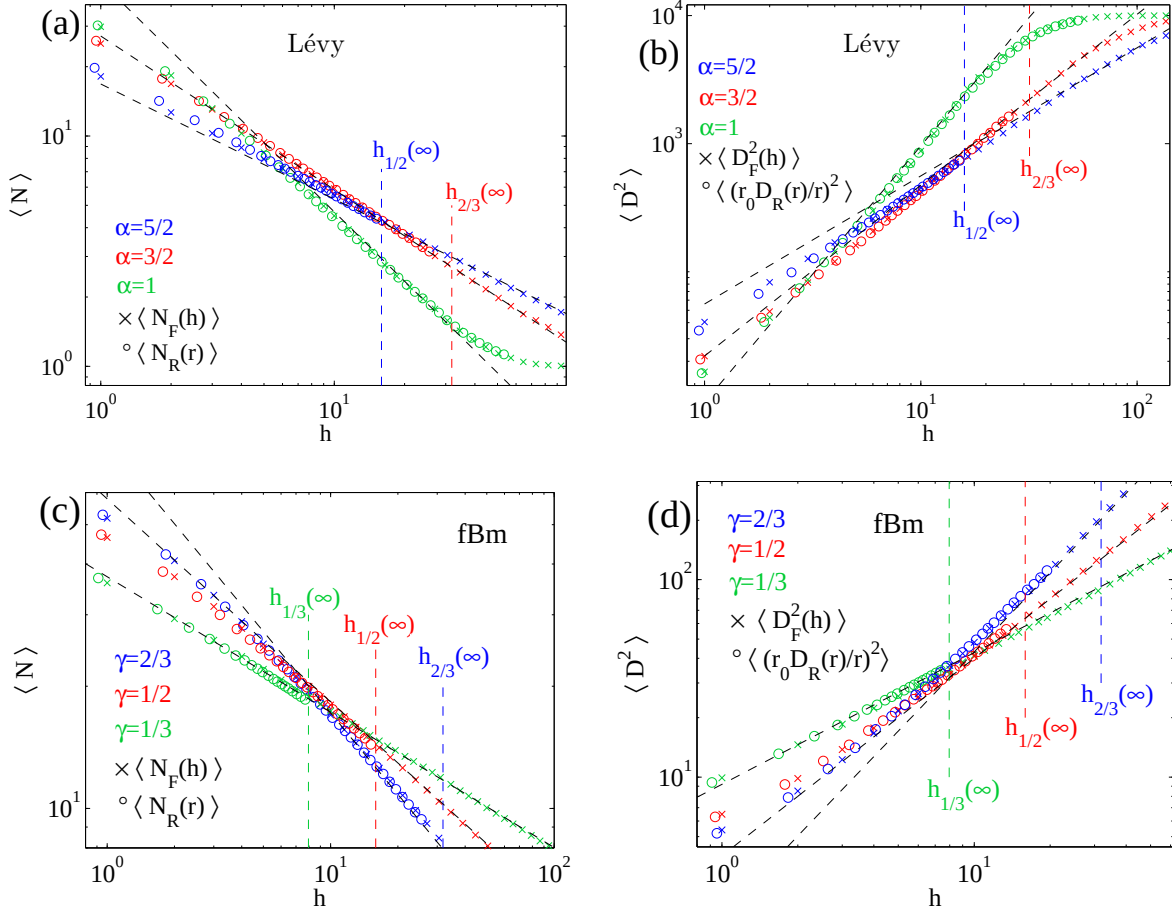
A leképezés egyedül a struktúrák lokális skálainvarianciájának megmaradásán alapul. Így megmutatható, hogy egzaktul érvényes olyan folyamatokra, amelyeket a lokális struktúra teljesen meghatároz, vagyis ahol a növekmények függetlenek, mint például a Brown mozgás, vagy az önhasználó Lévy folyamatok [97]. Másrészt vannak olyan önhasználó folyamatok, amelyek ugyanúgy lokálisan skála invariánsak, de időbeli korreláltságuk összetettebb, mint például a frakcionális Brown mozgás (fBm) [98]. A korrelációk befolyásolják a leképezést, amely általánosan nem alkalmazható ilyen folyamatokra. Frakcionális sztochasztikus számolás segítségével az fBm modell esetére le lehet vezetni a leképezést, amely egy összetettebb kifejezés, de numerikusan nagyon közel áll (40)-hoz. A társszerzőim által kiszámolt részletes levezetés az [E15] publikációban található.

A 36. ábrán numerikusan demonstráljuk a leképezést két folyamatra (mindkét esetben a trajektóriák dinamikája egymással összeolvadó): a Lévy mozgásra, amelyet független stacionárius növekmények definiálnak a következő eloszlással:

$$\mathbb{P}(X_{h+} - X_h = x) \sim C|x|^{-(1+\alpha)}, \quad \alpha > 0, \quad (45)$$

valamint az fBm modellre, amely olyan Gauss folyamat (vagyis X_h Gauss eloszlású, továbbá esetünkben $\langle X_h \rangle = 0$), amelynek kovarianciája

$$\langle X_{h+\Delta h} X_h \rangle \sim (h + \Delta h)^{2\gamma} + h^{2\gamma} - (\Delta h)^{2\gamma}. \quad (46)$$



36. ábra: A (40) leképezés numerikus demonstrálása a radiális geometria (minden ábrán $\circ$) és a fix szélességű geometria ($\times$) között. (a) Az életben maradó trajektóriák $\langle N \rangle$ száma és (b) ezek távolságának $\langle D^2 \rangle$ négyzetes összege a (45) Lévy mozgásra, ahol $\gamma = \max\{1/\alpha, 1/2\}$. (c),(d) Ugyanezen mennyiségek a (46) frakcionális Brown mozgásra. A vízszintes tengely h ill. $h(r)$, és jelöltük a $h(\infty)$ értéket. Az aszimptotikus skálázási törvények (fekete szaggatott vonalak) érvényüket veszítik, amikor $\langle N \rangle \approx 1$. A modell rendszerek 1+1 dimenziósak, kezdetben 100 trajektóriával, $L = 100$ és $r_0 = L/2\pi$. [S10]

A Lévy mozgás lokális skálainvariancia exponense $\gamma = \max\{1/\alpha, 1/2\}$. Ez a folyamat $\alpha < 2$ esetén szuperdiffúzív és a trajektória nem folytonos; $\alpha > 2$ esetén pedig diffúzívan skálázódik, az ugrások szórása véges. Az fBm folyamat lehet szub- illetve szuperdiffúzív γ értékétől függően, nem Markov folyamat, de ennek ellenére, amint korábban említettük, a (40) leképezés nagyon jó közelítéssel igaz rá. Az ábrán két mennyiséget mutatunk: az életben maradó trajektóriák $\langle N \rangle$ átlagos számát, valamint a szomszédos trajektóriák közötti távolság négyzetes összegét. Ez utóbbi a fix szélességű geometriában

$$D_F(h)^2 = \sum_{i=1}^{N(h)} \left(X_h^{(i+1)} - X_h^{(i)} \right)^2, \quad (47)$$

a radiális geometriában pedig $D_R(r)$ definíciója analóg. A fix szélességű illetve radiális geo-

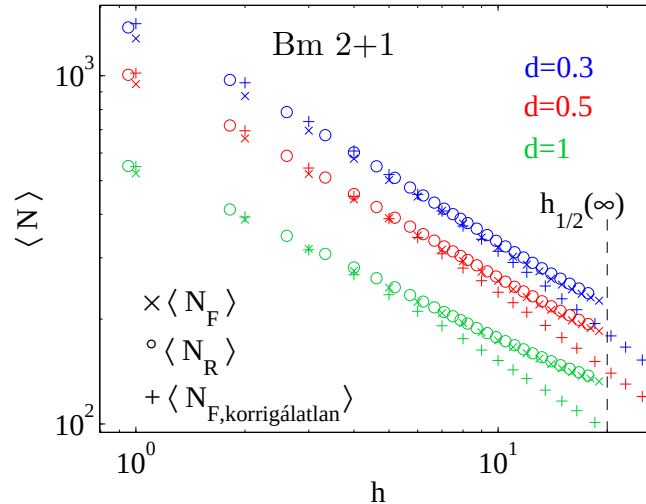
metriában h illetve $h(r)$ függvényében ábrázolva ezt a két mennyiséget, ahogy várjuk, nagyon jó egyezést kapunk az adatsorok között. A fix geometriában a hatványfüggvény skálázódást standard átlagtér-számolással lehet megkapni [99, 100].

Nemlokális kölcsönhatásra a legkézenfekvőbb eset, amikor részecskék nem pontszerűek, hanem véges méretük van. Az egyszerűség kedvéért gömbszerű, d átmérőjű részecskéket fogunk vizsgálni, amelyek már akkor összeolvadnak illetve annihilálódnak, amikor középpontjaik d távolságra érnek egymástól. Ha a részecske átmérő sokkal kisebb mint a rendszer makroszkopikus mérete ($d \ll r_0$), akkor az ebből adódó korrekciók kicsik lesznek. Ezt egzaktul figyelembe tudjuk venni, ha a radiális rendszer d_R átmérőjű részecskéit a fix szélességű geometriában csökkenő,

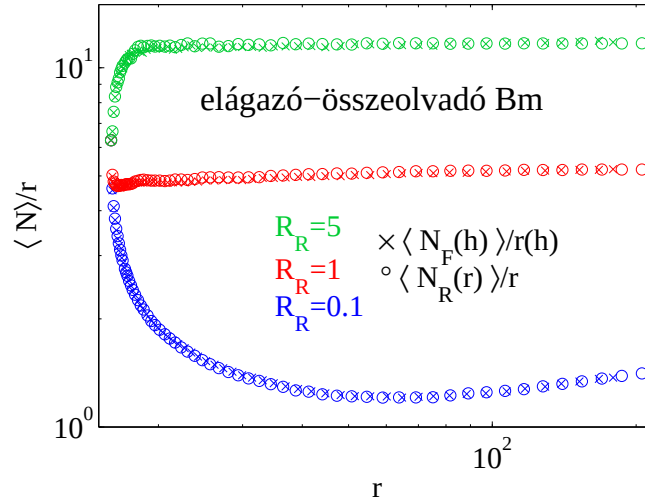
$$d_F = \frac{r_0}{r(h)} d_R \quad (48)$$

átmérőjű részecskéknél feleltetjük meg. A 37. ábrán (az $\langle N \rangle$ összeolvadó Brown mozgásra) két adatsort mutatunk: a korrigált részecskeméret esetét, valamint ha nem alkalmaznánk a korrekciót ($d_F = d_R$); még ez utóbbi is elfogadható egyezést mutat, amíg $d \ll r_0$. Az ebben a fejezetben bemutatott össze többi numerikus eredménnyel ellentétben a trajektóriák itt $2 + 1$ dimenziósak (két térbeli dimenzió plusz az idő), a részecskék nem táguló körvonalon hanem táguló gömbfelületen mozognak. A véges hatótávolságú kölcsönhatások különösen fontosak magasabb dimenzióban, ahol pontszerű részecskék találkozása szigorú értelemben nem következik be, csak tetszőlegesen kis távolságra megközelítik egymást. Ahogy hamarosan említjük, a leképezés nem függ a tér dimenziójától.

A leképezések által kezelt kölcsönhatások további kézenfekvő kiterjesztése az elágazó trajektóriák esete. Ez már nem kizárólagosan a geometrián alapuló kölcsönhatás, hanem a



37. ábra: Az életben maradó trajektóriák száma Brown mozgásra ($\gamma = 1/2$), ahol a részecskéknek a radiális esetben ($\circ$) véges d átmérőjük van. Fix szélességű geometriában a korrigált ($\times$), illetve korrigálatlan ($+$) részecske átmérő esetét is feltüntetjük, részletek a szövegben. A vízszintes tengely h ill. $h(r)$, és jelöltük a $h(\infty)$ értéket. A rendszer $2+1$ dimenziós, $r_0 = 20$, és három különböző d értékhez tartozó adatsort mutatunk. [S10]



38. ábra: A trajektóriák $\langle N \rangle / r$ radiális sűrűsége elágazó-összeolvadó Brown mozgásra rögzített R_R elágazási ráta mellett (50) radiális geometriában ($\circ$) illetve fix szélességű geometriában ($\times$). A vízszintes tengely r ill. $r(h)$. A modell rendszerek 1+1 dimenziósak, kezdetben 100 trajektóriával, $L = 100$ és $r_0 = L/2\pi$; három különböző R_R elágazási ráta értékhez tartozó adatsort ábrázoltunk. [S10]

karakterisztikus elágazási rátán keresztül egy időskálát is bevezet a modellbe. Ahhoz, hogy a leképezett folyamat statisztikailag megegyező legyen, azt kötjük ki, hogy az elágazási események $\Delta_F(dh)$ száma a fix szélességű geometriában dh alatt ugyanakkora legyen, mint az ennek megfelelő $\Delta_R(dr)$ a radiális geometriában. Ez ad egy összefüggést az elágazási ráták között:

$$\frac{R_R}{R_F} = \frac{\Delta_R(dr)/dr}{\Delta_F(dh)/dh} = \frac{dh}{dr} = \left(\frac{r_0}{r}\right)^{1/\gamma}. \quad (49)$$

Így ha radiális geometriában rögzített R_R elágazási ráta mellett meg akarjuk határozni a trajektóriák $N_R(r)/r$ sűrűségét, akkor a fix szélességű geometriában növekvő

$$R_F(h) = R_R \left(\frac{r(h)}{r_0}\right)^{1/\gamma} \quad (50)$$

elágazási rátát kell alkalmaznunk, amely divergál ahogy $r \rightarrow \infty$ illetve $h \rightarrow h(\infty)$. A 38. ábrán Brown mozgásra ($\gamma = 1/2$) mutatjuk a trajektóriák sűrűségét három különböző radiális elágazási rátára.

Eredményeinket közvetlenül általánosíthatjuk olyan táguló tartományra, amelynek homogén (tehát egy adott időben minden ponton azonos) metrika mellett tetszőleges $L(t)$ a mérete. A (40). kifejezés analógiája

$$h(t) = \int_0^t \left(\frac{L(0)}{L(s)}\right)^{1/\gamma} ds \quad (51)$$

lesz. Például lehet exponenciálisan táguló tartományokat vizsgálni, ami analóg olyan struktúrákkal, amelyeknek exponenciálisan csökkenő a diffuzivitásuk. Ez utóbbi esetet részletesen

vizsgálták egyetlen részecske véletlen bolyongására [85, 86, 87], ami releváns a szimulált hűtés (simulated annealing) alkalmazásakor [101].

További általánosítás, hogy $n + 1$ dimenzióban (ahol n a térbeli dimenziók száma) módszerünk közvetlenül alkalmazható, amennyiben a skálainvariancia az összes $i = 1, \dots, n$ térbeli dimenzióban érvényes:

$$dX_i \sim (dh)^\gamma \quad \text{és} \quad d\tilde{Y}_i \sim (dr)^\gamma. \quad (52)$$

Az anizotrópia (a fel nem tüntetett multiplikatív faktoroknak lehet i -függésük) nem okoz gondot, viszont a γ önaffin exponensnek minden térbeli dimenzióban azonosnak kell lennie. Ekkor (51) továbbra is változatlan alakban érvényes.

Ebben a fejezetben megmutattuk, hogy a lokálisan skálainvariáns struktúrák egy nagy osztályára a radiális (vagy általánosan növekvő geometriában történő) növekedést le lehet képezni fix szélességű tartományban történő növekedésre; ez utóbbi numerikusan és analitikusan is sokkal kezelhetőbb. Ezzel a megközelítéssel világos és átlátható módon vizsgálhatunk számos, időfüggő metrikával jellemezhető jelenséget, mint például az élettér kiterjeszkedésének következményeit versengő biológiai növekedési modellekben. Különösen érdekes alkalmazás a radiális növekedésben versengő doménfalak aszimptotikus statisztikájának leírása.

II. Szemcsés anyagok modellezése

Már a hétköznapi életben is sok olyan anyaggal találkozunk, amelyek különálló, makroszkopikus részecskékből állnak, mint például kristálycukor, só, vagy homok; ezeket az anyagokat összefoglaló néven *szemcsés anyagoknak* (granular matter) hívjuk. A szemcsés anyagok kezelése (nyersanyagok illetve végtermékek szállítása, keverése, tárolása, stb.) számos iparágban alapvető fontosságú, mint például élelmiszeripar, gyógyszeripar, bányászat, vagy építőipar. Sok természeti jelenség megértéséhez is elengedhetetlen a szemcsés anyagok ismerete, többek között homokdűnék vándorlása, vagy földcsuszamlások dinamikája (ez utóbbi szemcsés-folyadék keverékek stabilitására vezethető vissza).

Mivel a részecskék makroszkopikusak (kb. $1\ \mu\text{m}$ méret felett tekintjük szemcsés anyagnak), egyrészt nincs számottevő termális mozgásuk, másrészt a részecskék kölcsönhatása erősen disszipatív és tipikusan nem tartalmaz vonzást. Ezek miatt a szemcsés anyagok viselkedése erősen eltér a szokásos (szilárd, folyékony vagy gáznemű) anyagokétól [4], amelyeket elemi egységként atomokból vagy molekulákból felépítetteknek tekinthetünk. Így a körülményektől függően mutathatják szilárd anyagok tulajdonságait (gravitáció jelenléte mellett külső energiabevitel hiányában előbb-utóbb statikus, rendezetlen struktúra alakul ki), folyadékszerűek is lehetnek (például lassú deformáció következtében), de emlékeztethetnek gázokra is (intenzív mechanikai gerjesztés esetén a bináris ütközések dominálnak). A szemcsés anyagok reológiája meglehetősen komplex; habár a mérnöki irodalomban (geotechnika, talajmechanika) régóta találhatunk az alkalmazások szempontjából viszonylag jól használható modelleket, ezek egyrészt empirikusak, másrészt érvényességi körük szűk, és messze nem fedik le a szemcsés anyagok által produkált jelenségek széles spektrumát. Az utóbbi időben kezd teret nyerni az az elképzelés, hogy a szemcsés anyagokat csak nemlokális reológia tudja leírni [102]: a feszültségtenzor nemcsak a helyi deformációtól és egyéb anyagi tulajdonságoktól (például sűrűségtől) függ, hanem egy extra mezőre is szükség van a leíráshoz.

A magára hagyott szemcsés anyagban egy idő után minden mozgási energia disszipálódik, és a részecskék egy statikus struktúrába rendeződnek. Ilyen statikus rendszerekkel, valamint a rezgéseikkel és bennük az akusztikus hullámok terjedésével (ez utóbbiakra utal a kvázisztatikus kifejezés) foglalkozunk a következő fejezetekben.

10. BEVEZETÉS: STATIKUS ÉS KVÁZI-STATIKUS SZEMCSÉS ANYAGOK NUMERIKUS SZIMULÁCIÓJA

Az elméleti, kontinuum megközelítés nehézségei miatt a szemcsés anyagok leírásánál különösen előtérbe kerülnek a numerikus szimulációk, amelyekben a részecskéket egyenként követjük. A több lehetséges megközelítés közül² munkáimban azt választottam, amelyben

² Egy másik, viszonylag gyakran használt módszer a kontaktus dinamika (contact dynamics) [103, 104], amely a részecskéket rugalmatlannak tekinti, és az időfejlődés során az egyoldali kényszereket (a részecskék nem hatolnak egymásba) elégtí ki, közben kezelve a súrlódást is. A ritkább, szemcsés gáz tartományban használható az esemény-hajtott (event-driven) szimulációs módszer, ahol a szintén rugalmatlan, merev testként tekintett részecskék (esetleg részben inelasztikus) kétrészecske-ütközéseinek

a részecskéket viszonylag nagy keménységű, de rugalmas gömbök reprezentálják. Így a részecskék mozgását a klasszikus mechanika differenciálegyenleteinek megoldásával kapjuk, mint a molekuladinamikában [6]. Mivel a részecskék makroszkopikusak, forgási szabadságfokaik is vannak, és kölcsönhatásuk is jelentősen különbözik az atomokétól (pl. szigorúan véges hatótávolság, ugyanis nincs kölcsönhatás ha nem érnek össze; súrlódás, rugalmatlan ütközések disszipációja). Ezt a numerikus megközelítést az 1970-es évektől kezdve használják [107], és különösen a mérnöki irodalomban a *diszkrét elem módszer* (discrete element method, DEM) néven vált ismertté.

A szimulációkban a részecskék közötti kölcsönhatást többféleképpen is meg lehet választani. Bizonyos esetekben, mint például áramlások kvalitatív modellezésénél kevésbé lényeges az erőtvörvény konkrét alakja; a lényeg az, hogy egyrészt az átfedő részecskék taszítsák egymást, másrészt pedig a rendszerben fellépő disszipáció megfeleljen az elvárásoknak. Ennek a követelménynek nagyon egyszerű erőtvörvények is megfelelnek, mint például a féloldali Hooke-erőtvörvény: gömbök között az F_n normális erő lineárisan függ az n átfedéstől,

$$F_n = kn \quad \text{ha} \quad n > 0, \quad (53)$$

egyébként pedig $F_n = 0$; esetleg lineáris csillapítással kiegészítve. Az egyszerűség mellett a Hooke-erőtvörvény előnye, hogy kisebb a számításigénye, mint például az alábbi nemlineáris kifejezéseknek, valamint az időfejlődés numerikus követésekor nagyobb lépésköz is megengedhető.

A szemcsés anyag statikus és kvázi-statisztikus tulajdonságai viszont érzékenyek az erőtvörvény alakjára, így a következő fejezetekben az alábbi, fizikailag realisztikus képleteket fogjuk használni, amelyek részleteiben a kontakt mechanika tárgykörébe tartoznak [10]. Két ideális elasztikus gömb kölcsönhatását Heinrich Hertz vezette le: a róla elnevezett erőtvörvény centrális taszítóerő

$$F_n = \frac{4}{3} \sqrt{R_{12}} E_{12}^* n^{3/2} \quad \text{ha} \quad n > 0, \quad (54)$$

ahol R_{12} az 1 és 2 indexszel jelölt két gömb sugarából kifejezett effektív sugár, E_{12}^* az effektív Young modulus, n pedig a gömbök átfedése; ezeket lábjegyzetben részletezzük³. A súrlódási erő már nem ilyen egyszerű, ugyanis a két gömb közötti kontaktuson az erő tangenciális (súrlódásból származó) komponense függ a kontaktus előtörténetétől; ennek következménye, hogy a súrlódó kontaktus hiszterézist mutat. A Hertz kontaktusban a két gömb körlap alakú érintkezési felületén inhomogén a nyomás eloszlása, így tangenciális terhelés következtében gyűrű alakú felületrészek csúsznak meg, amelyek paraméterei függenek a tangenciális

egymásutánja adja az időfejlődést (pl. [105, 106]).

³ Legyen $\mathbf{r}_1$ az 1 jelű gömb középpontjának helyvektora, R_1 a sugara, E_1 az anyagának Young modulusa, ν_1 az anyagának Poisson-tényezője; jelöljük 2 indexszel ugyanígy a másik gömb paramétereit. Ekkor az effektív sugár $R_{12} = 1/[(R_1)^{-1} + (R_2)^{-1}]$, az effektív Young modulus $E_{12}^* = 1/[(E_1^*)^{-1} + (E_2^*)^{-1}]$, ahol $E_1^* = E_1/(1 - \nu_1^2)$ és $E_2^* = E_2/(1 - \nu_2^2)$. A gömbök átfedése pedig $n = R_1 + R_2 - |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$. Az (54) képlet akkor érvényes, ha a kontaktus lineáris kiterjedése sokkal kisebb a részecskék sugaránál, valamint a részecskék relatív sebessége elhanyagolható a részecskék anyagának tömbi hangsebességéhez képest. A képleteket könnyű kiterjeszteni gömb és sík fal kölcsönhatására: $R_{\text{fal}} = \infty$, és kemény falra pedig $E_{\text{fal}} = \infty$.

és normális terhelés előtörténetétől. A numerikus szimulációban csak ennek egyszerűsítése implementálható realisztikusan, például Mindlin megközelítése [10], amelyben a kontaktus teljes felülete egyszerre csúszik meg. Ez az F_t tangenciális erőre egy differenciális képletet eredményez:

$$\Delta F_t = 8G_{12}^* \sqrt{R_{12} n \Delta t}, \quad (55)$$

vagyis a tangenciális erő ΔF_t megváltozása (egy időlépés alatt) függ a t virtuális tangenciális elmozdulás Δt megváltozásától, amit a tömegközéppontok elmozdulásából és elfordulásából számolunk; G_{12}^* pedig egy kombinált elasztikus paraméter⁴. Az F_t tangenciális erő (55) inkrementációja kiegészül a Coulomb-feltétellel:

$$|F_t| \leq \mu F_n, \quad (56)$$

ahol μ a súrlódási (Coulomb) együttható. Érdekes megjegyezni, hogy a kontaktus normális és tangenciális differenciális keménysége (rugóállandó, stiffness), ami az egyensúly körüli kis oszcillációknál releváns, a jelentősen különböző képletek ellenére közel azonos: hánadosuk azonos anyagú részecskék esetén

$$\eta := \frac{dF_t/dt}{dF_n/dn} = \frac{8G^*}{2E^*} = 1 - \frac{\nu}{2 - \nu}. \quad (57)$$

Így például $\nu = 0$ esetén, amely értéket tipikusan használni fogunk, a két differenciális keménység megegyezik, vagyis sem a normális, sem a tangenciális komponens nem lesz domináns az oszcillációkban. (Megjegyezzük, hogy (57), ami a (55) közelítés következménye, a valódi kontaktusokra csak $|F_t| \ll \mu F_n$ esetén érvényes [108].)

Az (56) Coulomb feltétel disszipációt eredményez, ugyanis véges erőnél történik csúszás. Az ebből adódó disszipáció azonban csak a csúszási küszöb elérésekor következik be, vagyis például a rendszer infinitezimális oszcillációi mentesek a súrlódási disszipációtól. A fizikai rendszerben ilyenkor is van disszipáció, ugyanis az időben változó kontaktusok hullámokat generálnak a részecskék felületén és belsejében, amelyek a kristályhibákon szóródva idővel hővé alakulnak. Így amikor szükség mutatkozik, az (54)-(55)-(56) Hertz-Mindlin erőtvénnyel ellátjuk egy sebességfüggő disszipatív taggal is. Mivel összetett és többféle mechanizmusa is van a disszipációnak, egy jól értelmezhető, mesterségesen választott alakot használunk: a csillapítás minden időpillanatban egy előre meghatározott konstans-szorosa a lineáris csillapítás kritikus értékének, a normális és tangenciális irányban is. Így a csillapítás, mint ahogy a Hertz-Mindlin erő normális és tangenciális komponense is, nemlineárisan függ az n átfedéstől. Továbbá megköveteljük, hogy kontaktusokon ható erő normális komponense, ami már a csillapítási tagot is tartalmazza, sose legyen vonzó irányú.

Visszatérve a szemcsés anyagok fizikájára, a statikus, nyomás alatt álló szemcsés anyagban a részecskék mechanikai egyensúlyban vannak, így a közöttük ható erők egy szintén statikus hálózatot alakítanak. A tisztán geometriai jellegű kérdésfeltevés után (például térfogati kitöltés; ezekre ebben a disszertációban nem térünk ki) a legelső kézenfekvő kérdés az erőhálózat leírása. Már a legegyszerűbbek közé tartozó, egy pont-statisztikai mennyiségek, így a kontaktusokon átmenő erő normális illetve tangenciális komponensének eloszlása

⁴ $G_{12}^* = 1/[(G_1^*)^{-1} + (G_2^*)^{-1}]$, ahol $G_1^* = E_1/[2(1 + \nu_1)(2 - \nu_1)]$, és G_2^* ugyanígy van definiálva.

is mutat érdekes tulajdonságokat [109], és ennek térbeli változása, például falak közelében sem triviális [E5, E6]. A legérdekesebb kérdés mégis az erőhálózat globális térbeli struktúrájának jellemzése, ami a 11. fejezet témája.

A szemcsés anyagot alkotó részecskék makroszkopikusak, így a kölcsönhatásuk tipikusan szigorúan véges hatótávolságú: amíg nem érnek össze, addig nem hatnak kölcsön. Ez a részecske-részecske kölcsönhatásban megjelenő éles határ rendszerszinten is megjelenik: ha egy rögzített térfogatú dobozba egyre több szemcsés részecskét teszünk (vagy ekvivalensen: rögzített számú részecskét egyre kisebb térfogatra szorítunk össze), akkor a kezdetben disszipatív gázt alkotó, dominánsan kétrészecske-ütközéssel kölcsönható részecskék egy adott térkitöltés elérése után hirtelen összeállnak, és rendezetlen szilárd testet kezdenek alkotni. Ezt az átmenetet torlódási átmenetnek (jamming transition) hívjuk [110], és a szemcsés anyagokon kívül megjelenik teljesen más jellegű rendszerekben, mint például közlekedési modellekben, sőt potenciálisan kapcsolatba hozható az üvegesedési átmenettel is. Visszatérve az atermális szemcsés anyagokra, a torlódási átmenet közelében számos mennyiség skálázódást mutat [111, 112]. A torlódási átmenet így sok hasonlóságot mutat a folytonos fázisátalakulásokkal, de jelentős különbségek is vannak, például a skálázási exponensek közül több is függ a részecskék közötti erőtvörvény alakjától. A torlódási átmenettel részletesebben, különösen a sűrűlódás kontextusában, a 12. fejezetben foglalkozunk, ahol a statikus mennyiségek mellett a rendszer kis amplitúdójú rezgéseinek (amint látni foguk, anomális) spektrumát is vizsgáljuk.

A rezgések után természetes lépés a kis amplitúdójú akusztikus hullámok terjedésének leírása. A 13. fejezetben vizsgálni fogjuk a rendezetlen közeg hullámszórási pontjainak hatását, ami disszipáció nélkül is diszperzív hullámterjedéshez vezet, valamint kitérünk a hullámok terjedési sebességének nyomásfüggésére is.

11. SZEMCSÉS ANYAGOK ERŐHÁLÓZATAINAK UNIVERZALITÁSA

Ebben a fejezetben szemcsés anyagok statikus erőhálózatával foglalkozunk. Megmutatjuk, hogy a relatívan erős kontaktusokkal összekötött részecskefürtök skálázási tulajdonságokat mutatnak. A skálázási exponensek és skálázási függvény független számos paramétertől, ami egy univerzalitási osztályt definiál. Az itt bemutatott eredmények adják a T6 tézispontot, amely az [S11] publikációban bemutatott numerikus szimulációimon alapul.

Statikus szemcsés anyagokban már a legkisebb rendezetlenség is inhomogenitást okoz a kialakult erőhálózatban. Az erőhálózat legegyszerűbb, egy pont-leírását az egyes kontaktusokon fellépő erők eloszlása adja, ami tipikusan kis erőkre konstanshoz tart, az átlagos erő környékén enyhe csúcsot mutat, nagy erők pedig exponenciálisan cseng le [113, 114, 115], bár a lecsengés a preparációtól függően ettől eltérő is lehet [109]. Az erők eloszlása ugyan egy lényeges mennyiség, de ez nem mond semmit az erőhálózat térbeli struktúrájáról, amit vizuálisan a 39. ábrán mutatunk. Mivel egy részecskére ható nagy erőt tipikusan a másik oldalon egy másik nagy erő egyensúlyoz [109], a nagy erők általában szálas struktúrákba, erőláncokba szerveződnek, bár ezek nem teljesen esnek egy egyenesre. Az erőláncokat oldalról gyengébb erők stabilizálják, ami így egy elágazó hálózatot alkot. Az erőláncok vizs-

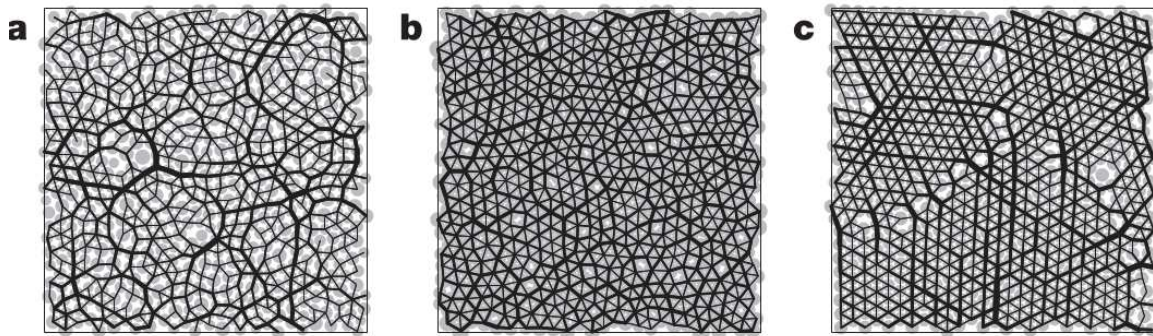
gálata (például hogy mutatnak-e valamiféle skálainvarianciát) nem triviális, többek között azért, mert nincs éles határ az erős és gyenge erők között.

A szemcsés anyagban az erőhálózatot reprezentálhatjuk kötésekkel (vonalakkal), amelyek összekötik egy-egy kontaktus részecskepárját. Minden kötéshez rendelünk egy skalár mennyiséget: a kontaktuson keresztül ható tasztító erő abszolút értékét (ezt mutatja vizuálisan a 39. ábra). Az erőláncok kvantitatív vizsgálatához vegyünk egy f küszöbértéket, és tekintsük csak azokat az erőláncokat, amelyeket f -nél erősebb (nagyobb abszolút értékű) kötések alkotnak. Ahelyett, hogy egy rögzített, tetszőlegesen kiválasztott f értéket használunk, az erőláncokat különböző skálákon vizsgáljuk az f változtatásával. Kis f értékekre a legtöbb részecske egyetlen nagy összefüggő aggregátum része lesz, amely f értékének növelésekor fokozatosan egyre kisebb fűrtökre esik szét (40. ábra). Az erőláncok nagysága jellemezhető a megfelelő fűrt méretével, vagyis az összefüggő kötések számával.

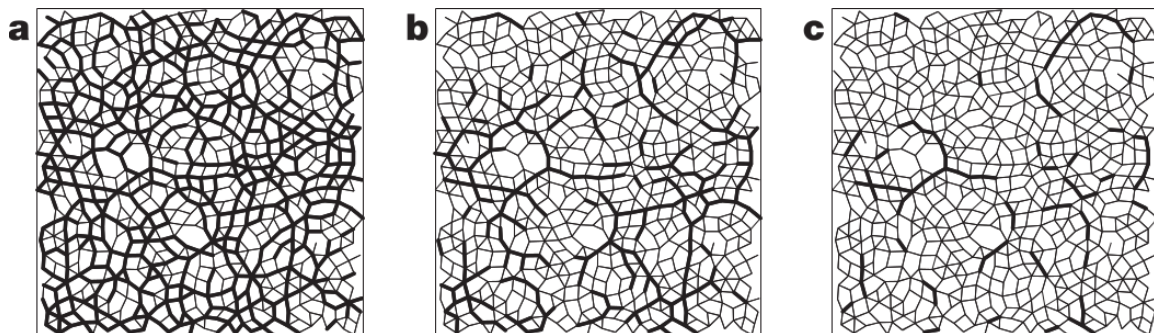
Mivel egy konkrét preparálási protokoll segítségével, ugyanazon paraméter értékek mellett készített szemcsés konfigurációk jelentősen különböznek lehetnek, statisztikai megközelítést kell alkalmaznunk. A fenti procedúrát elvégezve az erőláncokat kvantitatívan leírja a $P(s, f)$ mennyiség, amely azt mondja meg, hogy egy adott f küszöbérték mellett egy véletlenül kiválasztott részecske egy s méretű fűrthöz tartozik. Az egyensúlyi statisztikus mechanikában gyakori az ilyen jellegű fűrtméret statisztika alkalmazása [116], ahol f a hőmérséklet szerepét játssza. A perkolációhoz [11] hasonlóan fázisátalakulás következik be a kritikus f_c értéknél, ami felett nincs olyan fűrt, amely összekötné a rendszer két ellentétes oldalát. Ezen érték környezetében a rendszer skálainvariánsan viselkedik, például ilyen rendszerekben a fűrtök méretének eloszlása

$$P(s, f) \approx s^{-\tau} \rho \left(\frac{s}{(f - f_c)^\sigma} \right). \quad (58)$$

Ez a skálainvariancia univerzális: a τ és σ skálázási exponensek értékét, valamint a ρ skálafüggvényt csupán a rendszer globális tulajdonságai, mint a szimmetriák és a dimenzionalitás



39. ábra: Statikus szemcsés erőhálózatok különböző nyomás és polidiszperzitás értékekre. A részecskéket szürke korong jelöli, a kontaktusokon fellépő erőket vonal reprezentálja, amelynek vastagsága arányos az erő abszolút értékével. A paraméterek értéke: (a) a nyomás $p = 10^{-4}$, a polidiszperzitás $d = 20\%$, (b) $p = 10^{-1}$ és $d = 20\%$, végül (c) $p = 10^{-2}$ és $d = 5\%$. Mindhárom képen jól látható a térbeli struktúra, amely azonban az egyes esetekben vizuálisan jelentősen különböző. [S11]



40. ábra: Az erőhálózatok különböző skálákon. A 39(a) ábra erőhálózatát mutatjuk ismét, ezúttal úgy, hogy vastag vonallal rajzoljuk az f küszöbnél nagyobb erőket jelölő kötéseket. A küszöb értéke: (a) $f = 0.5f_c$, (b) $f = f_c$, és (c) $f = 1.5f_c$, ahol f_c a kritikus küszöbértéket jelöli. [S11]

határozza meg, a mikroszkopikus részletek nem számítanak. A kritikus jelenségeket ezek alapján kevés számú diszkrét univerzalitási osztályba lehet sorolni a skálázási exponensek értékei alapján.

Az egyensúlyi kritikus jelenségek analógiája⁵ azt sejteti, hogy a szemcsés rendszerünkben is skálainvariancia található f_c környezetében, amely érték alatt egyetlen fűrt átível az egész rendszeren. Az így kapott skálázási exponensek és skálafüggvények a szemcsés erőhálózatok térbeli struktúrájának új leírását adnák. Annak eldöntésére, hogy a szemcsés rendszer valóban skálainvariánsan viselkedik-e, és fellelhető-e valamiféle univerzalitás, a $P(s, f)$ eloszlás n -edik momentumát (m_n) vizsgáltuk az f küszöb és N rendszerméret (a kontaktusok száma) függvényében. A rendszerméret szerinti skálázást néztük, amely az egyensúlyi kritikus jelenségek esetében az

$$m_n(f, N) \approx N^{\phi_n} M_n \left([f - f_c] N^{1/2\nu} \right), \quad (59)$$

alakot ölti, ahol az M_n skálafüggvényt integráláson keresztül kapható a ρ függvényből, a skálázási exponensek pedig $\phi_n = (n + 1 - \tau)/(\tau - 1)$ és $\nu = (\tau - 1)/2\sigma$. Az alábbiakban az $n = 2$ esetet mutatjuk, mivel ez a legalacsonyabb divergens momentum, de magasabb momentumok is ugyanilyen módon viselkednek.

Az előző fejezetben említett molekuladinamika (más néven diszkrét elem módszer) segítségével preparáltam szemcsés konfigurációkat két dimenzióban. A méret szerint polidiszperz⁶ gömb alakú részecskék a legtöbb esetben a Hertz (illetve sűrűlódás jelenlétében Hertz-Mindlin) erőtvény szerint hatottak kölcsön. A statikus, adott izotrópikus nyomás alatt álló

⁵ A kritikus jelenségek, amelyeket először hőmérsékleti egyensúlyban lévő fázisátalakulások vizsgálatánál írtak le, más kontextusban is felbukkannak. Találkozhatunk velük hajtott, egyensúlytól távoli rendszerekben, ahol a viselkedést a dinamika határozza meg [12], sőt tisztán geometriai rendszerekben is [11], amelyek formailag legközelebb állnak az általunk vizsgált esethez.

⁶ A részecskék méret szerinti polidiszperzitására azért van szükség, mert különösen két dimenzióban az egyforma gömb alakú részecskék – még rendezetlen kezdőállapotból indulva is – nyomás alatt többé-kevésbé szabályos kristályrácsba rendeződnek, amint az a 39(c) ábrán látható kis polidiszperzitás mellett. Polidiszperzitás hatására növekszik a rendezetlenség, így két dimenzióban is előállíthatunk olyan

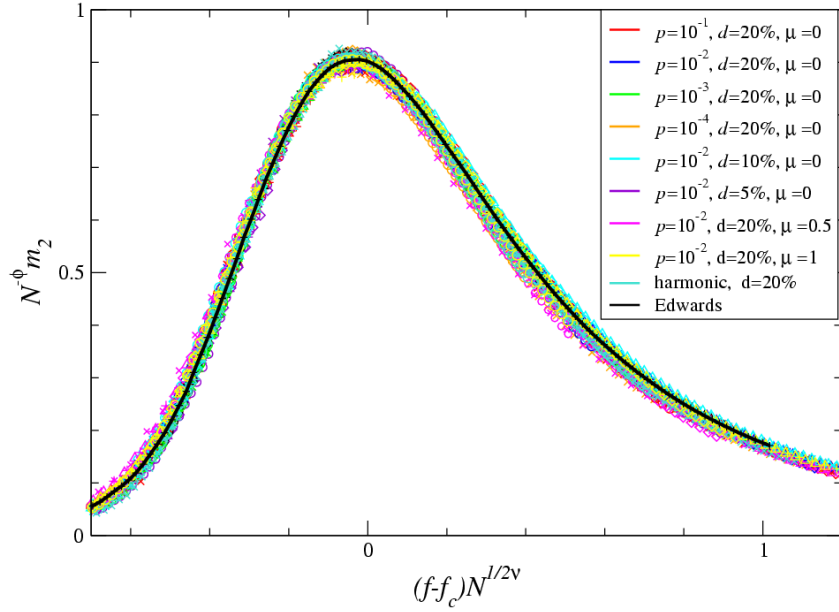
konfigurációkat gyenge extra disszipáció hozzáadásával állítottam elő úgy, hogy az időfejlődést addig követtem, amíg az egyes részecskékre ható eredő erő már elhanyagolható volt az átlagos kontakt erőkhöz képest. Először tekintettük az alacsony nyomás ($p = 10^{-4}$) és nagy polidiszperzitás (20%) értékkel készített sűrűdásmentes konfigurációk sokaságát, ahol az erőhálózat erősen rendezetlen (ezt mutatja a 39(a) és a 40. ábra). Különböző rendszerméreteket mellett nagy számú f küszöbértékre meghatároztuk az erőlánc fűrtöket, és kiszámoltuk $m_2(f, N)$ -et, ezek méretének második momentumát (ahol a legnagyobb fűrtöt mindig kihagytuk a statisztikából, hogy kis f -re is reguláris függvényt kapjunk). Amennyiben m_2 (59) szerint skálázódik, akkor az $N^{-\phi} m_2$ kifejezést $[f - f_c] N^{1/2\nu}$ függvényében ábrázolva a különböző N rendszermérethez tartozó görbék egymásra kell hogy essenek. A ϕ , ν és f_c megfelelő megválasztásával valóban jó egyezést kaptunk, ahol $\phi = 0.89 \pm 0.01$ és $\nu = 1.6 \pm 0.1$ volt, ami alátámasztja a skálainvarianciát.

A preparálási paraméterektől való függés vizsgálatára a fenti procedúrát megismételtük különböző nyomás értékekre, polidiszperzitás értékekre, sűrűdási együttható értékekre, és egy másik erőtvénnyre. Nyomás növelésekor az egy részecskére jutó kontaktusok száma nő, az erőhálózat egyre homogénebbnek látszik [39(b) ábra], az erők eloszlása egyre szűkebb lesz. A nyomást három nagyságrenden keresztül változtatva mindezek ellenére az $m_2(f, N)$ görbék legjobb egyezését ugyanúgy a $\phi = 0.89 \pm 0.01$ és $\nu = 1.6 \pm 0.1$ exponens értékek mellett kaptuk, a nyomás értékétől függetlenül. A polidiszperzitás csökkentése, különösen két dimenzióban, a geometriai rendezettséget növeli (a konfiguráció kezd kristályrácsot alkotni, 39(c) ábra), viszont a skálázási exponenseket ez sem változtatja meg. A sűrűdás jelenléte lecsökkenti a részecskék koordinációs számát (egy részecske kontaktusainak átlagos számát), de a skálázási exponenseket ez sem befolyásolta. Ebben az esetben az erők nem merőlegesek a részecskék felületére, de a tangenciális komponens tipikusan jóval kisebb f_c -nél, így azok nem változtatják meg a fűrtök méretének skálázását. Végül az erőtvénnyt változtatva a nemlineáris Hertz törvényről lineáris (féloldali harmonikus) erőtvénnyre, szintén ugyanazokat az exponenseket kaptuk.

Azt láttuk tehát, hogy a skálázási exponensek függetlenek a nyomástól, a polidiszperzitástól, a sűrűdási együtthatótól, valamint az erőtvénnytől, ami az univerzalitás nyilvánvaló jele. Viszont ahogyan várni lehetett, az f_c kritikus küszöb értéke nem univerzális, hanem az átlagos erők 1.3 és 1.6-szorosa között mozgott, a paraméterek függvényében. Továbbá a skálafüggvény szélessége és magassága is függött a paraméterektől: a nyomás növelésére a szélessége csökken, a polidiszperzitás növelésére pedig a magassága növekszik. A két tengely lineáris átskálázásával viszont az összes esetben ugyanazt a függvényt lehet kapni, vagyis az egyensúlyi folytonos fázisátalakulásokhoz hasonlóan a skálafüggvény *alakja* is univerzális. Ezt mutatjuk a 41. ábrán.

Miután van egy univerzalitási oszályunk, az egyensúlyi kritikus jelenségeknél gyakran alkalmazott stratégia szerint kereshetünk olyan egyszerű modelleket, amelyek az adott uni-

rendezetlen konfigurációkat, amennyire tipikusan rendezetlenek a háromdimenziós konfigurációk. Az ebben a disszertációban bemutatott munkáimban a részecskék sugara egyenletes eloszlású, a megadott polidiszperzitás érték az átlagtól való maximális eltérést jelenti. Az irodalomban gyakori még a bidiszperz méreteloszlás használata, amelyben fele-fele arányban használnak kis és nagy részecskéket, amelyek sugarának aránya 1 : 1.4.



41. ábra: Az univerzális skálafüggvény: a fűrtök méretének m_2 négyzetes átlagát (a legnagyobb kihasználásával) $BN^{-\phi}m_2$ szerint átskálázzuk, és ábrázoljuk az $A(f-f_c)N^{1/2\nu}$ átskálázott küszöbérték függvényében. Az ábra 50 adatsor egybeesését mutatja, 10 különböző paraméter érték esetén, és mindegyiknél 5 különböző N rendszerméretre. A színek a paraméter értékeket jelölik, a méretet pedig (kettes faktorokként növekedve) a $\circ, \diamond, \triangle, \times, +$ jelek mutatják. Az összes adatsorra az exponensek értéke $\phi = 0.89 \pm 0.01$ és $\nu = 1.6 \pm 0.1$ volt, míg A, B és f_c változott a paraméterek függvényében (de azon belül minden N rendszerméretre ugyanaz volt). A feketével az Edwards sokaságra kapott függvényeket mutatjuk, ugyanezen ϕ és ν mellett (részletek a szövegben). [S11]

verzalitási osztályba tartoznak, viszont elég egyszerűek ahhoz, hogy akár analitikusan is könnyebben hozzáférhetőek legyenek. A szemcsés anyagok körében erre egy megfelelő jelölt az Edwards által javasolt sokaság [117], amely az előtörténet figyelmen kívül hagyásával, a mikrokanonikus sokaság analógiájára azonos valószínűséget rendel minden mechanikailag stabil konfigurációhoz. Ezt a megközelítést sikeresen használták szemcsés anyagok lassú áramlására [118], de a statikus konfigurációkra eddig kevés kvantitatív eredmény állt rendelkezésre.

Az Edwards sokaság egy konkrét realizációja a „sznúker konfiguráció”-nak elnevezett elrendezés [119], amelyben monodiszperz súrlódásmentes merev gömbök háromszögrácsot alkotnak egy háromszög alakú tartományba zárva, és mindhárom oldalon azonos nagyságú nyomás hat rájuk. Ilyen rendszerben az erők egyensúlya nem határozza meg teljesen az egyes kontaktusokon fellépő erőket. Természetes tehát Edwards megközelítését használni, vagyis a részecskék közötti taszítóerők minden olyan elrendezését azonos valószínűségűnek tekinteni, amelyekben a részecskék mechanikai egyensúlyban vannak az adott kontaktus-geometria és globális határfeltételek mellett. Monte Carlo szimuláció segítségével generáltunk ilyen

erőhálózatokat sznűker konfigurációkon⁷, majd vizsgáltuk a fürtök méretének második momentumát a rendszerméret függvényében. Az adatsorok egyezése hibán belül ugyanazon skálázási exponensek mellett következett be, mint a molekuladinamika szimulációkkal készített rugalmas részecskék rendezetlen konfigurációira, és a skálafüggvény is ugyanannak adódott, amint azt a 41. ábrán mutatjuk.

Eddig azt láttuk, hogy minden szemcsés konfiguráció ugyanabba az univerzalitási osztályba tartozik. Vannak viszont olyan egyszerűsített szemcsés anyag modellek, amelyek skálázási exponensei ettől eltérnek. Például a széles körben tanulmányozott q -modell [120, 121, 122], amely az erők egyensúlyát csak a függőleges komponensre követeli meg, az skálázási exponensekre $\phi = 0.69 \pm 0.01$ és $\nu = 3.1 \pm 0.1$ értékeket ad. Ilyen értelemben meglehetősen figyelemreméltó az Edwards sokaság és a molekuladinamika által generált konfigurációk azonos viselkedése. Ez azt mutatja, hogy az exponensek és a skálafüggvény szempontjából a részecskék elasztikussága és az erőtvény nem számítanak. Továbbá a részecskék elhelyezkedésének geometriai rendezetlensége sincs hatással az univerzalitásra. Azt várjuk, hogy a rendszer globális szimmetriái (valamint dimenzionalitása) számít egyedül az univerzalitási osztály szempontjából: vagyis hogy a részecskéken vektori erőegyensúly áll fenn. Várakozás szerint három dimenzióban a skálázási exponensek és a skálafüggvény szintén univerzális lesz, de értékük eltér a két dimenzióban megfigyeltektől. Érdekes módon a globális nyomás szimmetriája kevésbé lényeges: nyírás alatt álló konfigurációk is ugyanabban az univerzalitási osztályban vannak, mint izotróp nyomás esetén, csak a makroszkopikus feszültségtenzor sajátvektorainak irányában különböző hosszúságskálák tapasztalhatóak [123].

Ebben a fejezetben figyelemreméltó hasonlóságot találtunk a statikus szemcsés erőhálózatok és az egyensúlyi kritikus jelenségek között. A megfigyelt skálainvariancia minden szempontból a kritikus jelenségek tulajdonságait mutatja, így a mechanikai egyensúlyban levő erőhálózatokra egy új univerzalitási osztályt definiál. Ez az univerzalitási osztály egyértelműen különbözik a perkolációétól, ahol formailag ugyanezt az analízist lehet elvégezni. Ez arra utal, hogy a kontakt erők között hosszútávú korreláció áll fenn, ami az erőláncok struktúráit jellemzi.

12. KRITIKUS VISELKEDÉS A TORLÓDÁSI ÁTMENET KÖZELÉBEN

Ebben a fejezetben sűrűlódó szemcsés anyagok kritikus viselkedését vizsgáljuk a torlódási átmenet környezetében. Megmutatjuk, többek között a rezgési spektrum anomális tulajdonságainak vizsgálatával, hogy a kritikus viselkedés nulla és végtelenül nagy sűrűlódási együtt-ható esetén figyelhető meg. Az itt bemutatott eredményeket a T7 tézispont foglalja össze, amely az [S12] publikációmban leírt numerikus szimulációimon alapul.

Az 59. oldalon már említett torlódási átmenet (ami végeredményben a részecskék éles határának következménye) elméleti és numerikus vizsgálata nagy figyelmet kapott a szemcsés anyagok (pontosabban a sűrűlódásmentes rugalmas gömbök) kontextusában [111, 112].

⁷ A Monte Carlo szimulációkat társszerzőim végezték.

Ezeknek a rendszereknek az az egyik legfontosabb előnye, hogy rajtuk keresztül könnyen hozzáférhető a torlódási átmenet tanulmányozása, amely akkor következik be, amikor a nyomással zérushoz tartunk (vagy a geometria irányából nézve a részecskék deformációja eltűnik). Ezen a ponton nagy rendszerekre a súrlódásmentes részecskék z koordinációs száma, vagyis egy részecske kontaktusainak átlagos száma, egyenlő (e fejezet jelölésével⁸) a z_{izo}^0 izosztatikus értékkel (az izosztatikuságra azonnal visszatérünk), a ϕ_{torl}^0 térkitöltés pedig a véletlen sűrű pakolás (random close packing) értéket veszi fel [111, 124]. Továbbá véges nyomás alatt, tehát az átmenetnél nagyobb térkitöltés esetén (továbbra is a súrlódásmentes esetben) a $\Delta z = z(p) - z_{\text{izo}}^0$ koordinációszám-többség és a $\Delta\phi = \phi - \phi_{\text{torl}}^0$ térkitöltés-többség hatványfüggvény kapcsolatban áll egymással, így a p , Δz és $\Delta\phi$ paraméterek közül bármelyik elegendő a torlódási átmenettől való távolság jellemzésére.

Azokat a tömegpontokból és azokat összekötő kötésekéből álló mechanikai rendszereket nevezzük *izosztatikusnak*, amelyek pontosan annyi kötést tartalmaznak, hogy a rendszer még éppen makroszkopikusan szilárd lehessen. Így ha olyan részecskerendszerekben, ahol a kötések hálózata izosztatikus, elvágunk kötéseket, olyan (gyakran kiterjedt) rezgési sajátmódusok keletkeznek, amelyek sajátfrekvenciája zérus (floppy modes) [125]. Ahogyan a szemcsés anyag izosztatikus állapotát a $p \rightarrow 0$ limeszben megközelítjük, a rezgési sajátállapotok állapotsűrűsége az alacsony frekvenciák tartományában erősen megnő: súrlódásmentes rugalmas gömbökre megmutatták, hogy az állapotsűrűség egy ω^* karakterisztikus frekvencia felett gyakorlatilag konstans, és csak alatta tapasztalható a kontinuum anyagokra várt ω^{d-1} frekvenciafüggés [111, 126], továbbá kis nyomásokra $\omega^* \sim \Delta z$ [127, 128]. Ez a karakterisztikus frekvencia a hangebesség segítségével hosszúság skálává konvertálható, amelynél kisebb skálákon az anyag viselkedése eltér a tipikus tömbi szilárd anyagokétól [129]. A súrlódásmentes szemcsés anyagok viselkedése a torlódási átmenet közelében így a kritikus fázisátalakulások több jegyét is viseli.

Ebben a fejezetben azt vizsgáljuk, hogy *súrlódó* szemcsés anyagok is mutatnak-e hasonló kritikus viselkedést a torlódási átmenet környezetében. A Coulomb súrlódási törvény szerint ha két részecskét F_n normális erő nyomja össze, akkor a kontaktus bármekkora olyan F_t tangenciális erőt fenn tud tartani, amelyre $F_t \leq \mu F_n$, ahol μ a súrlódási (vagy Coulomb) együttható. Tipikus szemcsés konfigurációkban gyakorlatilag elhanyagolható azon kontaktusok aránya, amelyekben a tangenciális (súrlódási) komponens az $F_t = \mu F_n$ Coulomb küszöb értéken lenne [130, 131] (bár az is igaz, hogy nagyon óvatosan preparált konfigurációkban ez az arány jelentős lehet [132]). A súrlódó szemcsés konfigurációk lényeges tulajdonsága, hogy a $p \rightarrow 0$ limeszben a térkitöltés értéke egy széles tartományban mozoghat, ugyanígy a $z_{\text{torl}}(\mu)$ koordinációs szám sem egyértelmű, tipikusan nagyobb, mint a $z_{\text{izo}}^\mu = d + 1$ izosztatikus érték [131, 133]. Kézenfekvő így a kérdés, hogy súrlódó rendszerek valóban kritikus viselkednek-e a $p \rightarrow 0$ limeszben (például ω^* zérushoz tart-e). Továbbá hasznos lenne többet tudni p , μ , ω^* , a $z(\mu, p) - z_{\text{torl}}(\mu)$ koordinációszám-többség, és a térkitöltés-többség közötti összefüggésekről.

Az alábbiakban látni fogjuk, hogy a súrlódó szemcsés anyagok torlódási átmenetére úgy

⁸ Ebben a fejezetben a 0 illetve μ felső indexszel jelöljük a súrlódásmentes illetve súrlódás jelenléte mellett definiált mennyiségeket. Az alsó index pedig a torlódási átmenetre (torl) vagy pedig az izosztatikus értékre (izo) utal.

érdemes gondolni, hogy az két tényezőből tevődik össze. Az első lépés a z koordinációs szám kiválasztódása rögzített μ és adott preparációs protokoll esetére; ezt eddig már sokan tanulmányozták [131, 133, 134, 135]. A második lépés, amivel most foglalkozni fogunk, az a kritikus jelenségek kapcsolata a koordinációs számmal; különös tekintettel arra, hogy az infinitezimális rezgések állapotsűrűségének ω^* kritikus frekvenciája, amint látni fogjuk, lineárisan függ az izosztatikus koordinációs számtól való

$$\Delta z := z(\mu, p) - z_{\text{izo}}^{\mu} \quad (60)$$

távolságtól. Nagyon lényeges, hogy súrlódás jelenlétében a koordinációs szám torlódási átmenetnél felvett z_{torl}^{μ} értéke általában különbözik a z_{izo}^{μ} izosztatikus értéktől. Így például kis μ értékek esetén a koordinációs szám a $p \rightarrow 0$ limeszben jóval az izosztatikus érték felett szaturálódik, ennek következtében ω^* is véges marad, és a rendszer nem kerül a kritikusság közelébe. A μ értékének növelésével viszont z_{torl}^{μ} az izosztatikus z_{izo}^{μ} értékhez tart, így nagy súrlódási együtthatók esetén ω^* egy egyre nagyobb távolságskálára mutat bizonyítékot a torlódási átmenet közelében. Az ω^* zérushoz tartása mögött az izosztatikus ponton megjelenő nulla sajátfrekvenciájú állapotok állnak. Az alábbiakban megmutatjuk, hogy a súrlódásmentes esethez hasonlóan ω^* , valamint a nyírási és kompressziós rugalmassági modulusok G/K hányadosa is Δz -vel skálázódik. Röviden úgy foglалhatjuk össze ezt, hogy az izosztatikus állapottól való távolság (amit Δz egyértelműen jellemez) határozza meg mind a súrlódó, mind a súrlódásmentes szemcsés konfigurációk skálázási tulajdonságait, tehát egy egységes képet kapunk a gyengén összenyomható részecskék torlódási átmenetéről.

A saját eredmények ismertetése előtt felidézzük, hogy mit lehet tudni a gömb alakú részecskék koordinációs számáról d dimenzióban a $p \rightarrow 0$ limeszben [124]. Mivel a $p = 0$ határesetben a részecskék nem deformálódnak, a gömbök középpontjában dN koordinátájára (ahol N a részecskék száma) a kontaktusok $zN/2$ kényszerrel adnak, ami akkor nem túlhatározott, ha $z \leq 2d$. Súrlódásmentes esetben a $zN/2$ számú normális irányú kontakt erő értékre a minden részecskére fennálló mechanikai egyensúly dN egyenletet eredményez, így megoldást akkor találunk, ha $z \geq 2d$. A két egyenlőtlenséget összetéve a $p \rightarrow 0$ limeszben $z \rightarrow 2d$ (ami ezek alapján az izosztatikus érték: $z_{\text{izo}}^0 = 2d$), tehát a torlódási átmenetben a súrlódásmentes gömbök izosztatikusak. Súrlódás esetén viszont $zN/2$ kontakt erő komponensre a mechanikai egyensúly dN erő- és $d(d-1)N/2$ forgatónyomaték egyenletet ad, vagyis $z \geq d+1$; tehát az izosztatikus érték itt $z_{\text{izo}}^{\mu} = d+1$. Ezért súrlódó gömbök a torlódási átmenetben nem feltétlenül izosztatikusak, hanem a koordinációs számuk a $z_{\text{izo}}^{\mu} = d+1$ és $2d$ között bármekkora értéket felvehet. Bár azt nem értjük teljesen, hogy súrlódó részecskék esetén mi választja ki a koordinációs számot a torlódási átmenetben, numerikus mérések szerint $z_{\text{torl}}(\mu)$ csökkenő függvénye μ -nek, ami (két dimenzióban) 4-et vesz fel kis μ értékekre, és 3-ig csökken nagy μ -kre [131, 133, 134]; ezt a 42. ábrán is látni fogjuk.

A numerikus mérésekhez kétdimenziós (2D), egyenként 1000 részecskéből álló konfigurációkat használtam. Az enyhén polidiszperz részecskék 3D Hertz-Mindlin erőtvény szerint hatottak kölcsön egymással egy négyzet alakú dobozban, periodikus határfeltételek mellett. A részecskék Young modulusát választottam a nyomás egységének ($E^* = 1$), a Poisson-tényezőt pedig nullára állítottam. A hosszúságegység az átlagos részecskeátmérő lesz, a tömeg egységét pedig az határozza meg, hogy a részecskék sűrűsége egységnyi; az

időegység pedig a részecskéken belüli, egységnyiinek vett hangsebességből adódik. A statikus szemcsés konfigurációk úgy készültek, hogy egy híg kiinduló rendszerben egy mester-séges, a sebességhez csatolt csillapítás mellett nagyon lassan növeltem a részecskék sugarát, amíg a kívánatos nyomás be nem állt. Minden (μ, p) paraméter-pár értékre 20 konfigurációból álló sokaságot készítettem; néhány esetben ezt 100-ra növelve nem javult jelentősen a mért mennyiségek pontossága.

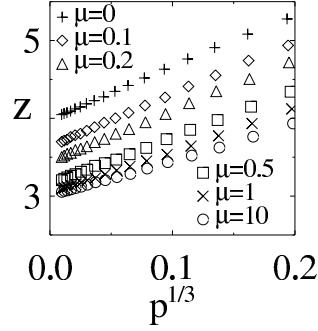
Miután egy szemcsés konfiguráció elkészült, a csillapítás kikapcsolása után a a dinamikai mátrixot a mozgásegyenletek mechanikai egyensúly körüli linearizációival kapjuk a részecskék translációs és rotációs szabadságfokait is figyelembe véve, mely segítségével a kis amplitúdójú mozgást írhatjuk le. (Ezt részletesebben a következő fejezetben fejtjük ki.) Lényeges észrevétel a súrlódás szerepével kapcsolatban, hogy amennyiben azon kontaktusok aránya elhanyagolható, amelyekben $F_t = \mu F_n$ egzaktul teljesül, akkor az $F_t \leq \mu F_n$ Coulomb kritérium csak a preparációs szakaszban játszik szerepet. Ezen a ponton feltesszük, hogy ez igaz, és a fejezet végén röviden visszatérünk erre a részletre. A feltevés szerint az infinitezimálisan kicsi rezgések során a Coulomb kritérium automatikusan teljesül, és a további analízis során μ nem kap semmi szerepet. Továbbá az F_t súrlódási erő ilyen változásai nem disszipatívak, tehát a dinamikai mátrix sajátmódusai csillapítatlanok. Így a μ súrlódási együttható fő szerepe a koordinációs szám beállítása lesz.

Ezen a ponton készen állunk a rezgési (vibrációs és rotációs) állapotok sűrűségének kiszámolására. Mivel a Hertz kontaktusok esetén az effektív rugóállandók az n átfedéstől $dF_n/dn \sim n^{1/2} \sim p^{1/3}$ szerint függenek, minden sajátfrekvenciának lesz egy triviális $p^{1/6}$ függése. Abból a célból, hogy eredményeinket könnyen összevethessük az (53) (súrlódásmentes) féloldali Hooke-erőtörvény esetén kapott eredményekkel [111, 127, 130], a továbbiakban a frekvenciákból ezt a triviális p -függést kiskálázzuk:

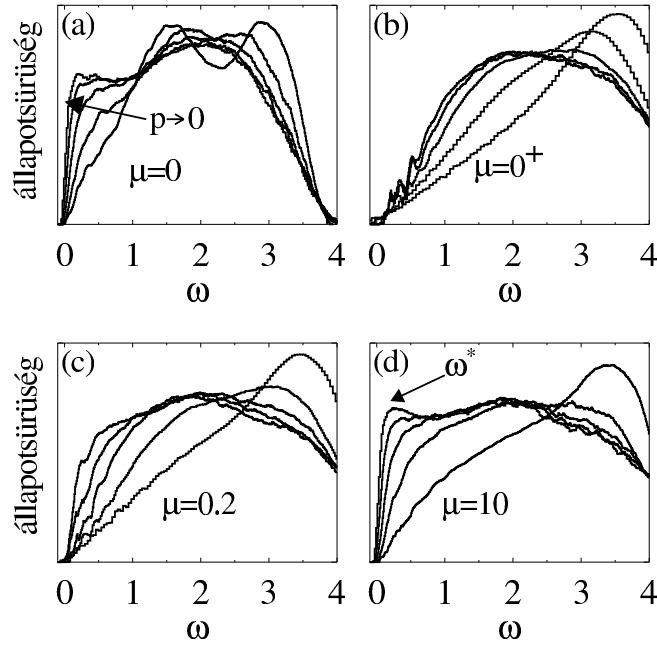
$$\omega := \omega_{\text{eredeti}}/p^{1/6}. \quad (61)$$

Előrevetítve a koordinációs szám kulcsszerepét, először a $z(\mu, p)$ mennyiséget vizsgáljuk. A 42. ábra megerősíti a korábbi eredményeket [131, 133, 134], amelyek szerint $z_{\text{torl}}(\mu) := z(\mu, p \rightarrow 0)$ értéke 4-ről 3-ra csökken ahogy μ -t növeljük. Továbbá látjuk, hogy a $z(\mu, p) - z_{\text{torl}}(\mu)$ koordinációs szám többlet $p^{1/3}$ szerint függ a nyomástól az összes vizsgált μ értékre.

A 43. ábrán a rezgési állapotok sűrűségét mutatjuk különböző μ értékekre. Súrlódásmentes esetben [43(a) ábra] a korábbi megfigyelésekkel [111, 127, 130] összhangban azt tapasztaljuk, hogy a nyomás csökkentése (tehát a torlódási átmenethez való közelítés) során az állapotsűrűségben egy plató fejlődik ki a kis frekvenciák irányába. Ebben az esetben $z \rightarrow z_{\text{izo}}^0$, a plató kis frekvenciájú végét jelző ω^* pedig $\Delta z = z - z_{\text{izo}}^0$ szerint skálázódik [127, 128, 129]. Viszont amint az a 43(b-c) ábrák mutatják, a tangenciális súrlódási erők bekapcsolásával az állapotsűrűség alacsony frekvenciákon tapasztalt növekedése nagyrészt eltűnik, ugyanis a súrlódásmentes zérus sajátfrekvenciájú módusok megsemmisülnek. Ezt az állítást legjobban a 43(b) ábra illusztrálja: itt a konfigurációk súrlódásmentesen készültek, a súrlódást csak az állapotsűrűség kiszámításakor kapcsoltam be. Ez az elhanyagolhatóan kicsi, de nem nulla súrlódásnak felel meg, amire az állapotsűrűség messze nem kritikus. A súrlódási együttható



42. ábra: A z átlagos koordinációs szám nyomásfüggése hat különböző μ értékre. Minden esetben azt látjuk, hogy $z(\mu, p) - z_{\text{torl}}(\mu) \sim p^{1/3}$. [S12]

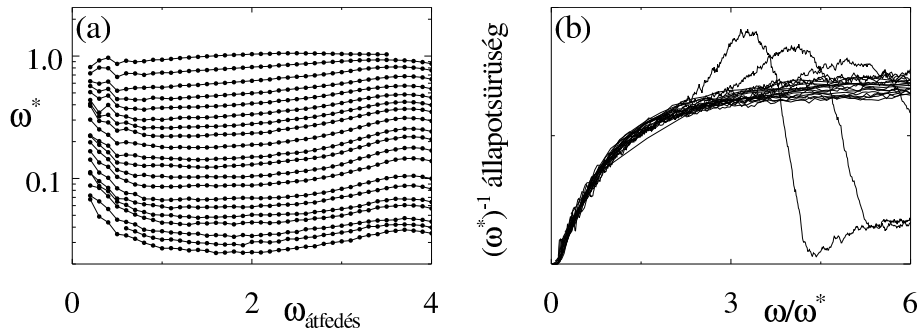


43. ábra: A rezgési állapotok sűrűsége a (61) átskálázott frekvencia függvényében. A négy panel különböző súrlódási együtthatók esetét ábrázolja, mindegyik esetben a p nyomás megközelítőleg a következő értékeket veszi fel: 5×10^{-6} , 5×10^{-5} , 5×10^{-4} , 4×10^{-3} , és 3×10^{-2} . Csökkenő p esetére az állapotsűrűség egyre meredekebben emelkedő függvénye az ω frekvenciáknak kis ω -ra. A merdek emelkedést és az azt követő platót elválasztó ω^* frekvencia [amit a (d) ábrán jelöltünk] csökken ahogy p -vel nullához tartunk. A $\mu = 0^+$ konfiguráció úgy készült, hogy a preparációs fázisban teljesen kikapcsoltam a súrlódást, majd az állapotsűrűség kiszámolásánál (ahol, ahogy a szövegben jeleztük, μ konkrét értéke már nem játszik szerepet), visszacsatoltam a súrlódást, így a forgási szabadságfokokat is. [S12]

növelésével a plató szélesedni kezd, jelezve hogy a rendszer a kritikusság felé tart [43(d) ábra].

A fenti képet kvantitatívvá tudjuk tenni, ha elvégezzünk egy skálázási analízist az állapotsűrűség alacsony frekvenciájú tartományára. A hisztogramok dobozméreteiből adódó

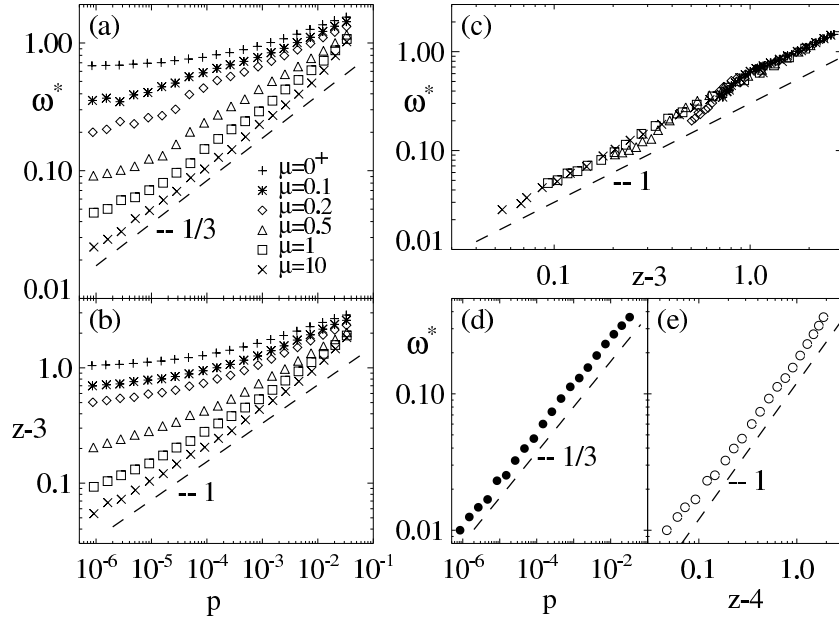
problémák elkerülésére az integrált állapotossűrűséget használjuk, $I(\omega) = \int_0^\omega D_S(\omega') d\omega'$, ahol $D_S(\omega)$ az állapotossűrűség. Az ω^* kritikus frekvenciát úgy állapítjuk meg, hogy megköveteljük, hogy az $(\omega^*)^{-1}I(\omega/\omega^*)$ átskálázott integrált állapotossűrűségek egybeessenek (független legyen p -től). Az egybeesés természetesen sohasem tökéletes, hiszen ahogyan a 43. ábrán látható, az állapotossűrűség függvények alakja nem azonos. Ezért az $\omega_{\text{átfedés}} := \omega/\omega^*$ paramétert változtatva kiválaszthatjuk, hogy hol keressük a függvények átfedését. A 44(a) ábra az így kapott ω^* értékeket mutatja $\omega_{\text{átfedés}}$ függvényében. Az átmeneti tartományra ($1 < \omega_{\text{átfedés}} < 3$) korlátozva meghatározzuk ω^* tipikus értékét, valamint ennek hibáját. Amint azt a 44(b) ábra mutatja, az így kapott ω^* -gal átskálázott állapotossűrűség görbék meggyőző módon egybeesnek az átmeneti tartományban.



44. ábra: Az ω^* kritikus frekvencia meghatározása. (a) ω^* az $\omega_{\text{átfedés}}$ függvényében $\mu = 10$ esetre. Az $1 < \omega_{\text{átfedés}} < 3$ tartományban (ami az állapotossűrűség átmeneti tartománya a meredeken emelkedő szakasz és a plató között) ω^* gyengén függ $\omega_{\text{átfedés}}$ -től, ezen szakasz átlaga adja ω^* későbbiekben használt értékét. (b) Az átskálázott állapotossűrűség görbék egybeesése $\mu = 10$ esetre. 20 görbét mutatunk, ahol p értéke 9×10^{-7} és 3×10^{-2} között változik. [S12]

Ezen fejezet első lényeges eredményét a 45. ábra mutatja: az ω^* kritikus frekvencia nem skálázódik egyszerű módon a p nyomás függvényében [45(a) ábra], viszont egy görbére esik minden μ és p értékre, ha a $\Delta z := z - z_{\text{izo}}^\mu$ függvényében ábrázoljuk [45(c) ábra]. Továbbá $\omega^* \sim \Delta z$; amit közvetlenül láthatunk a 45(c) ábrán, de erre utal a 45(a) és (b) ábra összevetése is. Ez azt jelenti, hogy $\Delta z \ll 1$ esetén a szemcsés konfigurációknak nagyon sok alacsony energiájú rezgési sajátmódusa van, ami nagyban megemeli az állapotossűrűséget (létrehozza annak platóját). A domináns mennyiség, amely meghatározza sűrűlódó szemcsés anyagok viselkedését, a $z = z_{\text{izo}}^\mu = d + 1$ sűrűlódási „kritikus pont”-tól való távolság. Ez a távolság legkézenfekvőbben a Δz mennyiséggel jellemezhető; ilyen alapon nézve ω^* skálázása megegyezik a sűrűlódásmentes esettel [45(d) és (e) ábrák].

A következőkben a *rugalmassági modulusok* viselkedését vizsgáljuk. Izosztikus rendszerben a koordinációs szám eléri azt a minimumot, ami mellett még stabil marad a rendszer; a kontaktusok további csökkenése nulla energiájú deformációs módusok megjelenését okozza [125]. Sűrűlódásmentes szemcsés anyagokra kis Δz esetén az alacsony energiás rezgési állapotok számának jelentős növekedése (a plató megjelenése az állapotossűrűségben) szoros összefüggésbe hozható ezen nulla energiájú deformációs módusokkal [128, 129, E7]. Sűrűlód-

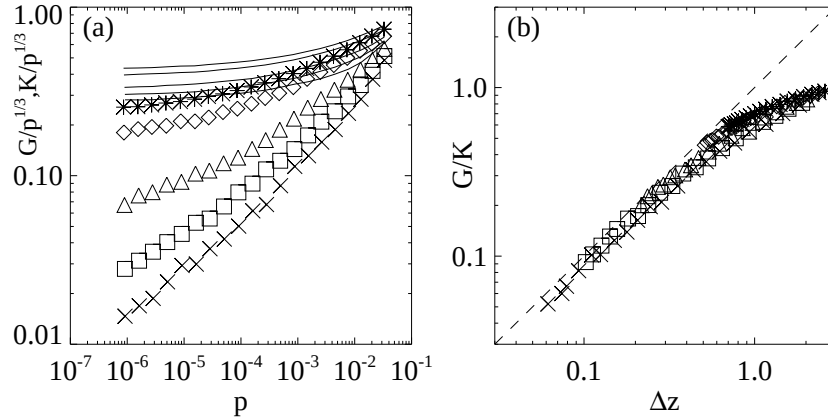


45. ábra: (a) ω^* függése a nyomástól különböző μ értékekre. A hiba nagysága azonos vagy kisebb a szimbólumok méreténél. (b) Az izosztatikusságtól mért távolság ugyanezen paraméterértékekre. (c) ω^* lineárisan függ az izosztatikusságtól mért távolságtól sűrűlódó szemcsés anyagokra. Különböző sűrűlódási együtthatókra a görbék egybeesnek. (d) és (e) Sűrűlódásmentes esetben ω^* skálázódik p és $z - 2d$ függvényében is. A szaggatott vonalak hatványfüggvényt jelölnek a feltüntetett exponenssel. [S12]

dásmentes esetben ezek azt is okozzák, hogy a G nyírási modulus sokkal kisebb lesz, mint a K térfogati rugalmassági modulus; valójában $G/K \sim \Delta z$ [111, 136, E7, E20].

A fejezet második fő eredménye az, hogy a numerikus szimulációk alapján azt találtuk, hogy sűrűlódó rendszerekben a deformációs modulusok G/K hányadosa csak Δz -tól függ (és nem függ például μ -tól), valamint kis Δz esetén Δz -vel skálázódik. A deformációs modulusok kiszámolásához a dinamikai mátrikból indultunk ki: kiszámoltuk a globális feszültségtenzort lineáris rendben a megfelelő deformációra adott válaszként, majd ebből kaptuk a térfogati és nyírási modulusot [E7]. A Hertz erőtvénnyből adódóan ezek egy triviális $p^{1/3}$ nyomásfüggést is tartalmaznak; ezt érdemes kiskálázni a modulusok viselkedésének vizsgálatakor. Az eredményeket a 46. ábrán mutatjuk. Amint az várható volt, a ($p^{1/3}$ -nal átskálázott) térfogati modulus gyakorlatilag konstans. Viszont a G nyírási modulus sokkal kisebb K -nál, ha p kicsi és μ nagy. Ha a G/K hányadost a Δz függvényében vizsgáljuk, (kis Δz -re) Δz szerint skálázódik, amint azt a [136] referenciában jósolták. Vagyis deformálható gömbökre ω^* és G/K is Δz -vel skálázódik, függetlenül attól, hogy van-e sűrűlódás vagy nincs.

Az állapotsűrűség hirtelen változása a μ zérus fölé emelésekor arra utal, hogy a $\mu \rightarrow 0$ limesz szinguláris. Egyrészt a dinamikai mátrix jelentősen változik ebben a határesetben, ugyanis a gömbök forgási szabadságfokai, amelyek irrelevánsak $\mu = 0$ -ra, egyből bekapcsolódnak amint $\mu \neq 0$. Másrészt az tapasztalható, hogy minél lassabban közelítjük a konfigurációkat az egyensúlyhoz a preparációs szakaszban, annál nagyobb lesz a teljesen mobili-



46. ábra: A K térfogati rugalmassági modulus és a G nyírási modulus függése p -től és μ -tól. Amint azt az ω^* ábrázolásánál is tettük, a triviális $p^{1/3}$ függéssel leosztottunk. (a) Az átskálázott K térfogati modulus (folytonos görbék) konstanshoz tartanak kis p -re, míg a nyírási modulusok (jelmagyarázat azonos a 45. ábráéval) erősen függ p -től és μ -tól is. (b) A G/K hányados az izosztatikus koordinációs szám feletti Δz koordinációs szám-többlettel skálázódik kis Δz -re. [S12]

zált súrlódó kontaktusok aránya (tehát ahol $F_t = \mu F_n$), és különösen kis μ esetén ez egészen jelentős lehet [132]. Várhatóan ezek a kontaktusok megcsúsznak már infinitesimális amplitúdójú rezgés esetén is, ami kezdetben egy erősen nemlineáris választ jelent; ezután már nem lesz teljesen mobilizált kontaktus, így a számolásunk érvényes marad. Az is igaz, hogy a statikus és dinamikai súrlódási együttható legkisebb különbsége is elnyomja a teljesen mobilizált kontaktusok hatását. Továbbá nagyobb súrlódási együttható esetén (hozzávetőlegesen ha $\mu \gtrsim 0.7$) a teljesen mobilizált kontaktusok száma amúgy is nagyon kicsi. Hozzá kell tenni azonban, hogy az éppen megcsúszó kontaktusokkal kapcsolatban nagyon körültekintően lehet csak állításokat megfogalmazni, ugyanis például a numerikus gyakorlatban közel kizárólagosan használt Hertz-Mindlin erőtvény (én is ezt használtam az itt bemutatott munkában, és [132] is ezt használta) ezen a ponton jelentősen eltér súrlódó kontaktusok tényleges viselkedésétől.

Utolsó megjegyzésünk az alacsony frekvenciás módusok természetéről szól. A G/K skálázódásáról szóló eredményünk arra enged következtetni, hogy a súrlódó gömbökből álló rendszereket a nyírás jellegű (térfogat-megőrző) deformációk dominálják, csakúgy mint a súrlódásmentes rendszereket. Úgy tűnik, a részecskék forgása és elmozdulása úgy csatlakozik, hogy lehetővé tegye nagy skálájú közel nulla frekvenciájú sajátmódusok létrejöttét izosztatikus súrlódó rendszerekben. Numerikusan vizsgálva, az alacsony frekvenciájú sajátmódusok valóban nagy fokú hasonlóságot mutatnak a súrlódásmentes és a súrlódó rendszerekben (ha ezeket levetítjük a transzlációs szabadságfokok terére). Az továbbra is nyitott kérdés, hogy eredményeink hogyan áltanósíthatóak nem gömbszerű részecskék esetére, ahol a rotációs szabadságfokok (esetleg csak részben, a részecskék szimmetriájának függvényében) már súrlódásmentes esetben is megjelennek.

Összefoglalásként megállapíthatjuk, hogy numerikus szimulációim szerint súrlódó göm-

bökből álló szemcsés anyagok részben a súrlódásmentes esettel azonosan viselkednek: a konfigurációk kritikussá válnak és skálázási tulajdonságok jelennek meg, amikor a koordinációs szám megközelíti az izosztatikus értéket. Viszont van egy fontos különbség a súrlódásmentes esethez képest: amíg súrlódásmentes esetben az izosztatikus állapot automatikusan bekövetkezik a kemény részecske – alacsony nyomás limeszben, súrlódás jelenlétében ez nem garantált: p és z nincs egyértelmű függvény-kapcsolatban egymással, és csak nagy súrlódási együttható esetén közelíti meg z az izosztatikus értéket kis nyomásoknál. A gyakorlatban az izosztatikus pont lényeges szerepet játszik, ugyanis a legtöbb anyag súrlódási együtthatója az 1 nagyságrendjébe esik, és amint a 45. és 46. ábrán látszik, ekkor a skálázás már jelentős tartományra érvényes.

13. RUGALMAS HULLÁMOK TERJEDÉSE

Ebben a fejezetben akusztikus hullámok terjedését vizsgáljuk szemcsés anyagokban. Megmutatjuk, hogy egy impulzus gerjesztés hatására kialakuló hullámfrontja nem érzékeny a konfigurációk részecske-szintű részleteire. A rendezetlen rendszer hullámfrontjainak tulajdonságait összehasonlítjuk azonos gömbökből álló láncban terjedő hullámokéval, valamint kísérleti eredményekkel. Az ebben a fejezetben bemutatott eredmények adják a T8 tézispontot, amely az [S13] publikációmban leírt numerikus eredményeimen alapul; az [E19] konferenciakiadvány is erről a témáról szól.

A szemcsés anyagok tulajdonságait alapvetően befolyásolják a fluktuációk, ennek egy markáns megjelenése a kvázisztatikus szemcsés konfigurációkban a részecskék közötti kontakt erőik inhomogenitása. A 11. fejezetben már említett erőláncok is ennek megnyilvánulásai, amelyek két dimenzióban kísérletileg fotoelasztikus korongok segítségével jól láthatóak [137], mégsincs kialakult pontos definíciójuk. Itt megjegyezzük, hogy az erőhálózatok skálainvarianciájának ismeretében nem is várható, hogy ezeknek lenne valamilyen karakterisztikus mérete, és ezen fejezet eredményei is ebbe az irányba mutatnak. Fontos kérdés, hogy a fluktuációk miatt tekinthető-e a szemcsés anyag nagy skálán jól viselkedő kontinuumnak [138].

Ez a problémakör jól megközelíthető az akusztikus hullámok terjedésének vizsgálatával, aminek külön előnye, hogy a kísérleti oldalon nem destruktív vizsgálati lehetőséget jelent drága háromdimenziós képalkotási berendezések (például Röntgen CT vagy MRI) használata nélkül. Érdekes módon még az olyan alapvető kérdések, mint a szemcsés anyagban a hangsebesség nyomásfüggésének skálázása, sem egyszerűen megválaszolhatóak [108, 138, 139]. Továbbá naivan azt lehetne gondolni, hogy mivel rugalmas gömbök 1D láncában a Hertz erőtvény nemlinearitása miatt nagyobb összenyomás esetén nagyobb az akusztikus hullámok csoportsebessége [140], esetleg a rendezetlen szemcsés konfigurációkban a hullámok az erőláncokban terjednek legelőször, ami segítségével így információt lehetne nyerni az erőláncokról.

Ebben a fejezetben meg fogjuk mutatni, legnagyobbbrészt 2D (valamint kis részben 3D) numerikus szimulációim alapján, hogy a hanghullámok nem főleg az erőláncokban terjednek: a hullámfront, amelyet a szemcsés konfiguráció egyik oldalán impulzus szerűen gene-

rálunk, legjobban egy durva frontként írható le. Ilyen típusú kísérletekhez [141] hasonlóan a transzmittált akusztikus jelet egy kezdeti koherens részre és egy azt követő véletlenszerű részre lehet osztani. Azt tapasztaltuk, hogy a koherens hullám gyakorlatilag lineárisan halad időben, ami egy repülésiidő- (time-of-flight) hangsebességet definiál. Érdekes módon az így kapott hangsebesség jelentősen (akár 40%-kal) nagyobb, mint ami a konfigurációk effektív rugalmassági modulusából adódna. Megmértük a hangsebesség nyomásfüggését: a nyomástól független kontaktushálózatra és a nyomással arányos Hertz kontakt erőkre várt $p^{1/6}$ függést tapasztaltuk a repülésiidő-hangsebesség esetén, míg az effektív rugalmassági modulusokból számolt hangsebességre ez nem ilyen egyértelmű. Vizsgáltuk a szemcsés anyagokban terjedő hullámok olyan kevésbé ismert tulajdonságait is, mint a diszperzió és a csillapodás. Végül a kapott eredményeket összevetettük kísérletekkel, valamint olyan modell rendszerekkel, mint az azonos gömbökből álló 1D lánc (amely jelentős részben analitikusan is kezelhető), valamint ennek 2D kiterjesztése.

Az előzmények kapcsán három kísérletet szeretnék kiemelni. Az elsőben [142, 143, 144] egy nyílt 3D rendszerben (akusztikusan izolált dobozt 15-30 részecske mélyen üveggolyókkal feltöltve) vizsgálták a hang terjedését; a hangforrás egy függőleges nagyobb kiterjedésű lemez, a detektor pedig a részecskékkel összemérhető nagyságú gyorsulásdetektor volt. Három hangsebességet definiáltak: (1) egy rövid impulzus érkezési idejéből és a forrás-detektor távolságból számolt repülésiidő-sebességet: $c_{\text{repül}} = L/T_{\text{repül}} = 280 \pm 30 \text{ m/s}$, (2) egy rövid impulzusra kapott jel⁹ maximuma érkezési idejének forrás-detektor távolságfüggéséből számolt sebességet: $c_{\text{max jel}} = dL/dT_{\text{max jel}} = 110 \pm 15 \text{ m/s}$, valamint (3) harmonikus gerjesztés esetén a fázis frekvenciafüggéséből számolt csoportsebességet: $c_{\text{csoport}} = 2\pi L dv/d\phi = 60 \pm 10 \text{ m/s}$. Ezekből az inkompatibilis értékekből arra következtettek, hogy a szemcsés anyag nem tekinthető kontinuumnak az akusztikus hullámok terjedése szempontjából.

A második kísérletben [141] nyomás alatt levő rendszerben vizsgálták ultrahang terjedését, itt a nyomás (az előzővel ellentétben) jól definiált volt. Egy üveggolyókkal töltött, 15-30 részecske-átmérő hosszúságú hengerben mérték a tengellyel párhuzamos irányban egy rövid impulzusra adott választ a forrással ellentétes oldalon. Azt tapasztalták, hogy a jel egy koherens hullámfrontból, és egy zajos második részből áll; a két rész amplitudójának arányát a detektor szemcsékhez viszonyított mérete, valamint esetleges extra csillapítás határozta meg (mint például a részecskék nedvesítése [145]).

A harmadik kísérletben [146] acél vagy nejlón golyók alkottak 2D háromszögrácsot egy minden oldalról azonos nyomás alatt tartott hatszög alakú tartományban. A golyók középpontjainak szabályos elhelyezése ellenére az erőhálózat rendezetlen volt a kis méretű polidiszperzitás miatt. A hatszög ellentétes oldalán egy-egy részecske érintkezett a forrással illetve a detektorral. Ők is azt tapasztalták, hogy a jel egy koherens kezdeti és egy zajos második részből áll. Egy rögzített (és nyomás alatt tartott) elrendezés részleteiben is reprodukálható jelet adott, viszont egy kiengedés-nyomás alá helyezés ciklus már jelentősen megváltoztatta a jel zajos második részét. A jel koherens, első részét viszont a részecskék egymással való felcserélgetése sem változtatta szignifikánsan.

Mindezekből azt az előzetes következtetést vonhatjuk le, hogy a szemcsés anyag egy ef-

⁹ pontosabban a jelre illesztett burkolófüggvény

fektív kontinuumnak tekinthető az akusztikus hullámterjedés szempontjából, ha azt megfelelően nagy távolságskálán és megfelelően nagy nyomáson vizsgáljuk, és csak a transzmittált jel kezdeti részére szorítkozunk. Ezt a hullámfrontot egy zajos rész követi, ami azonban nagyon érzékeny a konfigurációk részleteire, és így minden olyan mennyiség leírására, amit ez a rész dominál (mint például $c_{\max}$ jel vagy c_{csoport}), már nem alkalmas az effektív kontinuum közelítés. Nyitott kérdés továbbra is a kontinuum leírás érvényességi tartománya, valamint hogy milyen mechanizmusok kapnak szerepet, miután az effektív kontinuum közelítés érvényét veszti.

A fenti kérdések vizsgálatára numerikus méréseket végeztem 2D és 3D szemcsés konfigurációkon; az alábbiakban ismertetett eredmények döntő többsége 2D szimulációkból származik. Tipikusan (külön jelezzük, ha ettől eltérünk) 600 részecskéből álló konfigurációkat használtam, amelyek 2D (közel) négyzet alakú dobozban helyezkednek el, a doboz x irányban periodikus, az y irányban határoló merev falak közül az alsó rögzített, a felső mozgatható. A részecskék polidiszperz gömbök, átmérőjük 0.8 és 1.2 között egyenletes eloszlású (a hosszúságegység tehát az átlagos részecskeátmérő¹⁰), a közöttük fennálló kölcsönhatást 3D Hertz-Mindlin formula adja¹¹ $\mu = 0.5$ súrlódási együtthatóval és $\nu = 0$ Poisson-tényezővel, valamint esetenként extra sebesség-függő disszipációt is bekapcsolunk. A kiinduló konfigurációk úgy készültek, hogy a felső, dugattyúnak tekinthető falat magas pozícióra állítva az üres dobozba átfedés nélkül véletlenszerűen belehelyeztem a részecskéket, majd a felső falra ráadtam a kívánt nyomást, és egy kevés extra disszipációt bekapcsolva követtem a mozgásegyenleteket, amíg a statikus állapot ki nem alakult¹². A továbbiakban nyomás alatt a fent említett, falra ható nyomást értjük, ami egyenlő a konfigurációra kiátlagolt feszültségtenzor σ_{yy} elemével; az anizotróp preparáció miatt σ_{xx} ennél tipikusan 20-30%-kal kisebbnek adódott. A nyomásfüggés vizsgálatához 30-30 konfigurációt használtam a következő nyomásértékekkel: 10^{-7} , 10^{-6} , 10^{-5} és 10^{-4} ; ez például üveggolyók esetén a $7 \text{ kPa} \leq p \leq 7 \text{ MPa}$ tartománynak felel meg, ami a kísérletileg is releváns tartomány. Egy konkrét nyomáshoz ($p = 10^{-4}$) egy 1000 konfigurációból álló sokaságot is készítettem a pontosabb statisztika kedvéért. A 47. ábrán mutatunk egy tipikus erőhálózatot, ennek rugóállandó hálózatát, valamint az erők illetve rugóállandók hisztogramját.

A következőkben legtöbbször kis amplitúdójú oszcillációkat vizsgálunk (jelezni fogjuk, ha nem). Ehhez a legalkalmasabb megközelítés, ha a mozgásegyenleteket lineárizáljuk a mechanikai egyensúly közelében, vagyis a statikus konfigurációkban a kontaktusokat kicséréljük lineáris (Hooke) rugókra, amelyek rugóállandóját a nemlineáris Hertz-Mindlin kontaktusok differenciális rugóállandójából (dF_n/dn és dF_t/dt) kapjuk. A mozgásegyenletek így

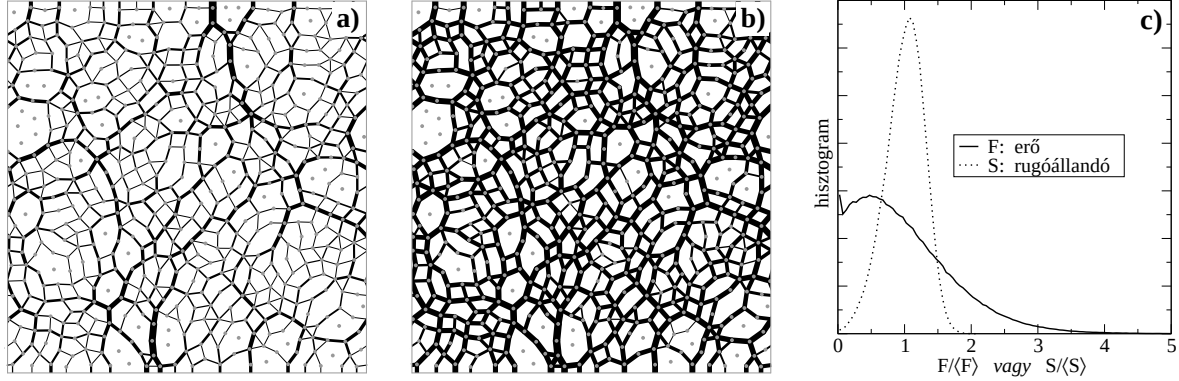
$$M\ddot{\mathbf{u}} = -D\mathbf{u} \quad (62)$$

alakba írhatók, ahol az $\mathbf{u}$ vektor tartalmazza az N részecske középpontjának (2D-ban) $3N$ koordinátáját és elfordulási szögét, az M diagonális mátrix a részecskék tömegeiből és impul-

¹⁰ A nyomásegység a részecskék anyagának Young-modulusa, a tömeg- és időegységet pedig az határozza meg, hogy a részecskék sűrűsége, valamint anyagukban a hangsebesség egységnyi legyen.

¹¹ Vagyis a részecskék 3D gömbök, amelyeknek a középpontja egy síkba lett korlátozva, amelyből nem léphetnek ki.

¹² Amíg az összes részecske gyorsulása kisebb nem lett, mint 10^{-10} az egységeinkben.



47. ábra: (a) Egy szemcsés konfiguráció erőhálózata $p = 10^{-4}$ nyomáson. A vonalak vastagsága arányos a kontaktusokon fellépő erő normális komponensének nagyságával, a tangenciális (súrlódási) komponenst nem tüntettük fel. A részecskéket csak a középpontjukat mutató szürke pont jelöli. (b) Ugyanezen konfiguráció rugóállandó-hálózata. A vonalak vastagsága arányos a kontaktus normális komponensének dF_n/dn rugóállandójával. Amíg az erőhálózat jelentős fluktuációkat mutat, a rugóállandó-hálózat sokkal homogénebb. (c) A kontaktusokon fellépő erő illetve rugóállandó (normális komponens) hisztogramja 1000 konfigurációra. A két görbe alatti terület egyenlő. A rugóállandó eloszlása keskenyebb, mint az erőé. [S13]

zuszmomentumaiból áll, a D dinamikai mátrix pedig a linearizált kontaktusok rugóállandóit (és természetesen a kontaktus hálózat topológiáját) tartalmazza.

Ezután megoldjuk az $M^{-1}D$ mátrix sajátérték-problémáját, és a részecskék oszcillációját a sajátmódusok szuperponálásaként írjuk fel:

$$\mathbf{u}(t) = \sum_n a_n \hat{\mathbf{u}}^{(n)} \sin(\omega_n t). \quad (63)$$

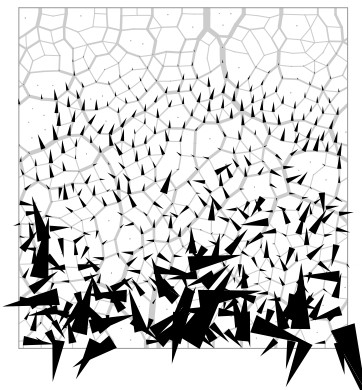
Az a_n amplitúdókat a kezdeti feltétel sajátmódusokra történő vetítéséből kapjuk. A felső falon mért erő kiszámításához meghatározzuk a sajátmódusok b_n csatolását a fallal, így az erőre

$$F_{\text{felső}} = \sum_n a_n b_n \sin(\omega_n t) \quad (64)$$

adódik.

Tipikusan egy rövid impulzus transzmisszióját vizsgáljuk a szemcsés konfiguráción keresztül. Egy δ impulzust küldünk, ami széles frekvenciaspektrumú gerjesztésnek felel meg. Ez a következő kezdeti feltételnek felel meg: $t = 0$ -ban az alsó fallal kontaktusban levő részecskék egy függőleges kezdeti sebességet kapnak, amely nagysága arányos a fali kontaktusuk rugóállandójával. Ez ekvivalens egy infinitezimálisan rövid négyzög-impulzussal: felemeljük az alsó falat egy infinitezimális időre, majd visszaeresztjük. Az impulzus amplitúdója nem lényeges, mivel minden számolás lineáris (kivéve majd a csillapított esetet). A vizsgált mennyiség (a „jel”) a részecskék felső falra gyakorolt nyomóerejének egyensúlytól való eltérése:

$$F_{\text{jel}}(t) = F_{\text{felső}}(t) - F_{\text{felső}}(0^-). \quad (65)$$

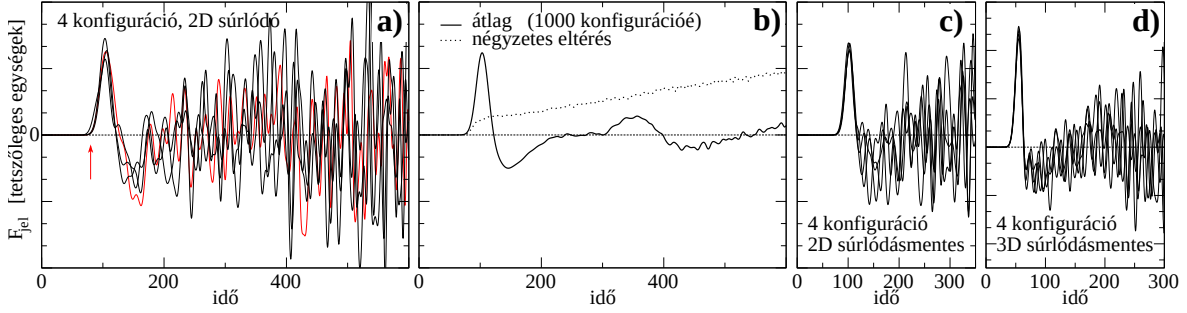


48. ábra: Pillanatfelvétel az oszcillációról. A nyilak hosszúsága a részecskék egyensúlytól való elmozdulását mutatja (felnagyítva), a rotációs szabadságfokokat nem ábrázoltuk. Jól látható az alsó fal (forrás) környékén a részecskék nagy amplitúdójú oszcillációja, valamint a felső fal (detektor) felé haladó durva hullámfront. A pillanatfelvétel időpontjában ($t = 80$) a hullám majdnem elérte a felső falat. [S13]

Az első, kvalitatív megfigyelésünk azt mutatja, hogy a kezdeti impulzus hatására kialakuló akusztikus hullám nem mutat semmilyen szemmel látható korrelációt az erőláncokkal. Ezt a 48. ábra demonstrálja, amelyik egy pillanatképet mutat a részecskék oszcillációjáról. Láthatjuk, hogy az a naív elképzelés, ami szerint az akusztikus hullámok az erőláncok mentén haladnak, nem bizonyult igaznak. Ennek egyik oka, hogy habár a kontaktusok erőhálózata erős térbeli fluktuációkat mutat, a hullámterjedést meghatározó rugóállandó-hálózat már sokkal homogénebb (47. ábra). A rugóállandó ugyanis a Hertz-Mindlin formula esetén arányos az erő köbgyökével, tehát ha két kontaktus között egy 8-as faktor van az erők arányában, akkor a rugóállandók aránya már csak 2, a hangsebességre pedig, amely a rugóállandó négyzetgyökével arányos, ez mindössze egy $\sqrt{2}$ faktort jelent.

Az erőláncok hangterjedésre gyakorolt nagyon gyenge hatását az is eredményezi, hogy a részecskék térbeli rendezetlensége jelentős. Egy erőláncon haladó hullám gyorsan kiterjed a gyenge oldalágakon keresztül a környezetére, ami az oszcillációk egy szélesebb bázisát eredményezi. Mindezek azt eredményezik, hogy az erőláncok nem relevánsak a hullámfront terjedésére.

Térjünk most át a kísérletileg is elérhető F_{jel} , vagyis a forrással ellentétes oldalon lévő falat nyomó extra erő (65) vizsgálatára. Ennek időfejlődését a 49. ábra mutatja. A jelet szemmel láthatóan két részre oszthatjuk: egy kezdeti csúcsra, és az azt követő zajszerű szakaszra. Az egymáshoz hasonló geometriájú, de statisztikailag független konfigurációkra a jel első ciklusa nagyon hasonló, de az azt követő rész erősen konfiguráció-függő. A jel tulajdonságai nagyban hasonlítanak a [141] kísérletben tapasztaltakhoz, így az ő terminológiájukat átvéve a jel első szakaszát *koherens* résznek hívjuk. A sokaságátlagban csak a jel koherens része jelenik meg (valamint ennek gyengülő visszaverődései). A jel második, zajszerű része adja a sokaság négyzetes eltérését. Azt találtuk, hogy kvalitatívan F_{jel} hasonló a 2D súrlódó, 2D súrlódásmentes és a 3D súrlódásmentes esetekben.



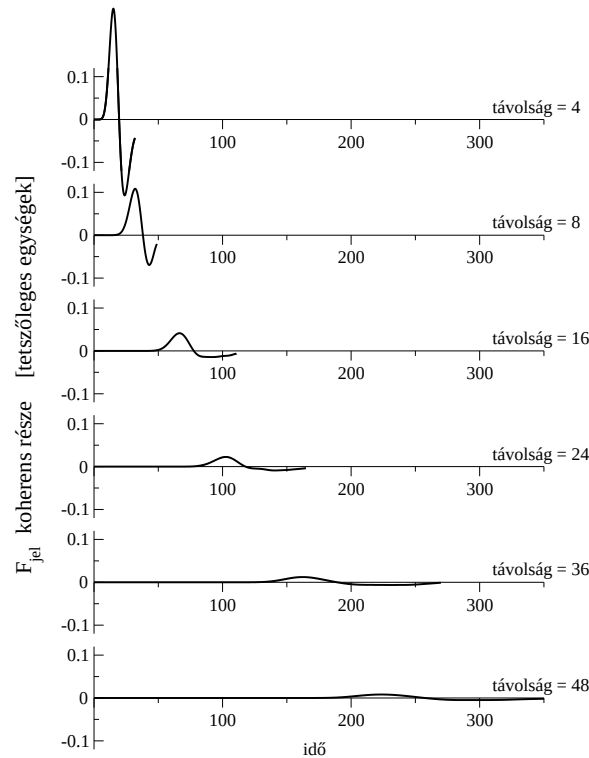
49. ábra: A jel (F_{jel} , a felső falat nyomó extra erő) időfejlődése. (a) Négy különböző 2D sűrűdítő konfiguráció esetét mutatjuk. Az oszcillációk első ciklusa közel azonos minden konfiguráció esetén (ezt nevezzük a jel koherens részének), míg az azt követő szakasz erősen konfiguráció-függő. A 47. ábra konfigurációjához tartozó jel piros. A nyíl a 48. ábra pillanatfelvételének időpontját jelzi. (b) A jel sokaságátlagos és négyzetes eltérése 1000 konfigurációra. A sokaságátlagban csak a jel koherens része jelenik meg, plusz az alsó és felső falakról történő többszörös visszaverődés gyengülő és kiszélesedő jele. (c) A 2D sűrűdésmentes, valamint a (d) 3D sűrűdésmentes rendszer is hasonló viselkedést mutat. [S13]

A jel koherens részét vizsgálva most megállapítjuk ennek terjedési sebességét, és alakjának időfejlődését. Egyedül azt mértük, hogy egy rögzített távolságon mi a jel időfüggése, majd ezt megismételtük különböző forrás-detektor távolságokra (dobozméretre). Azt tapasztaltuk (50. ábra), hogy a jel terjedése során (ahogy egyre nagyobb távolságokra ér) a koherens rész amplitúdója csökken, szélessége pedig nő.

A kvantitatív megközelítéshez először három karakterisztikus pontot definiálunk a koherens jelen (51. ábra betétje): a belépő él (a csúcs amplitúdójának 10%-ánál), a csúcst, valamint az első nullátmenetet. Az 51. ábrán láthatjuk, hogy különböző forrás-detektor távolságok esetén ezek a karakterisztikus pontokat milyen időben észleli a detektor. Realisztikus közelítésen belül azt mondhatjuk, hogy mindhárom esetben az érkezési idő lineárisan függ a távolságtól, bár az adatsorokban az enyhe felfelé ívelő tendencia arra enged következtetni, hogy kis rendszerekben a terjedési sebesség némileg nagyobb, mint nagy rendszerekben. A repülési idő-hangsebességet a belépési él érkezési idejének távolságfüggésével definiáljuk, ami esetünkben $p = 10^{-4}$ nyomáson $c_{\text{repül}} = 0.25$.

Az 52. ábrán a koherens jel amplitúdójának és szélességének skálázását mutatjuk. Az amplitúdó jól közelíthető az $A \sim L^{-\gamma}$ hatványfüggvénnyel; a 2D szimulációkra $\gamma \approx 1.5$. A koherens jel szélessége, amit a belépő él és az első nullátmenet között eltelt idővel definiálunk, szintén hatványfüggvény szerint skálázik: $\sim L^{\alpha}$. A 2D szimulációkra, amint ezt az előző ábrán láttuk, a növekedés közel lineáris: $\alpha \approx 1$. Itt meg kell jegyeznünk, hogy az F_{jel} nem a hullám amplitúdója a közegben, hanem az eredő erő a határon. Mivel az erő arányos a kontaktusok lokális megnyúlásával, vagyis az amplitúdó deriváltjával, γ sem a hullám amplitúdójának csökkenését leíró exponens; erre visszatérünk a (81). egyenletnél.

Összehasonlításként kiszámoltuk a hullámterjedés viselkedését golyók 1D láncában. Az azonos méretű (monodiszperz) gömbök esete analitikusan kezelhető, ezt a későbbiekben



50. ábra: A jel koherens része különböző forrás-detektor (dobozméret) esetén. Növekvő dobozmagasság esetén a jel később érkezik meg, amplitúdója kisebb, szélessége pedig nagyobb lesz. A 49. ábra a 24 részecskeátmérőnyi távolságnak felel meg. [S13]

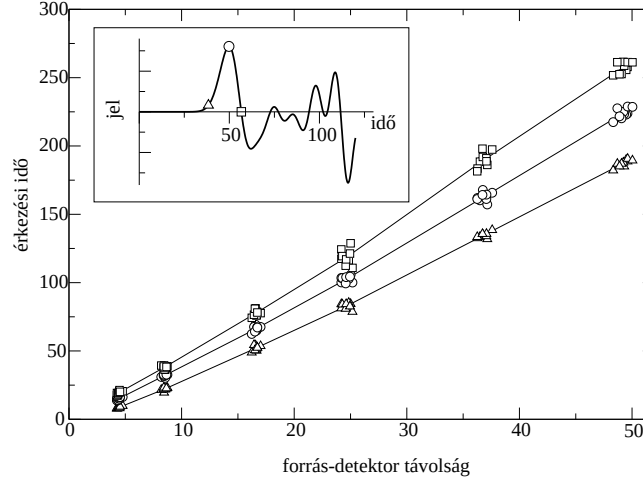
szemcsés rendszer	γ	α
1D lánc vagy háromszögrács, monodiszperz ¹	$2/3$	$1/3$
1D lánc vagy háromszögrács, monodiszperz ²	1	$1/3$
1D lánc, polidiszperz ¹ (numerikus)	$\geq 2/3$	$\geq 1/3$
2D rendezetlen ¹ (numerikus)	≈ 1.5	≈ 1

¹ „A” kezdeti feltétel: egyensúlyi pozíció és véges sebesség a forrás fal mellett

² „B” kezdeti feltétel: véges elmozdulás és nulla sebesség a forrás fal mellett

4. táblázat: A koherens jel γ és α skálázási exponense különböző szemcsés rendszerekben.

részletezzük. Még ilyen egyszerű eset is a hullámterjedés diszperzitása (vagyis a hullámszám nemlineáris függése a frekvenciától) miatt nem triviális exponensekhez vezet; az exponenseket a 4. táblázatban mutatjuk. Lényeges pont, hogy a γ exponens nem univerzális, hanem függ a kezdeti feltételtől: $\gamma = 2/3$ a szokásos kezdeti feltételnél (egyensúlyi pozíció és véges



51. ábra: A koherens jel érkezési ideje a forrás-detektor távolság függvényében. A betétábra mutatja a szimbólumok definícióját: $\triangle$ a belépő él (a csúcs amplitúdójának 10%-ánál), $\circ$ az első csúcs, és $\square$ az első nullátmenet. A jel mindhárom karakterisztikus pontjának lineáris az idő-távolság viszonya. A belépő élhez tartozó idő-távolság diagram meredeksége definiálja a repülési idő-hangsebességet: $c_{\text{repül}} = 0.25$. [S13]

sebesség), míg $\gamma = 1$, ha a forrásnál véges elmozdulást írunk elő nulla sebesség mellett (ezt nem ábrázoltuk az 52. ábrán). Amennyiben az 1D lánc golyóinak méret szerinti polidiszperzitást adunk, numerikus mérések szerint az exponensek nagyobbaknak tűnnek, bár konklúzív állítást jelentősen nagyobb skálájú szimulációk esetén lehetne csak tenni.

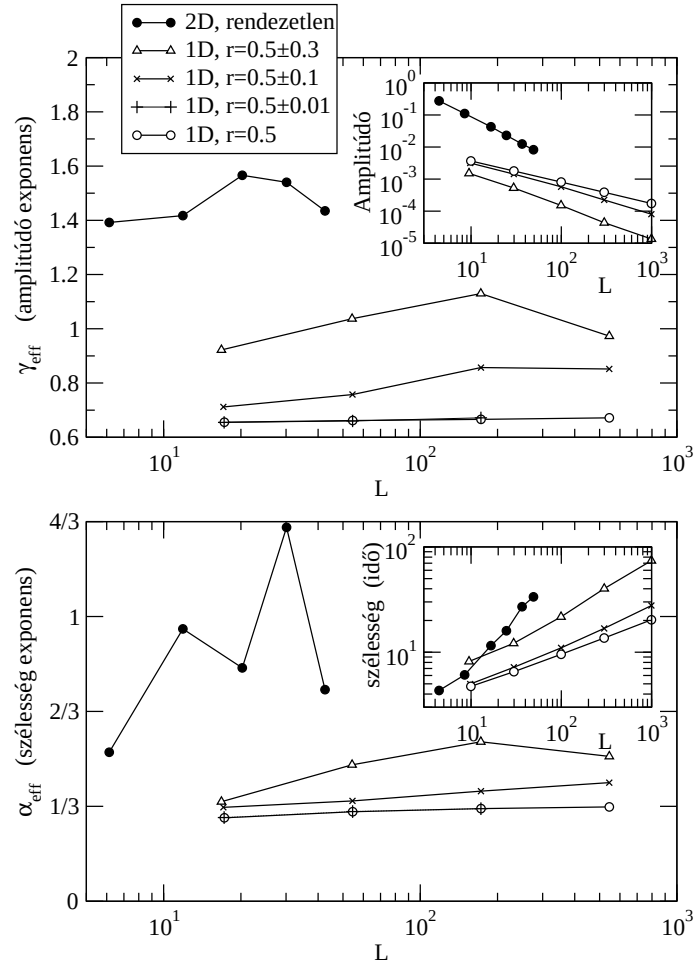
Összefoglalásként a fő különbségek az 1D lánc és a rendezetlen 2D konfigurációk között a következők: (1) az 1D láncban a kezdeti impulzus $t^{1/3}$ szerint szélesedik, míg a rendezetlen 2D közegben lineárisan szélesedik, és (2) az impulzus amplitúdója rendezetlen közegben gyorsabban csökken (tehát γ nagyobb) mint az 1D láncban.

A következőkben a hangsebesség nyomásfüggését fogjuk vizsgálni. A legfontosabb mennyiség a 2D rendezetlen konfigurációk szimulációiból kapott $c_{\text{repül}}$, amelyet összehasonlítottunk a rugalmassági modulusokból számolt c_ℓ longitudinális és c_t transzverz hangsebességgel, valamint kísérleti mérések eredményeivel (53. ábra).

Korábban már utaltunk rá, hogy Hertz kontaktusok rögzített hálózataira, ha az egyes kontaktusokon fellépő erő arányos p -vel, akkor a hangsebesség $p^{1/6}$ szerint skálázódik. Méréseim szerint a 2D rendezetlen konfigurációk szimulációjában $c_{\text{repül}}$ nagyon jól követi ezt a skálázást, míg c_ℓ valamivel gyorsabban nő: $c_\ell \sim p^{0.18}$. Meglepő módon a transzverz hullámok c_t sebességének skálázása ettől különböző: $c_t \sim p^{0.23}$.

Mivel a koherens hullám alapvetően longitudinális, c_ℓ -t $c_{\text{repül}}$ -lel kell összehasonlítani. Habár a skálázási exponensek között nincs jelentős eltérés, $c_{\text{repül}}$ nagyjából 40%-kal nagyobb, mint c_ℓ . A különbség indoklásaként megemlítjük, hogy a repülési időt kis rendszereken mértük, és ahogy korábban láttuk, ez $c_{\text{repül}}$ hozzávetőlegesen 10%-os túlbecsléséhez vezet. Ráadásul, ha a repülési időt nem a belépő élnél, hanem az első csúcsnál vagy az első nullátmenetnél számolnánk, az ennek további csökkenését eredményezné.

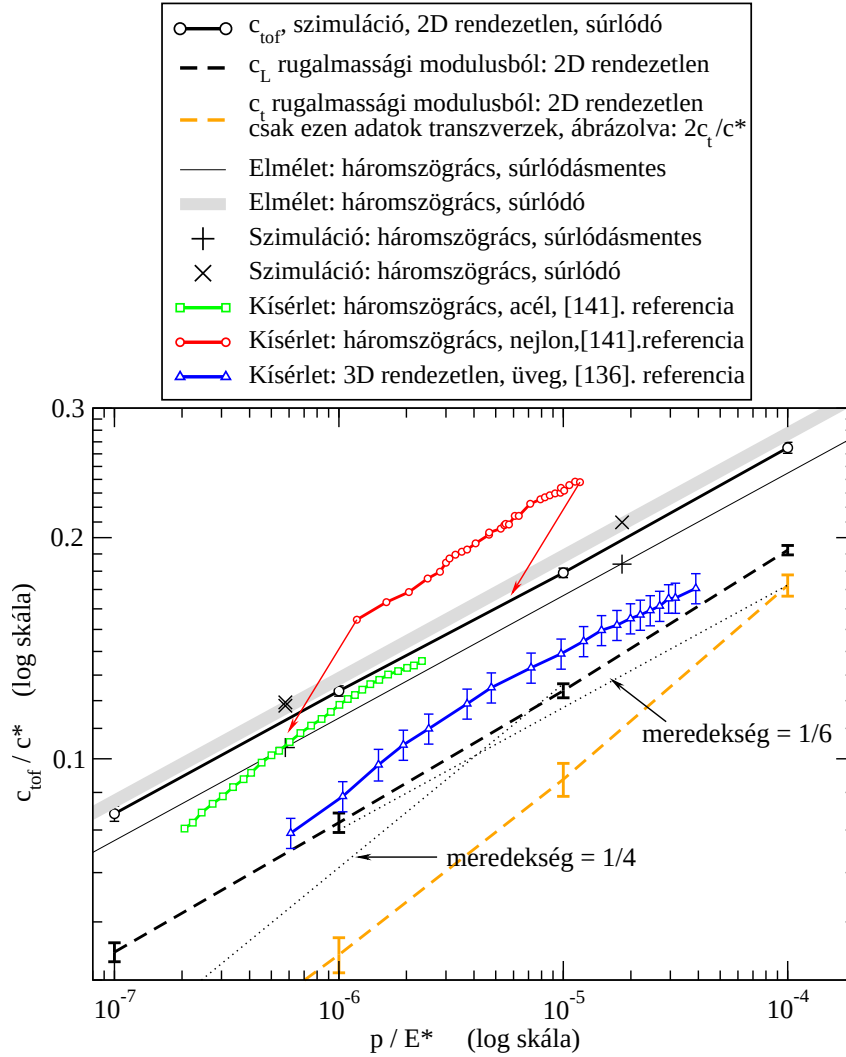
Továbbá úgy tűnik, az impulzus-gerjesztéssel keltett hullámok a közeget rövid távolság-



52. ábra: A koherens jel amplitúdójának és szélességének skálázása a forrás és detektor L távolságának függvényében. *Felső panel:* Az amplitúdó $A \sim L^\gamma$ szerint skálázódik (betétábra). A főábrán az exponens effektív értékét mutatjuk: $\gamma_{\text{eff}} = d \log_{10} A / d \log_{10} L$. Jelmagyarázat: ● az eddig tárgyalt 2D rendezetlen szimuláció, ○ 1D lánc azonos méretű golyókból, többi szimbólum: 1D lánc különböző polidiszperzitású golyókból. *Alsó panel:* A koherens jel szélessége $\sim L^\alpha$ szerint skálázódik a távolsággal (betétábra). A főábrán itt is az effektív exponens értékét mutatjuk: $\alpha_{\text{eff}} = d \log_{10} W / d \log_{10} L$. [S13]

skálán szondázzák. Rövidebb skálán a konfigurációk némileg keményebbek (itt a részecskék elmozdulása közvetlenebbül van kontrollálva), amint azt a rugalmassági modulusok különböző skálán történő vizsgálata mutatja ([S13], B függelék). Ráadásul ahogy hamarosan mutatjuk, a nem síkhullám-szerű sajátmódusok hozzájárulása jelentős, amelyek várakozás szerint nem írhatók le a rugalmas közeg egyenleteivel. Ettől eltekintve a rugalmas közeg hosszú hullámhosszú leírása jó első közelítést ad a koherens hullám terjedésére.

Rugalmas közeget jól közelíthetünk egy szabályos ráccsal, ezért megvizsgáltuk egy monodiszperz golyókból álló háromszögrács viselkedését. A véges rácson kapott numerikus eredmények jó egyezést mutatnak a végtelen rácsra kapott analitikus kifejezésekkel, habár a



53. ábra: Különböző hangsebességek nyomásfüggése. Legfontosabb adat a 2D rendezetlen konfigurációk szimulációiból kapott $c_{\text{repül}}$, amely tökéletes $p^{1/6}$ skálázást mutat. A rugalmassági modulusokból kapott c_L és c_t ennél kisebb, bár azt várhatnánk, hogy $c_{\text{repül}} \sim c_L$. c_t sokkal kisebb, 2-vel kellett szorozni, hogy rákerüljön az ábrára. Az elméleti görbék egyenletei: (85) súrlódásmentes és (86) súrlódó. Az utóbbi némileg függ a Poisson-tényezőtől, a szürke sáv a $0 \leq \nu \leq 0.5$ tartománynak felel meg. A súrlódásmentes háromszögrács szimulációja (+) tökéletes egyezést mutat a (85) elmélettel. A súrlódós eset (×) erős végesméret-effektust mutat: a szürke sáv tetejét kellene elérni ($\nu = 0$ értéket használtunk $L = 24$ mérettel, de $p = 5 \times 10^{-7}$ nyomásra $L = 160$ rendszert is ábrázoltuk). A 2D rendezetlen konfigurációk szimulációja (○) erős hasonlóságot mutat a háromszögrácséval. Összehasonlításként feltüntetjük néhány releváns kísérlet eredményeit is (emlékeztetőül a szimuláció nyomás, és sebesség egységei: $E^* = E/(1 - \nu^2)$ és $c^* = \sqrt{E^*/\rho}$: acélgolyók háromszögrácsban (□, [146]), nejlon golyók háromszögrácsban (○, szintén [146], a nyilak jelentését a szövegben részletezzük), és rendezetlen 3D üveggolyók (△, [141]). Referenciaként a $p^{1/6}$ és $p^{1/4}$ skálázásnak megfelelő görbéket is feltüntetjük pontozott vonallal (az irodalomban néha $p^{1/4}$ effektív skálázást említene alacsony nyomás esetére). [S13]

súrlódásos esetben jelentős végesméret-effektusokat látunk. A 2D rendezetlen súrlódó rendszer a vizsgált nyomástartományban nagyon hasonlóan viselkedik, mint a háromszögrács, beleértve a Hertz rendszerekre naívan várt $p^{1/6}$ skálázást. Ez a kvantitatív egyezés meglepő a jelentősen különböző koordinációs szám fényében (6 illetve 3-nál kicsit több). Ezt részben rövid hullámhosszú effektusok okozhatják, amelyek befolyásolják a rendezetlen rendszert, míg szabályos háromszögrács esetén a várt $c_{\text{repül}} = c_\ell$ egyenlőség jól látszik.

Kísérleteket 2D-ban leginkább szabályos háromszögrácsokon végeztek. Ezekben a rendszerekben elkerülhetlen valamekkora polidiszperzitás, ami megakadályozza, hogy a szomszédos gömbök között az összes kontaktus bezáródjon [108, 146, 147]; alacsony nyomáson a koordinációs szám nem haladja meg a 4-et. Viszont megfelelően nagy nyomás esetén a gömbök kitérése már elegendően nagy a rések kompenzálására, és visszakapjuk a tökéletes rács viselkedését. Bevezethetünk egy redukált nyomást [147]:

$$P^* = \frac{3P}{\alpha^{3/2} E^*}, \quad (66)$$

ahol αd a részecskék átmérő-eloszlásának szélessége; a polidiszperzitás hatása eltűnik, amint P^* 1 fölé nő. A [146] referencia acél golyóira (ahol $\alpha \approx 10^{-4}$) az adatok közel esnek az általunk számolt háromszögrácséhoz, a várakozás szerinti $p \gtrsim 10^{-6}$ esetben. Noha a hangsebességben látunk 10-20% eltérést, az egyezés akkor is figyelemre méltó, hiszen $c_{\text{repül}}$ kiszámolásánál semmilyen illesztési paramétert sem használtunk. A különbséget esetleg végesméret-effektusok magyarázhatják.

A nejlön golyók háromszögrácsára szignifikánsabban nagyobb (normált) hangsebességet mértek, mint várunk [146]. Az eltérés valószínűleg az anyag Young modulusának bizonytalan értékéből ered. A nejlön viszkoeelasztikus anyag, rugalmas modulusai frekvenciafüggők (magasabb frekvencián keményebb). Mivel nem ismerjük a modulusokat a kísérlethez releváns frekvenciatartományban, az 53. ábrán a nulla frekvenciához tartozó Young-modulust használtuk. Viszont ha a Young-modulust csak egy 2-es faktorról megnövelnénk, akkor a kísérleti görbe a nyílak irányába tolódna el.

Végezetül a 3D üveggolyókon végzett mérések [141] kisebb hangsebességet adtak, mint a 2D méréseké. Ennek egy magyarázata lehet az, hogy a 2D-s síkbeli golyók méréseit lehet úgy tekinteni, ha ilyen síkokat egymásra pakolunk, mint a közeg keménységét illetve a hullámterjedést vizsgálni egy erősen anizotróp 3D rendszer egy sűrű, magas koordinációs számmal bíró síkja mentén. Ez magyarázhatja a 2D rendszerek nagyobb hangsebességét közönséges 3D konfigurációkhoz képest.

Most áttérünk a *sajátfrekvenciák* és *rezgési sajátmódusok* vizsgálatára. Folytonos rugalmas közeg esetén a rezgési sajátmódusok síkhullám alakot vesznek fel, amelyekre az ω frekvencia és a k hullámszám között hosszú hullámhosszra a lineáris $\omega \propto k$ összefüggés áll fenn. Szemcsés konfigurációink esetén nem ilyen egyszerű a helyzet. Az 54(a) ábrán mutatjuk a sajátfrekvenciákat, az 55. ábrán pedig néhány kiválasztott sajátmódust. Jónéhány nulla sajátérték adódik azok miatt a részecskék (angolul rattler) miatt, amelyek nincsenek csatolva az erőhálózathoz, hanem a környezetükben lévő részecskék boltívként körülölelik őket. A legalacsonyabb véges frekvenciájú sajátmódusok [az első kettő az 55(a) és (b) ábrán látható] a rugalmas test némileg torzult sajátmódusainak felelnek meg, amelyeket a folytonos közeg

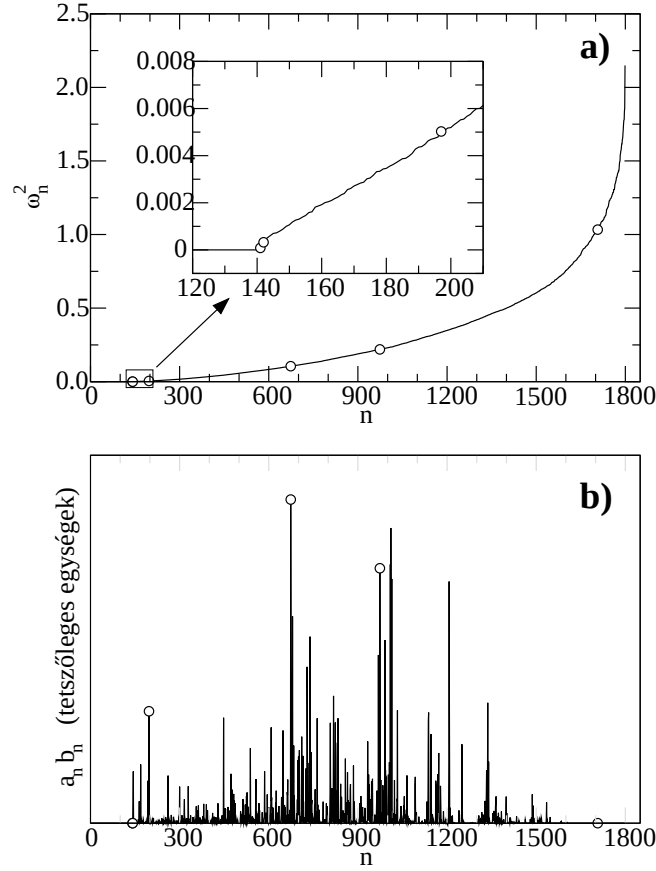
elméletéből várunk. Figyelemre méltó, hogy sűrűlódásmentes esetben sokkal nehezebb még a legalacsonyabb véges frekvenciájú sajátmódusokat is megfeleltetni a rugalmas testekével, és sokkal több alacsony frekvenciájú sajátmódus van (ezt most nem mutatjuk az ábrákon, de az előző fejezetben foglalkoztunk vele; az itt vizsgált rendszer $\mu = 0.5$ és $p = 10^{-4}$ paraméterekkel messze van az izosztatikus állapottól: $z = 3.48 \pm 0.03$). Mindezek ellenére a transzmittált jel nagyon hasonló a sűrűlódásos esethez (49. ábra). Nagyon sok lokalizált sajátmódus van [55(f) ábra], ezek nem járulnak hozzá a jel átviteléhez. Azok a sajátmódusok, amelyek dominálják az átvitelt [54(b) ábra] globálisak: tartalmaznak oszcilláló részecskéket a forrásnál és a detektornál is. Viszont az első néhány sajátmódust leszámítva (esetünkben ez nagyjából a 141-147 sorszámú módusokat jelenti), ezek jelentősen eltérnek kinézetre a síkhullámoktól [55(c)-(e) ábrák]. Ez azt jelenti, hogy legalábbis az általunk vizsgált rendszerméret, nyomás és gerjesztési mód esetén az akusztikus hullámok terjedése nem írható le az anyagot egyszerű rugalmas közegnek tekintve. Ezek fényében az a meglepő, hogy a rugalmas közeg megközelítésből kapott c_ℓ ennyire közeli becslést ad $c_{\text{repül-re}}$.

Az utolsó numerikus eredményként azt mutatjuk, hogy a csillapítás hogyan befolyásolja az átvitt jelet. A Hertz-Mindlin erőtvörnyhez egy disszipációs tagot adtam, amelynek alakját úgy választottam, hogy az egy előre rögzített hányada legyen a nemlineáris erőtvörny mindenkor linearizált változatához tartozó kritikus csillapításnak. Az így kapott rendszert már nem egyszerű lineárisaként kezelni, ezért az eddigiekkel ellentétben ebben az esetben a hullám terjedésének időfejlődését molekuladinamikával határoztam meg. Az 56. ábrán az átvitt jelet mutatjuk egyetlen konfigurációra különböző erősségű csillapítás esetén. Az erős csillapítás a jel koherens részét csak kis mértékben módosítja, a zajos részt viszont jelentős mértékben elnyomja. Ez kvalitatívan egyezik az üveggolyókkal végzett kísérletek eredményeivel [145], ahol a csillapítást a kontaktusok nedvesítésével indukálták.

Most áttérünk az analitikus számolásokra: először egyforma gömbök 1D láncával foglalkozunk. Ebben a konfigurációban sokan vizsgálták már a Hertz erőtvörny nemlinearitásának következményeit az impulzus terjedésére (például [140, 148, 149, 150, 151]), de ezen munkák legtöbbje a kezdetben nem összenyomott lánc esetét tekintette. Ebben az esetben az erő nemlinearitása nagyon jelentős szerepet játszik, valamint az is lényeges, hogy nincs visszatérítő erő a kezdetben éppen csak egymást érintő golyóknál. Ha összehasonlítást akarunk tenni a hangsebesség nyomásfüggésével szemcsés rendszerekben, akkor az infinitezimális hullámok terjedéséhez az 1D lánc részecskéinek mozgásegyenleteit linearizálni kell az előzetesen összenyomott állapotból kiindulva, majd az így kapott linearizált egyenletekben kell az impulzus terjedését vizsgálni.

A legegyszerűbb esetben az 1D lánc egyforma gömbökből áll, nyomás alatt két fal között. $t = 0$ időpillanatban az 1. gömb állapotát megváltoztatjuk (részletek azonnal), az így keletkezett zavar c hangsebességgel terjed a láncban, és $t_0 = N\ell/c$ időpillanatban érkezik a túlsó falhoz, ahol a lánc N darab ℓ átmérőjű gömbből áll. Erre a rendszerre analitikusan ki tudjuk számolni a skálázási exponenseket. (Akár át is ugorhatunk a (75)-(76) végeredményre, de a teljesség kedvéért mutatom a levezetést.)

A linearizált rendszerben (N azonos m tömegű pontrészcseke, szomszédok között ℓ hosszú-



54. ábra: (a) A 47. ábrán mutatott konfiguráció sajátfrekvenciái. A frekvenciák négyzetét ábrázoljuk a sajátmódus (növekvő frekvencia szerint rendezett) n sorszáma függvényében. Az $n = 0, \dots, 140$ módusok frekvenciája zérus, ami az erőhálózathoz nem csatolt részecskék következménye. A betétábra az első néhány véges frekvencia környékét mutatja. (b) A sajátmódusok $a_n b_n$ járuléka az átvitt jelhez [(64). egyenlet]. Mindegyik panelen $\circ$ jelöli az 55. ábrán mutatott sajátmódusokat. [S13]

ságú K erősségű rugó) az n -edik sajátmódus síkhullám alakú:

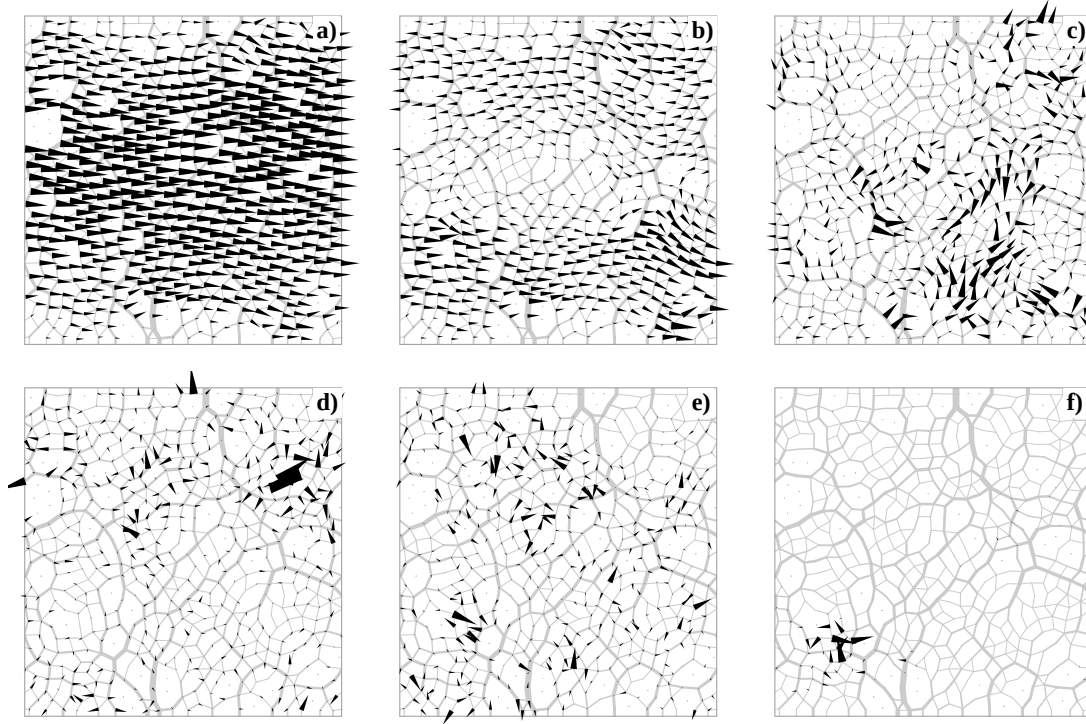
$$u_i^{(n)}(t) = \sin(k_n i \ell) \sin(\omega_n t + \phi_n), \quad (67)$$

ahol $u_i(t)$ az i -edik részecske elmozdulása. A hullámszámok és sajátfrekvenciák

$$k_n = \frac{n\pi}{(N+1)\ell}, \quad \omega_n = 2\sqrt{\frac{K}{m}} \sin \frac{k_n \ell}{2}. \quad (68)$$

között a rendszer végessége miatt nemlineáris az összefüggés, tehát a rendszerünk diszperzív lesz (vagyis egy hullám alakja haladás során torzul, még ha energiája nem is disszipálódik). A hangsebességet a hosszú hullámhosszú viselkedésből kapjuk:

$$c = \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k=0} = \ell \sqrt{\frac{K}{m}}. \quad (69)$$



55. ábra: A 47. ábrán mutatott konfiguráció néhány kiválasztott sajátmódusa. (a) $n = 141$ és (b) $n = 142$ az első két nemnulla frekvenciájú sajátmódus. Ezek megfelelnek a folytonos közeg alacsony gerjesztett állapotainak, bár kissé torzultak a rendezetlen kontaktus hálózat következtében. (c) $n = 197$, (d) $n = 674$ és (e) $n = 974$ azok közül a magasabb frekvenciájú sajátmódusok közül való, amelyek jelentősen hozzájárulnak az átvitt jelhez. (f) $n = 1707$ egy magas frekvenciájú lokalizált sajátmódus. Az itt mutatott módusokat az 54. ábrán is jelöltük. [S13]

A teljes megoldás alakja

$$u_i(t) = \sum_{n=1}^N a_n \sin(k_n i \ell) \sin(\omega_n t + \phi_n), \quad (70)$$

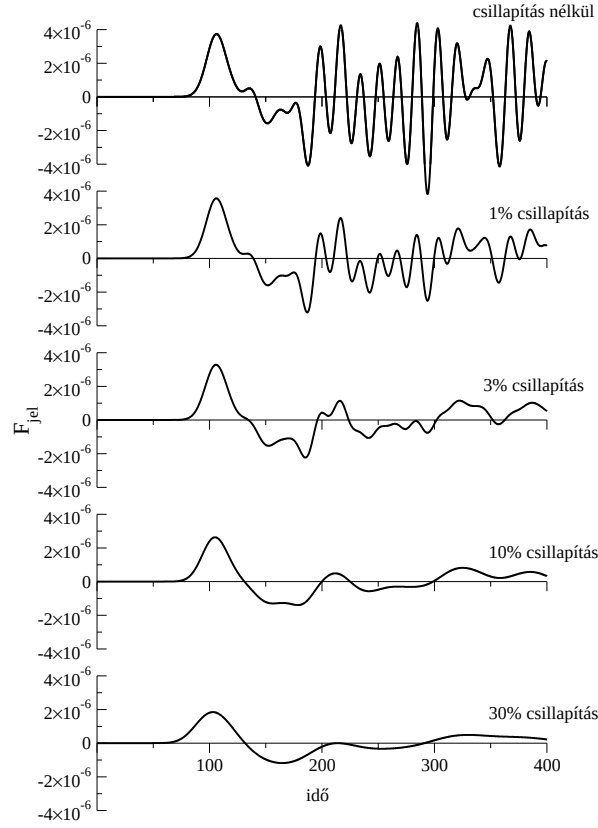
ahol az a_n amplitúdókat a kezdeti feltétel sajátmódusokra vetítése adja. A két vizsgált kezdeti feltétel: (A) $\dot{u}_1(t=0) = c$, és (B) $u_1(t=0) = \ell$; minden más elmozdulás és sebesség $t=0$ időben nulla. Így

$$a_n^A = \frac{2\ell}{N+1} \cos \frac{k_n \ell}{2}, \quad a_n^B = \frac{2\ell}{N+1} \sin k_n \ell. \quad (71)$$

Végül a vizsgált mennyiség az N -edik részecske falra gyakorolt nyomóereje:

$$F(t) = K u_N(t). \quad (72)$$

Ezt numerikusan ki tudjuk számolni, és mutatni is fogjuk az 57. ábrán. Analitikusan viszont a (70) összegzés nem hozható könnyen zárt alakra, így arra szorítkozunk, hogy $F(t)$ -t a $t_0 = N\ell/c$ időpontban értékeljük ki, „amikor a hullám odaérne”. A gyorsan oszcilláló tagokat



56. ábra: Az átvitt jel csillapítás mellett. A csillapítást a kontaktusonként vett kritikus csillapítás hányadosaként tüntetjük fel. A csillapítás sokkal kevésbé befolyásolja a jel koherens részét, mint a zajos részét. [S13]

átírva azt kapjuk, hogy

$$F^A(t_0) = \sum_{n=1}^N \frac{2K\ell}{N+1} \cos \frac{k_n \ell}{2} \sin k_n \ell \times \sin \left(k_n \ell + \frac{k_n^3}{k_0^3} + \frac{O(k_n^5 \ell^2)}{k_0^3} \right), \quad (73)$$

ahol $k_0 = (24/N)^{1/3}/\ell$. A $k_n \gtrsim k_0$ tagok gyorsan oszcillálnak és effektíven kiejtik egymást, így a domináns járulékot a $k_n < k_0$ tagok adják (illetve $k_n < \text{konstans} \times k_0$ tagok, mivel a végén úgyis csak skálázást fogunk vizsgálni). A megmaradó tagok összegét integrállal

közelítjük:

$$F^A(t_0) \sim \int_0^{k_0} \frac{2K\ell dk}{\pi} \cos \frac{k\ell}{2} \sin k\ell \times \sin \left(k\ell + \frac{k^3}{k_0^3} + \frac{O(k^5\ell^2)}{k_0^3} \right). \quad (74)$$

Az $N \rightarrow \infty$ határesetet (tehát $k_0 \rightarrow 0$) tekintve a sorfejtésben k_0 szerinti legalacsonyabb rendű tagot keressük: ez

$$F^A(t_0) \sim k_0^2 \sim N^{-2/3}. \quad (75)$$

Tehát így skálázódik az utolsó golyó által a falra gyakorolt nyomás a t_0 időben az „A” kezdeti feltétel esetén, amelyben az első golyó nulla elmozdulás mellett véges sebességgel indul $t = 0$ időben.

Érdekes módon a másik kezdeti feltétel („B”: minden golyó zérus sebességgel indul, de az elsőnek véges az elmozdulása) más exponenst ad:

$$F^B(t_0) \sim k_0^3 \sim N^{-1}. \quad (76)$$

Ezek tehát az egyforma golyókból álló linearizált disszipációmentes 1D lánc γ csillapodási (amplitúdó-csökkenési) exponensei.

A hullám alakjának kiszámításához¹³ először a diszperziós reláció sorfejtését tekintjük:

$$\omega_n \approx ck_n - \frac{c\ell^2}{24}k_n^3. \quad (77)$$

Az $u(x, t) = A \exp(ikx - \omega t)$ alakú haladó hullám, amelyet nagy hullámhosszakra x -ben folytonosnak tekinthetünk, ki kell hogy elégítse a diszperziós relációnak megfelelő differenciálegyenletet:

$$-\frac{\partial u}{\partial t} = c \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{c\ell^2}{24} \frac{\partial^3 u}{\partial x^3}. \quad (78)$$

Az együttmozgó koordinátarendszerben $\xi = x - ct$ változcserével a $\partial u / \partial x$ tag kiesik. A megoldást az

$$u(\xi, t) \sim t^{-g} U \left(w = \frac{\xi}{t^\alpha} \right) \quad (79)$$

hasonlósági alakban keresve azt kapjuk, hogy $\alpha = 1/3$, valamint

$$0 = -gU(w) - \frac{w}{3}U'(w) + \frac{c\ell^2}{24}U'''(w). \quad (80)$$

Ezek különböző g csillapodási exponensek esetén különböző megoldáscsaládokat eredményeznek. A $g = 0$ esetét vizsgálva Airy függvény megoldást kapunk: $U'_0(w) = \text{Ai}(2w/(c\ell^2)^{1/3})$.

¹³ A (77)-től (83)-ig tartó számolás legnagyobbbrészt (de nem kizárólagosan) társszerzőim eredménye. Mivel szorosan kapcsolódik a többi eredményemhez és segít értelmezni azokat, vázolom a levezetést.

További megoldásokat generálhatunk (80) differenciálásával. Egyszer illetve kétszer differenciálva azt kapjuk, hogy $U = U'_0$ megoldás $g = 1/3$ mellett, míg U''_0 megoldás $g = 2/3$ -ra. Az $u(x, t)$ függvényre például $g = 1/3$ esetén $t^{-1/3} \text{Ai}[2(x - ct)/(c\ell^2 t)^{1/3}]$ alakú megoldást ad, amiről hamarosan látni fogjuk, hogy ez a kiválasztott megoldás az A kezdeti feltételre. A megoldás kiválasztásához visszatérünk a (75). és (76). kifejezésekre, amelyek megadják a falat nyomó erő skálázási exponensét N -nel. Mivel $u(x, t)$ a haladó hullám megoldás egy félvégtelen közegbe, az $u(x = (N + 1)\ell, t) = 0$ megoldás a tükröző falnál két egymással ellentétes irányba haladó hullám szuperpozíciója lesz. Az $x = (N + 1)\ell$ helyen levő falra ható erő arányos az utolsó ($x = N\ell$ helyen levő) golyó elmozdulásával, ezért a következő alakba írható:

$$F(t) = K \{ u(x, t) - u(2(N + 1)\ell - x, t) \}, \quad (81)$$

amely az $x = N\ell$ és $t = t_0 + \tau$ behelyettesítésekkel a $g = 1/3$ megoldásra a következő alakot adja:

$$\begin{aligned} F^A(t_0 + \tau) &\sim K\ell \left(\frac{ct}{\ell}\right)^{-1/3} \left\{ \text{Ai}\left(\frac{-2c\tau}{(c\ell^2 t)^{1/3}}\right) - \text{Ai}\left(\frac{4\ell - 2c\tau}{(c\ell^2 t)^{1/3}}\right) \right\} \\ &\sim -4K\ell \left(N + \frac{c\tau}{\ell}\right)^{-2/3} \text{Ai}'\left(\frac{-2c\tau/\ell}{(N + c\tau/\ell)^{1/3}}\right). \end{aligned} \quad (82)$$

Az extra differenciálás miatt az N szerinti csillapodási exponens nem $g = 1/3$, hanem $\gamma = g + 1/3 = 2/3$. Az exponens értéke (75) szerint megegyezik azzal, ami az A kezdeti feltételhez tartozik, tehát valóban ez a megoldás választódik ki itt (így a megelőlegezett A felső index indokolt).

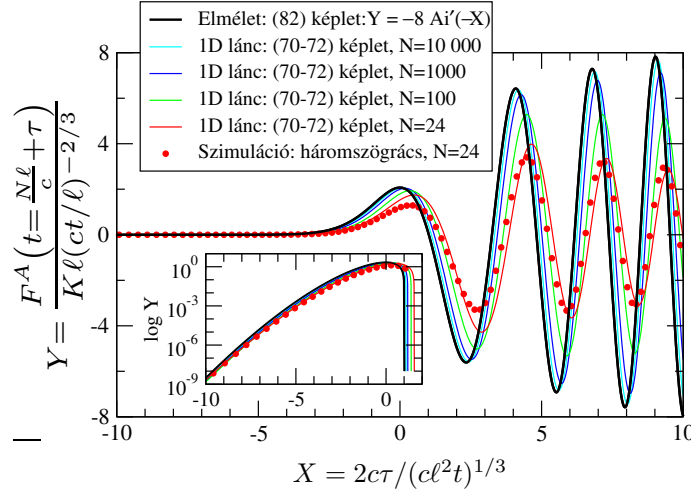
A másik, B kezdeti feltételhez a $g = 2/3$ megoldást kell használnunk:

$$F^B(t_0 + \tau) \sim -4K\ell \left(N + \frac{c\tau}{\ell}\right)^{-1} \text{Ai}''\left(\frac{-2c\tau/\ell}{(N + c\tau/\ell)^{1/3}}\right) \quad (83)$$

A két kezdeti feltétel közötti összefüggés tehát a következő: a B kezdeti feltételt az A-ból idő szerinti differenciálással kapjuk. Mivel az egyenletek lineárisak, a megoldások között is ugyanez az összefüggés. A fenti megoldásoknak olyan a struktúrája, hogy egyik megoldást differenciálva, és a szubdomináns tagokat elhagyva a másik megoldást kapjuk, miközben a g exponens $1/3$ -dal nő.

A fentiekben kapott hullámalakot (az A kezdeti feltételre) mutatjuk az 57. ábrán, ahol összevetjük a véges lánc megoldásának numerikus kiértékelésével, valamint egy 2D monodiszperz háromszögrács szimulációjával. A várakozásnak megfelelően (i) a végtelen közegnek megfelelő (82) hullámalakhoz tart a véges lánc esete az $N \rightarrow \infty$ limeszben, és (ii) a háromszögrács visszaadja az 1D lánc esetét, ha a rétegek száma megegyezik N -nel, és a paramétereket megfelelően átskálázzuk, amint azt hamarosan mutatjuk.

Amennyiben az 1D lánc rendezetlen lesz, az eredmények kissé megváltoznak. A rendezetlenséget a golyók polidiszperzitásával adjuk, és a 2D rendezetlen rendszerhez hasonlóan numerikusan számoljuk a megoldást. A koherens jel amplitúdójának és szélességének skálázását az 52. ábrán mutattuk. A γ és α exponensek is nagyobbak tűnnek mint a monodiszperz



57. ábra: A haladó hullám alakja az A kezdeti feltételre. Az elméleti levezetés (82) függvényalakját, az egyforma golyókból álló véges 1D lánc (70)-(72) megoldásának numerikus összegzését, valamint 2D monodiszperz golyók háromszögrácsának numerikus szimulációját hasonlítjuk össze. A háromszögrács megoldása nagyon közel áll az azonos méretű 1D láncéval. A (82) megoldás tartalmaz egy meghatározatlan szorzófaktor, mivel egy lineáris egyenlet megoldásaként kaptuk. [S13]

lánc esete, de az ekkora skálán végzett mérések nem elég tiszták egyértelmű következtetés levonására.

A hullám energiamérlegét tekintve vizsgáljuk most meg a haladó hullámban az első impulzus (oszcilláció) energiáját. Ennek kinetikus energiája:

$$\begin{aligned}
 E_{\text{kin}} &= \sum_{\text{első impulzus}} \frac{m}{2} \dot{u}_n^2(t) \simeq \frac{m}{2} \sum_{\text{első impulzus}} c^2 \frac{t^{-2g}}{t^{2/3}} [U'(w_n)]^2 \\
 &\sim \frac{t^{-2g}}{t^{2/3}} t^{1/3} \sim t^{-2g-1/3},
 \end{aligned} \tag{84}$$

ugyanis az első impluzusban résztvevő atomok száma az impulzus szélességével, $t^{1/3}$ szerint skálázódik. Így például az A kezdeti feltétel esetén az első impulzus energiája t^{-1} szerint csökken. Disszipáció híján ezért rövid idő elteltével gyakorlatilag az összes energia az első impulzus mögötti tartományban lesz, ahol a tipikus viselkedés erősen inkoherens, magas frekvenciájú (a diszperziós reláció maximum frekvenciája közelében) oszcilláció. Mivel e tartomány hosszúsága időben lineárisan nő, itt az amplitúdó skálázása $t^{-1/2}$ lesz.

Megjegyezzük, hogy 1D láncokban az Airy függvényalak már korábban is említésre került [149, 150], viszont leginkább olyan rendszerekre, ahol az 1D lánc nem volt kezdetben nyomás alatt. Ilyen rendszerekben viszont a visszatérítő erők hiánya miatt minden energia a kezdeti impulzusban marad. Következésképpen az amplitúdó időfejlődése is más lesz mint a mi esetünkben.

Végezetül a szabályos háromszögrács esetével foglalkozunk. A monodiszperz golyók egy téglalap alakú tartományba vannak zárva, a kezdeti feltétel az egyik fallal érintkező

golyókon van adva, és feltételezzük, hogy a háromszögrács egyik rácsvektora párhuzamos ezzel a fallal. A hangsebesség könnyen kiszámolható (például [108]):

$$\frac{c^{\text{súrlódásmentes}}}{\sqrt{E^*/\rho}} = \frac{3^{19/12}}{2^{3/2}\pi^{1/2}} \left(\frac{p}{E^*}\right)^{1/6}, \quad (85)$$

$$\frac{c^{\text{súrlódó}}}{\sqrt{E^*/\rho}} = \frac{3^{19/12}}{2^{3/2}\pi^{1/2}} \sqrt{1 + \frac{\eta}{3}} \left(\frac{p}{E^*}\right)^{1/6}, \quad (86)$$

ahol η a Hertz-Mindlin erőtvény tangenciális és radiális keménységének (57) hányadosa. Ezt például úgy is kiszámolhatjuk, hogy leképezzük egy ekvivalens 1D láncra. Ha a háromszögrácsban a longitudinális hullámok terjedése merőleges a sorokra, akkor az egy sorban lévő M golyó együtt mozog, ami az 1D láncban egy golyónak felel meg. Mivel a hosszúságegységünk a háromszögrács golyóinak átmérője, az N sor mindegyike $m_{\text{eff}} = M\rho\pi/6$ tömegű, $\ell = \sqrt{3}/2$ távolság választja el őket, és egy $K_{\text{eff}} = 3^{7/6}2^{-2}Mp^{1/3}$ effektív keménységű rugó köti össze. A súrlódásos esetben K_{eff} egy extra $(1 + \eta/3)$ faktort is tartalmaz.

Ezzel a háromszögrácsban terjedő hullám alakját is meg tudjuk jósolni. Az 57. ábrán a háromszögrács és az 1D lánc közötti eltérést az okozza, hogy a háromszögrácsban az első és utolsó sort a fallal összekötő effektív rugó keménysége különbözik a többitől: $K_{\text{fal}}/K_{\text{tömbi}} = 3^{5/6}/4 \approx 0.62$.

Amennyiben a golyók polidiszperzek, akkor megfelelően alacsony nyomáson (ahol az elasztikus deformációk összemérhetőek a polidiszperzitással) feszültség térbeli fluktuációkat mutat. Ennek a hangsebességre gyakorolt hatását átlagtér-elméletben lehet kiszámolni [108].

Ebben a fejezetben nyomás alatt tartott 1D, 2D és 3D szemcsés konfigurációkban vizsgáltuk impulzusok terjedését. A rendezetlen rendszerekben azt tapasztaltuk, ugyanúgy mint hasonló kísérletekben, hogy a válaszjel egy kezdeti, koherens részre, és egy azt követő zajos részre bontható; ezek közül a koherens résszel foglalkoztunk behatóan. Első megállapításunk az, hogy az impulzusra adott válasz lineárisan terjed időben, és nem az erőláncokat követi; valamint definiál egy repülésiidő-hangsebességet.

Azt találtuk, hogy a koherens jel amplitúdója és szélessége skálázódik a megtett távolsággal. Azon kezdeti feltétel esetén, amelyben az egyik fallal érintkező golyók véges kezdősebességgel indulnak, az amplitúdó exponense $\gamma \approx 1.5$ a 2D rendezetlen rendszerre, és (egzaktul) $2/3$ az egyforma golyókból álló 1D láncra. A jel szélességének exponense $\alpha \approx 1$ a 2D rendezetlen rendszerre, és $1/3$ az 1D láncra. A jel hullámalakja is kiszámolható, az 1D lánc esetén Airy függvényvel írható le. Az azonos golyókból álló 2D háromszögrács leképezhető az 1D lánc esetére (kivéve a falakkal összekötő rugók keménységét), következésképp a skálázási exponensek és a hullám alakja azonos.

Vizsgáltuk a különböző módon definiált illetve mért hangsebességek nyomásfüggését. Azt találtuk, hogy súrlódó részecskékre a 2D rendezetlen konfigurációkban a repülési idő alapján mért, valamint a rugalmassági modulusokból számolt c_ℓ hangsebesség a Hertz-Mindlin erőtvényre várt $p^{1/6}$ szerint skálázódik, míg a nyírási modulusból számolt c_t skálázása közelítőleg $p^{1/4}$. Ha ezt a súrlódásmentes eset szimulációival hasonlítjuk össze, ott a komp-

ressziós modulus skálázása kis nyomásra $B \sim p^{1/3}$, a nyírási modulusé $G \sim p^{2/3}$, így $c_\ell = \sqrt{[B + (4/3)G]/\rho} \sim p^{1/6}$, míg $c_t = \sqrt{G/\rho} \sim p^{1/3}$.

Kísérleti mérésekben $c_{\text{repül}}$ nyomásfüggésére gyakran nagyobb exponens értéket kaptak, vagy legalábbis sokszor eltérés adódott a $p^{1/6}$ skálázástól. Ennek fizikai magyarázata nem egyértelmű [108, 138, 139, 147]. Üvegolyók rendezetlen konfigurációira az eredmények függenek a mérési körülményektől, az α exponens látszólagos értéke a $c \sim p^\alpha$ skálázásban tipikusan 0.16 és 0.25 között változott. Az egyik mérés szerint ([145], amit az 53. ábrán is mutatunk) az alacsony nyomáson tapasztalt $p^{1/4}$ skálázás magasabb nyomásokon $p^{1/6}$ skálázásba vált át, míg sokkal nagyobb nyomásokon [152] $p^{1/4}$ skálázást mértek. Más mérésekben (szintén [145], annak 10. ábrája) a $c \sim p^{0.21}$ skálázás lefedte a mért nyomástartományt, míg egyes esetekben akár olyan nagy effektív exponens érték, mint $\alpha \approx 0.28$ is előfordult [153]. A homokban tapasztalt $\alpha \approx 0.25$ (például [154]) valószínűleg a nem-Hertz kontaktusokra (éles csúcsok) vezethető vissza [139], ami túlmutat ezen fejezet keretein.

A Hertz kontaktusokra a $p^{1/6}$ -tól eltérő effektív skálázásra egy gyakran említett másik magyarázat, hogy a nyomással nő a kontaktusok száma [138, 139, 111, 146, 147], és ez fokozatosan keményíti a konfigurációkat. Esetünkben ($\mu = 0.5$) ez az effektus nem jelentős (a koordinációs szám az erőhálózatban résztvevő részecskékre 3.2-től 3.5-ig változott), és nem okozott érzékelhető eltérést a repülésiidő-hangsebességre a $p^{1/6}$ skálázástól.

ÖSSZEFOGLALÁS

Ebben a munkában olyan statisztikus fizikai rendszereket vizsgálatával kapcsolatos eredményeimet foglaltam össze, amelyek nincsenek hőmérsékleti egyensúlyban: foglalkoztam többek között diffúzióval, diffúzió-dominált egyensúlytól távoli növekedési folyamatokkal, valamint atermális szemcsés anyagokkal.

A témák kiválasztásánál az az elv vezérelt, hogy minél több új fizikai ismeretet szerezzünk. Ez a stratégia természetes módon a problémák szélesebb spektrumához vezetett.

A bemutatott eredmények között az egyik legtöbb visszhangot az alacsony indexű fémkristályok felső rétegében végbemenő, vakanciák által hajtott diffúziós folyamat felismerése váltott ki (2. és 3. fejezet). Ez a munka a tudományos közösségen kívül a populáris média figyelmét is felkeltette¹⁴, talán azért is, mert a 15-ös lyuktologatós kirakójáték analógiája közérthetően megfogja a mechanizmus lényegét.

A szemcsés anyagok témakörében a két legjelentősebb eredmény a statikus szemcsés konfigurációk erőhálózatának univerzalitása, amelyet részecskéken való vektori erő-egyensúly határoz meg (11. fejezet); valamint az a felismerés, hogy a súrlódó szemcsés anyagok torlódási átmenetének is van kritikus pontja, mégpedig a nagy súrlódási együttható határesetében (12. fejezet).

Lényegesnek tartom a diffúzió-limitált aggregációval kapcsolatos munkáimat is, különösen az 5. és 7. fejezetben bemutatott eredményeket, amelyben választ adtunk jónéhány korábbi felvetésre: minden szempontból azt találtuk, hogy a diffúzió-limitált aggregáció konzisztens az egyszerű aszimptotikus skálázással, erős skálázási korrekció mellett.

Végül a 11. fejezet eredményét említeném, amely táguló térben vizsgált skálainvariáns folyamatokat, mint például diffúziót. Ennek potenciálisan igen érdekes alkalmazásai lehetnek, mint például a korai univerzum kozmológiájában, vagy a fajok élettér-terjeszkedésének és a genetikai állomány változásának kölcsönhatásában.

¹⁴ Az NRC Handelsblad és a Volkskrant holland napilapok tudományos rovata, a Science News és a Physics News válogatása, valamint több internetes és helyi újság.

Függelék

A. ÚJ TUDOMÁNYOS EREDMÉNYEK (TÉZISEK)

T1a. Részecske alapú numerikus modellezéssel megmutattam, hogy Cu(001) felületen a beültetett nyomjelző In atomok jellegzetes mozgását felületi vakanciák okozzák [S1, S2, S3, S4]. Megfelelő időfelbontású pásztázó alagútmikroszkóppal látható, hogy az In atomok hosszabb ideig egy helyben állnak, majd hirtelen több, akár 4-6 rácsállandó hosszúságú ugrást tesznek. Az egymáshoz közeli In atomok mozgása időben szinkronizált.

A fémkristály felső atomi rétegében diffundáló ritkán előforduló, de nagyon mobilis vakanciák milliszekundum nagyságrendű élettartamuk során két dimenziós véletlen bolyongást végeznek, áthelyezve akár többször is az útjukba eső összes atomot, köztük a nyomjelző atomokat. A következő vakancia megjelenéséig, ami szobahőmérsékleten tipikusan néhányszor 10 másodperc ideig tart, nem történik semmilyen mozgás.

A nyomjelző atomok ugrási hosszának eloszlását részecske alapú numerikus modellezés segítségével számoltam ki, mégpedig a valószínűségek közvetlen kiértékelésével, melynek kedvezőbbek a konvergencia tulajdonságai, mint a Monte-Carlo típusú módszereknek.

T1b. Felállítottam egy kontinuum modellt, amely leírja az alacsony indexű fémkristályok felső rétegébe ágyazott nyomjelző atomoknak a felületi vakanciák által okozott mozgását [S2, S3]. A modell azt jósolja, hogy a nyomjelző atomok ugrás hosszainak eloszlását nulladrendű módosított Bessel függvény írja le, amit a pásztázó alagútmikroszkóppal mért kísérleti eredmények, valamint az általam végzett részecske alapú numerikus modellezés is igazoltak.

Ezen kontinuum modell túlmutat a korábbi rács alapú nyomkövető részecske diffúzió számításokon, mivel figyelembe vesz több, az atomi rendszerben lényeges sajátosságot, különös tekintettel a vakanciák véges élettartamára.

T2. Diffúzió-limitált aggregáció (DLA) rácsmentes változatára kidolgozott zajcsökkentés módszerével, végesméret-skálázást felhasználva numerikus szimulációkban megmutattam, hogy a DLA fürtök – az irodalomban korábban megjelent eredményekkel ellentétben – nem multiskálázódnak, és az összes mért hosszúság dimenziójú mennyiség, az aktív zóna vastagságát is beleértve, aszimptotikusan azonosan skálázódik a fürt méretével [S5, S6].

A hosszúság dimenziójú mennyiségek skálázásában jelen van viszont egy erős szubdomináns tag, melynek hatványkitevője a numerikus mérés pontosságán belül az összes mért mennyiségre azonosnak adódott. Ez a skálázási korrekció okozhatta a korábbi kisebb skálájú szimulációk eredményeinek interpretációját.

- T3. A diffúzió-limitált aggregáció nemlineáris kiterjesztésére, a dielektromos letörés modellre (dielectric breakdown model, DBM) kidolgozott hatékony, mintavételezésen alapuló numerikus módszerrel megmértem az $\alpha_{\text{csúcs}}$ skálázási exponenst és a fraktál dimenziót az η nemlinearitási exponens függvényében [S7]. A kapott eredmények szerint (korábbi várakozással ellentétben) $\alpha_{\text{csúcs}}$ nem független η -tól $\eta \approx 1$ közelében, és a mérési adatok extrapolációja konzisztens az $\eta_c = 4$ állítással.

A mintavételezéses módszer alkalmas a diffúzió-dominált növekedési modellek multifraktál spektrumának (illetve annak egy részének) meghatározására is. A módszert használva meghatároztam a DLA $f(\alpha)$ multifraktál spektrumát kis α (vagyis $q \gtrsim 1$) értékekre [S7]. Az így kapott görbe nagyobb pontossággal kielégíti a Makarov tételt valamint Halsey elektrosztatikus skálázási törvényét mint a korábbi eredmények.

- T4. Nagy skálájú numerikus szimulációval megmutattam, hogy a diffúzió-limitált aggregáció fraktál dimenziója csatorna geometriában mérési hibán belül megegyezik a nyílt sík geometriában mért értékkel [S8].

Megmutattam továbbá, hogy a DLA fűrtjeinek konform leképezés alapján kiátlagolt alakja bár hasonlít, de nem egyezik meg a kis felületi feszültség alapján kiválasztott Saffman-Taylor megoldások alakjával sem csatorna geometriában [S8], sem 90° -os ék geometriában [S9]. Ez azt jelenti, hogy általánosságban nem igaz, hogy a diffúzió-dominált növekedés stochasztikus, zajos megoldásainak átlaga megegyezne a zaj nélküli egyenletek determinisztikus megoldásával.

- T5. Megmutattuk, hogy a lokálisan skálainvariáns struktúráknak egy nagy osztályára a radiális (vagy általánosan növekedő geometriában történő) növekedést le lehet képezni fix szélességű tartományban történő növekedésre [S10]. A leképezés előnye, hogy a fix szélességű tartományban történő növekedés numerikusan is és analitikusan is sokkal könnyebben kezelhető. Az egyik legfontosabb eredmény, hogy a skálainvariáns struktúrák egy jelentős részére a radiális növekedés aszimptotikus (végtelen időben történő) viselkedése a fix szélességű geometriában egy jól meghatározott, véges időnek felel meg, ami nagyban leegyszerűsíti a megközelítést.

- T6. Molekuladinamika szimulációim segítségével megmutattuk, hogy a szemcsés anyagok statikus erőhálózata skálainvariáns: a relatívan erős kontaktusokkal összekötött részecskefürtök skálázási tulajdonságokat mutatnak. Számos paraméter változtatása ellenére (nyomás, erőtvény, polidiszperzitás, súrlódás) a skálázási exponensek és a skálázási függvény azonos marad, ami így egy univerzalitási osztályt definiál [S11]. A mechanikai egyensúlyt kielégítő Edwards sokaság ebben az univerzalitási osztályban van, bizonyos egyszerűsített szemcsés modellek viszont nem.

- T7. Molekuladinamika szimulációim alapján megmutattuk, hogy a súrlódó rugalmas gömbökből álló szemcsés konfigurációk a súrlódásmentes esethez hasonlóan kritikusan viselkednek, és skálázási tulajdonságokat mutatnak, ha a koordinációs szám megközelíti az izosztatikus értéket. A rendszer tulajdonságait, mint például az anomális állapot-sűrűség spektrumot valamint a nyírási és térfogati rugalmassági modulus hányadosát

egy paraméterrel, a koordinációs szám izosztatikus értéktől való eltéréseivel jellemezhetjük. [S12] A sűrűdásmentes esettel ellentétben viszont az izosztatikus állapot nem következik be automatikusan az alacsony nyomás limeszében, hanem csak akkor, ha (tipikus preparációs protokoll esetén) a sűrűdési együttható nagyon nagy.

- T8. Különböző szemcsés konfigurációkban vizsgáltam impulzusok terjedését. Két dimenziós rendezetlen rendszerben numerikus szimulációimban azt tapasztaltam, hogy az impulzusra adott válasz lineárisan terjed időben, és nem az erőláncokat követi. A válaszjelet, ugyanúgy mint hasonló kísérletekben, egy kezdeti koherens részre és az azt követő zajos részre lehetett bontani. A válaszjel koherens részét vizsgálva numerikusan megmutattam, hogy a jel amplitúdója és szélessége skálázódik a megtett távolsággal. Azon kezdeti feltétel esetén, amikor az egyik fallal érintkező golyók véges kezdősebességgel indulnak, az amplitúdó exponense közelítőleg 1.5-nek adódott a két dimenziós rendezetlen rendszerre, a jel szélességének exponense pedig közelítőleg 1. Megmértem a repülési időből számolt hangsebesség nyomásfüggését, amely a vizsgált nyomástartományban $p^{1/6}$ szerint skálázódott. [S13]

A kapott eredményeket összevetettem kísérleti eredményekkel, valamint az egyforma golyókból álló egy dimenziós lánc, és a két dimenziós háromszögrács esetével, amelyekben az exponensek, sőt a hullám függvényalakja is analitikusan kiszámítható.

B. A TÉZISPONTOK ALAPJÁUL SZOLGÁLÓ SAJÁT TUDOMÁNYOS KÖZLEMÉNYEK

- [S1] van Gastel R, Somfai E, van Saarloos W, Frenken JWM:
A giant atomic slide-puzzle - Atoms crammed tightly together in metal crystal surfaces are surprisingly mobile
Nature **408**, 665-665 (2000) [37 független hivatkozás]
- [S2] van Gastel R, Somfai E, van Albada SB, van Saarloos W, Frenken JWM:
Nothing moves a surface: Vacancy mediated surface diffusion
Phys. Rev. Lett. **86**, 1562-1565 (2001) [93 független hivatkozás]
- [S3] Somfai E, van Gastel R, van Albada SB, van Saarloos W, Frenken JWM:
Vacancy diffusion in the Cu(001) surface II: Random walk theory
Surf. Sci. **521**, 26-33 (2002) [14 független hivatkozás]
- [S4] van Gastel R, Somfai E, van Albada SB, van Saarloos W, Frenken JWM:
Vacancy diffusion in the Cu(001) surface I: an STM study
Surf. Sci. **521**, 10-25 (2002) [31 független hivatkozás]
- [S5] Ball RC, Bowler NE, Sander LM, Somfai E:
Off-lattice noise reduction and the ultimate scaling of diffusion-limited aggregation in two dimensions
Phys. Rev. E **66**, 026109 (2002) [8 független hivatkozás]
- [S6] Somfai E, Ball RC, Bowler NE, Sander LM:
Correction to scaling analysis of diffusion-limited aggregation
Physica A **325**, 19-25 (2003) [7 független hivatkozás]
- [S7] Somfai E, Goold NR, Ball RC, DeVita JP, Sander LM:
Growth by random walker sampling and scaling of the dielectric breakdown model
Phys. Rev. E **70**, 051403 (2004) [0 független hivatkozás]
- [S8] Somfai E, Ball RC, DeVita JP, Sander LM:
Diffusion-limited aggregation in channel geometry
Phys. Rev. E **68**, 020401 (2003) [10 független hivatkozás]
- [S9] Sander LM, Somfai E:
Random walks, diffusion limited aggregation in a wedge, and average conformal maps
Chaos **15**, 026109 (2005) [5 független hivatkozás]
- [S10] Ali A, Grosskinsky S, Ball RC, Somfai E:
Scale-invariant growth processes in expanding space
Phys. Rev. E **87**, 020102(R) (2013) [1 független hivatkozás]

- [S11] Ostojic S, Somfai E, Nienhuis B :
Scale invariance and universality of force networks in static granular matter
Nature **439**, 828-830 (2006) [67 független hivatkozás]
- [S12] Somfai E, van Hecke M, Ellenbroek WG, Shundyak K, van Saarloos W :
Critical and noncritical jamming of frictional grains
Phys. Rev. E **75**, 020301 (2007) [65 független hivatkozás]
- [S13] Somfai E, Roux JN, Snoeijer JH, van Hecke M, van Saarloos W :
Elastic wave propagation in confined granular systems
Phys. Rev. E **72**, 021301 (2005) [39 független hivatkozás]

C. AZ ÉRTEKEZÉS TÉMÁJÁHOZ KAPCSOLÓDÓ EGYÉB PUBLIKÁCIÓS TEVÉKENYSÉG

A. Referált folyóiratcikkek nemzetközi folyóiratban

- [E1] Frenken JWM, van Gastel R, van Albada SB, Somfai E, van Saarloos W: *Diffusion in a surface: the atomic slide puzzle*; Appl. Phys. A-Mater. Sci. Process. **75**, 11-15 (2002)
- [E2] Ball RC, Somfai E: *Theory of diffusion controlled growth*; Phys. Rev. Lett. **89**, 135503 (2002)
- [E3] Ball RC, Somfai E: *Diffusion-controlled growth: Theory and closure approximations*; Phys. Rev. E **67**, 021401 (2003)
- [E4] Goold NR, Somfai E, Ball RC: *Anisotropic diffusion limited aggregation in three dimensions: Universality and nonuniversality*; Phys. Rev. E **72**, 031403 (2005)
- [E5] Snoeijer JH, van Hecke M, Somfai E, van Saarloos W: *Force and weight distributions in granular media: Effects of contact geometry*; Phys. Rev. E **67**, 030302 (2003)
- [E6] Snoeijer JH, van Hecke M, Somfai E, van Saarloos W: *Packing geometry and statistics of force networks in granular media*; Phys. Rev. E **70**, 011301 (2004)
- [E7] Ellenbroek WG, Somfai E, van Hecke M, van Saarloos W: *Critical scaling in linear response of frictionless granular packings near jamming*; Phys. Rev. Lett. **97**, 258001 (2006)
- [E8] Somfai E, Morozov AN, van Saarloos W: *Modeling viscoelastic flow with discrete methods*; Physica A **362**, 93-97 (2006)
- [E9] van de Meent JW, Morozov A, Somfai E, Sultan E, van Saarloos W: *Coherent structures in dissipative particle dynamics simulations of the transition to turbulence in compressible shear flows*; Phys. Rev. E **78**, 015701 (2008)
- [E10] Adams DA, Sander LM, Somfai E, Ziff RM: *The harmonic measure of diffusion-limited aggregates including rare events*; EPL **87**, 20001 (2009)
- [E11] Sultan E, van de Meent JW, Somfai E, Morozov AN, van Saarloos W: *Polymer rheology simulations at the meso- and macroscopic scale*; EPL **90**, 64002 (2010)
- [E12] Börzsönyi T, Szabó B, Törös G, Wegner S, Török J, Somfai E, Bien T, Stannarius R: *Orientational Order and Alignment of Elongated Particles Induced by Shear*; Phys. Rev. Lett. **108**, 228302 (2012)
- [E13] Börzsönyi T, Szabó B, Wegner S, Harth K, Török J, Somfai E, Bien T, Stannarius R: *Shear-induced alignment and dynamics of elongated granular particles*; Phys. Rev. E **86**, 051304 (2012)

- [E14] Ali A, Somfai E, Grosskinsky S: *Reproduction-time statistics and segregation patterns in growing populations*; Phys. Rev. E **85**, 021923 (2012)
- [E15] Ali A, Ball R, Grosskinsky S, Somfai E: *Interacting Particle Systems in Time-Dependent Geometries*; J. Stat. Mech.-Theory Exp., P09006 (2013)
- [E16] Wegner S, Stannarius R, Boese A, Rose G, Szabó B, Somfai E, Börzsönyi T: *Effects of grain shape on packing and dilatancy of sheared granular materials*; Soft Matter **10**, 5157-5167 (2014)
- [E17] Szabó B, Török J, Somfai E, Wegner S, Stannarius R, Böse A, Rose G, Angenstein F, Börzsönyi T: *Evolution of shear zones in granular materials*; Phys. Rev. E **90**, 032205 (2014)

B. Könyvfejezet idegen nyelven

- [E18] van Gastel R, Frenken JWM, Swartzentruber BS, Somfai E, van Saarloos W: *Diffusion of vacancies in metal surfaces: theory and experiment*; in: The Chemical Physics of Solid Surfaces, vol. 11, pp. 351-370 (2003)

C. Konferenciakiadványok idegen nyelven

- [E19] Somfai E, van Saarloos W, Roux JN: *Wave propagation in force chains*; in: Powders and Grains 2001, pp. 117-119 (2001)
- [E20] Ellenbroek WG, Somfai E, van Saarloos W, van Hecke M: *Force response as a probe of the jamming transition*; in: 5th International Conference on the Micromechanics of Granular Media: Powders and Grains 2005, pp. 377-380 (2005)

D. ÁLTALÁNOS IRODALOMJEGYZÉK

A. Monográfiák és összefoglaló cikkek

- [1] Mandelbrot BB: The fractal geometry of nature; (Freeman, New York, 1982)
- [2] Vicsek T: Fractal growth phenomena; (2nd ed, World Scientific, Singapore, 1992)
- [3] Barabási AL, Stanley HE: Fractal Concepts in Surface Growth; (Cambridge University Press, Cambridge, 1995)
- [4] Jaeger HM, Nagel SR, Behringer RP: Granular solids, liquids, and gases; Rev. Mod. Phys. **68**, 1259-1273 (1996)
- [5] Sander LM: Diffusion-limited aggregation: a kinetic critical phenomenon?; Contemp. Phys. **41**, 203-218 (2000)
- [6] Allen MP, Tildesley DJ: Computer Simulation of Liquids; (Oxford University Press, Oxford, 1987)
- [7] Langer JS: Instabilities and pattern-formation in crystal-growth; Rev. Mod. Phys. **52**, 1-28 (1980)
- [8] Cross MC, Hohenberg PC: Pattern-formation outside of equilibrium; Rev. Mod. Phys. **65**, 851-1112 (1993)
- [9] Korolev KS, Avlund M, Hallatschek O, Nelson DR: Genetic demixing and evolution in linear stepping stone models; Rev. Mod. Phys. **82**, 1691-1718 (2010)
- [10] Johnson KL: Contact Mechanics; (Cambridge University Press, Cambridge, 1987)
- [11] Stauffer D, Aharony A: Introduction to Percolation Theory; (Taylor and Francis, London, 1991)
- [12] Ódor G: Universality classes in nonequilibrium lattice systems; Rev. Mod. Phys. **76**, 663-724 (2004)

B. Szakcikkék

- [13] Jeong HC, Williams ED: *Steps on surfaces: experiment and theory*; Surf. Sci. Rep. **34**, 171-294 (1999)
- [14] van der Vegt HA, Breeman M, Ferrer S, Etgens VH, Torrelles X, Fejardo P, Vlieg E: *Indium-induced lowering of the Schwoebel barrier in the homoepitaxial growth of Cu(100)*; Phys. Rev. B **51**, 14806-14809 (1995)
- [15] Breeman M, Boerma DO: *Sites, mobilities, and cluster formation of In atoms on a stepped Cu(100) surface*; Phys. Rev. B **46**, 1703-1709 (1992)

- [16] Breeman M, Boerma DO: *Atomic mobilities on a stepped Cu(100) surface*; Surf. Sci. **287**, 881-885 (1993)
- [17] Hoogeman MS, van Loon DG, Loos RWM, Ficke HG, de Haas E, van der Linden JJ, Zeijlemaker H, Kuipers L, Chang MF, Klik MAJ, Frenken JWM: *Design and performance of a programmable-temperature scanning tunneling microscope*; Rev. Sci. Instrum. **69**, 2072-2080 (1998)
- [18] Daw MS, Baskes MI: *Embedded-atom method - derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals*; Phys. Rev. B **29**, 6443-6453 (1984)
- [19] Finnis MW, Sinclair JE: *A simple experimental n-body potential for transition-metals*; Philos. Mag. A **50**, 45-55 (1984)
- [20] Brummelhuis MJAM, Hilhorst HJ: *Single-vacancy induced motion of a tracer particle in a two-dimensional lattice gas*; J. Stat. Phys. **53**, 249-278 (1988)
- [21] Toroczkai Z: *The Brownian vacancy driven walk*; Int. J. Mod. Phys. B **11**, 3343-3374 (1997)
- [22] Newman TJ: *Continuum theory of vacancy-mediated diffusion*; Phys. Rev. B **59**, 13754-13763 (1999)
- [23] Benichou O, Oshanin G: *Atomic slide puzzle: Self-diffusion of an impure atom*; Phys. Rev. E **64**, 020103 (2001)
- [24] Grier D, Ben-Jacob E, Clarke R, Sander LM: *Morphology and microstructure in electrochemical deposition of zinc*; Phys. Rev. Lett. **56**, 1264-1267 (1986)
- [25] Brune H, Romainczyk C, Roder H, Kern K: *Mechanism of the transition from fractal to dendritic growth of surface aggregates*; Nature **369**, 469-471 (1994)
- [26] Praud O, Swinney HL: *Fractal dimension and unscreened angles measured for radial viscous fingering*; Phys. Rev. E **72**, 011406 (2005)
- [27] Saffman PG, Taylor G: *The Penetration of a Fluid into a Porous Medium or Hele-Shaw Cell Containing a More Viscous Liquid*; Proc. R. Soc. A **245**, 312-329 (1958)
- [28] Fujikawa H, Matsushita M: *Fractal growth of Bacillus-Subtilis on agar plates*; J. Phys. Soc. Jpn. **58**, 3875-3878 (1989)
- [29] Ben-Jacob E: *From snowflake formation to growth of bacterial colonies II: Cooperative formation of complex colonial patterns*; Contemp. Phys. **38**, 205-241 (1997)
- [30] Mullins WW, Sekerka RF: *Morphological Stability of a Particle Growing by Diffusion or Heat Flow*; J. Appl. Phys. **34**, 323-328 (1963)

- [31] Mullins WW, Sekerka RF: *Stability of a Planar Interface During Solidification of a Dilute Binary Alloy*; J. Appl. Phys. **35**, 444-451 (1964)
- [32] Shraiman B, Bensimon D: *Singularities in nonlocal interface dynamics*; Phys. Rev. A **30**, 2840-2842 (1984)
- [33] Witten TA, Sander LM: *Diffusion-limited aggregation, a kinetic critical phenomenon*; Phys. Rev. Lett. **47**, 1400-1403 (1981)
- [34] Witten TA, Sander LM: *Diffusion-limited aggregation*; Phys. Rev. B **27**, 5686-5697 (1983)
- [35] Meakin P: *Formation of fractal clusters and networks by irreversible diffusion-limited aggregation*; Phys. Rev. Lett. **51**, 1119-1122 (1983)
- [36] Vicsek T: *Pattern-formation in diffusion-limited aggregation*; Phys. Rev. Lett. **53**, 2281-2284 (1984)
- [37] Plischke M, Racz Z: *Active zone of growing clusters - Diffusion-limited aggregation and the Eden model*; Phys. Rev. Lett. **53**, 415-418 (1984)
- [38] Ball RC, Brady RM: *Large-scale lattice effect in diffusion-limited aggregation*; J. Phys. A-Math. Gen. **18**, L809-L813 (1985)
- [39] Kertész J, Vicsek T: *Diffusion-limited aggregation and regular patterns - fluctuations versus anisotropy*; J. Phys. A-Math. Gen. **19**, L257-L262 (1986)
- [40] Hastings MB, Levitov LS: *Laplacian growth as one-dimensional turbulence*; Physica D **116**, 244-252 (1998)
- [41] Davidovitch B, Hentschel HGE, Olami Z, Procaccia I, Sander LM, Somfai E: *Diffusion limited aggregation and iterated conformal maps*; Phys. Rev. E **59**, 1368-1378 (1999)
- [42] Paterson L: *Diffusion-limited aggregation and 2-fluid displacement in porous-media*; Phys. Rev. Lett. **52**, 1621-1624 (1984)
- [43] Mathiesen J, Procaccia I, Swinney HL, Thrasher M: *The universality class of diffusion-limited aggregation and viscous-limited aggregation*; Europhys. Lett. **76**, 257-263 (2006)
- [44] Niemeyer L, Pietronero L, Wiesmann HJ: *Fractal dimension of dielectric-breakdown*; Phys. Rev. Lett. **52**, 1033-1036 (1984)
- [45] Saffman PG: *Viscous fingering in Hele-Shaw cells*; J. Fluid Mech. **173**, 73-94 (1986)
- [46] Halsey TC, Meakin P, Procaccia I: *Scaling structure of the surface-layer of diffusion-limited aggregates*; Phys. Rev. Lett. **56**, 854-857 (1986)

- [47] Halsey TC, Jensen MH, Kadanoff LP, Procaccia I, Shraiman BI: *Fractal measures and their singularities - The characterization of strange sets*; Phys. Rev. A **33**, 1141-1151 (1986)
- [48] Turkevich LA, Scher H: *Occupancy-probability scaling in diffusion-limited aggregation*; Phys. Rev. Lett. **55**, 1026-1029 (1985)
- [49] Halsey TC: *Diffusion-limited aggregation as branched growth*; Phys. Rev. Lett. **72**, 1228-1231 (1994)
- [50] Hastings MB: *Growth exponents with 3.99 walkers*; Phys. Rev. E **64**, 046104 (2001)
- [51] Coniglio A, Zannetti M: *Novel dynamic scaling in kinetic growth phenomena*; Physica A **163**, 325-333 (1990)
- [52] Amitrano C, Coniglio A, Meakin P, Zannetti M: *Multiscaling in diffusion-limited aggregation*; Phys. Rev. B **44**, 4974-4977 (1991)
- [53] Tang C: *Diffusion-limited aggregation and the Saffman-Taylor problem*; Phys. Rev. A **31**, 1977-1979 (1985)
- [54] Barker PW, Ball RC: *Real-space renormalization of diffusion-limited aggregation*; Phys. Rev. A **42**, 6289-6292 (1990)
- [55] Ossadnik P: *Multiscaling analysis of large-scale off-lattice DLA*; Physica A **176**, 454-462 (1991)
- [56] Ossadnik P: *Multiscaling analysis and width of the active zone of large off-lattice dla*; Physica A **195**, 319-323 (1993)
- [57] Lee J, Schwarzer S, Coniglio A, Stanley HE: *Localization of growth sites in diffusion-limited-aggregation clusters - multifractality and multiscaling*; Phys. Rev. E **48**, 1305-1315 (1993)
- [58] Eden M: *A two-dimensional growth process*; in: Proc. Fourth Berkeley Symp. on Math. Statist. and Prob., Vol. 4, pp. 223-239 (1961)
- [59] Hastings MB: *Fractal to nonfractal phase transition in the dielectric breakdown model*; Phys. Rev. Lett. **87**, 175502 (2001)
- [60] Halsey TC: *Branched growth with n approximate to 4 walkers*; Phys. Rev. E **65**, 021104 (2002)
- [61] Sanchez A, Guinea F, Sander LM, Hakim V, Louis E: *Growth and forms of laplacian aggregates*; Phys. Rev. E **48**, 1296-1304 (1993)
- [62] Somfai E, Sander LM, Ball RC: *Scaling and crossovers in diffusion aggregation*; Phys. Rev. Lett. **83**, 5523-5526 (1999)

- [63] Makarov NG: *On the distortion of boundary sets under conformal-mappings*; Proc. London Math. Soc. **51**, 369-384 (1985)
- [64] Halsey TC: *Some consequences of an equation of motion for diffuse growth*; Phys. Rev. Lett. **59**, 2067-2070 (1987)
- [65] Ball RC, Spivack OR: *The interpretation and measurement of the $f(\alpha)$ spectrum of a multifractal measure*; J. Phys. A-Math. Gen. **23**, 5295-5307 (1990)
- [66] Jensen MH, Levermann A, Mathiesen J, Procaccia I: *Multifractal structure of the harmonic measure of diffusion-limited aggregates*; Phys. Rev. E **65**, 046109 (2002)
- [67] Jensen MH, Mathiesen J, Procaccia I: *Scaling exponent of the maximum growth probability in diffusion-limited aggregation*; Phys. Rev. E **67**, 042402 (2003)
- [68] Meakin P, Family F: *Diverging length scales in diffusion-limited aggregation*; Phys. Rev. A **34**, 2558-2560 (1986)
- [69] Argoul F, Arneodo A, Grasseau G, Swinney HL: *Self-similarity of diffusion-limited aggregates and electrodeposition clusters*; Phys. Rev. Lett. **61**, 2558-2561 (1988)
- [70] Evertsz C: *Self-affine nature of dielectric-breakdown model clusters in a cylinder*; Phys. Rev. A **41**, 1830-1842 (1990)
- [71] Kol B, Aharony A: *Diffusion-limited aggregation as a Markovian process: Bond-sticking conditions*; Phys. Rev. E **62**, 2531-2546 (2000)
- [72] Kol B, Aharony A: *Diffusion-limited aggregation as Markovian process: Site-sticking conditions*; Phys. Rev. E **63**, 046117 (2001)
- [73] Shraiman BI: *Velocity selection and the Saffman-Taylor problem*; Phys. Rev. Lett. **56**, 2028-2031 (1986)
- [74] Hong DC, Langer JS: *Analytic theory of the selection mechanism in the Saffman-Taylor problem*; Phys. Rev. Lett. **56**, 2032-2035 (1986)
- [75] Combescot R, Dombre T, Hakim V, Pomeau Y, Pumir A: *Shape selection of Saffman-Taylor fingers*; Phys. Rev. Lett. **56**, 2036-2039 (1986)
- [76] Arneodo A, Couder Y, Grasseau G, Hakim V, Rabaud M: *Uncovering the analytical Saffman-Taylor finger in unstable viscous fingering and diffusion-limited aggregation*; Phys. Rev. Lett. **63**, 984-987 (1989)
- [77] Arneodo A, Elezgaray J, Tabard M, Tallet F: *Statistical analysis of off-lattice diffusion-limited aggregates in channel and sector geometries*; Phys. Rev. E **53**, 6200-6223 (1996)

- [78] Thome H, Rabaud M, Hakim V, Couder Y: *The Saffman-Taylor instability - from the linear to the circular geometry*; Phys. Fluids A **1**, 224-240 (1989)
- [79] Tu YH: *Saffman-Taylor problem in sector geometry - solution and selection*; Phys. Rev. A **44**, 1203-1210 (1991)
- [80] Kessler DA, Olami Z, Oz J, Procaccia I, Somfai E, Sander LM: *Diffusion-limited aggregation and viscous fingering in a wedge: Evidence for a critical angle*; Phys. Rev. E **57**, 6913-6916 (1998)
- [81] Herrmann J: *Diffusion in the general theory of relativity*; Phys. Rev. D **82**, 024026 (2010)
- [82] Klein Y, Efrati E, Sharon E: *Shaping of elastic sheets by prescription of non-Euclidean metrics*; Science **315**, 1116-1120 (2007)
- [83] Kim J, Hanna JA, Byun M, Santangelo CD, Hayward RC: *Designing Responsive Buckled Surfaces by Halftone Gel Lithography*; Science **335**, 1201-1205 (2012)
- [84] Lee H, Zhang J, Jiang H, Fang NX: *Prescribed Pattern Transformation in Swelling Gel Tubes by Elastic Instability*; Phys. Rev. Lett. **108**, 214304 (2012)
- [85] de la Torre AC, Maltz A, Martin HO, Catuogno P, Garcia-Mata I: *Random walk with an exponentially varying step*; Phys. Rev. E **62**, 7748-7754 (2000)
- [86] Krapivsky PL, Redner S: *Random walk with shrinking steps*; Am. J. Phys. **72**, 591-598 (2004)
- [87] Rador T: *Random walkers with shrinking steps in d dimensions and their long term memory*; Phys. Rev. E **74**, 051105 (2006)
- [88] Hallatschek O, Nelson DR: *Life at the front of an expanding population*; Evolution **64**, 193-206 (2010)
- [89] Lehe R, Hallatschek O, Peliti L: *The Rate of Beneficial Mutations Surfing on the Wave of a Range Expansion*; PLoS Comput. Biol. **8**, e1002447 (2012)
- [90] Derrida B, Dickman R: *On the interface between 2 growing Eden clusters*; J. Phys. A-Math. Gen. **24**, L191-L195 (1991)
- [91] Saito Y, Mullerkrumbhaar H: *Critical phenomena in morphology transitions of growth-models with competition*; Phys. Rev. Lett. **74**, 4325-4328 (1995)
- [92] Hallatschek O, Hersen P, Ramanathan S, Nelson DR: *Genetic drift at expanding frontiers promotes gene segregation*; Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A. **104**, 19926-19930 (2007)

- [93] Ferrari PA, Martin JB, Pimentel LPR: *Roughening and inclination of competition interfaces*; Phys. Rev. E **73**, 031602 (2006)
- [94] Lavrentovich MO, Korolev KS, Nelson DR: *Radial Domany-Kinzel models with mutation and selection*; Phys. Rev. E **87**, 012103 (2013)
- [95] Abe S, Okamoto Y: *Nonextensive Statistical Mechanics and Its Applications*; (Springer, Heidelberg, 2001)
- [96] Lebovka NI, Vygornitskii NV: *How does the geometry affect the criticality in two-component spreading phenomena?*; J. Phys. A-Math. Gen. **31**, 9199-9208 (1998)
- [97] Shlesinger MF, Zaslavsky GM, Frisch U: *Lévy Flights and Related Topics in Physics*; (Springer, Berlin, 1995)
- [98] Biagini F, Hu Y, Øksendal B, Zhang T: *Stochastic Calculus for Fractional Brownian Motion and Applications*; (Springer, Berlin, 2010)
- [99] Alemany PA, ben-Avraham D: *Inter-particle distribution-functions for one-species diffusion-limited annihilation, $A+A\rightarrow 0$* ; Phys. Lett. A **206**, 18-25 (1995)
- [100] Munasinghe R, Rajesh R, Tribe R, Zaboronski O: *Multi-scaling of the n -point density function for coalescing Brownian motions*; Commun. Math. Phys. **268**, 717-725 (2006)
- [101] Kirkpatrick S, Gelatt CD, Vecchi MP: *Optimization by simulated annealing*; Science **220**, 671-680 (1983)
- [102] Henann DL, Kamrin K: *A predictive, size-dependent continuum model for dense granular flows*; Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A. **110**, 6730-6735 (2013)
- [103] Moreau JJ: *Some numerical-methods in multibody dynamics - application to granular-materials*; Eur. J. Mech. A-Solids **13**, 93-114 (1994)
- [104] Radjai F, Richefeu V: *Contact dynamics as a nonsmooth discrete element method*; Mech. Mater. **41**, 715-728 (2009)
- [105] Luding S, Herrmann HJ, Blumen A: *Simulations of 2-dimensional arrays of beads under external vibrations - scaling behavior*; Phys. Rev. E **50**, 3100-3108 (1994)
- [106] Miller S, Luding S: *Event-driven molecular dynamics in parallel*; J. Comput. Phys. **193**, 306-316 (2004)
- [107] Cundall PA, Strack ODL: *Discrete numerical-model for granular assemblies*; Geotechnique **29**, 47-65 (1979)
- [108] Velicky B, Caroli C: *Pressure dependence of the sound velocity in a two-dimensional lattice of Hertz-Mindlin balls: Mean-field description*; Phys. Rev. E **65**, 021307 (2002)

- [109] Majmudar TS, Behringer RP: *Contact force measurements and stress-induced anisotropy in granular materials*; Nature **435**, 1079-1082 (2005)
- [110] Liu AJ, Nagel SR: *Nonlinear dynamics - Jamming is not just cool any more*; Nature **396**, 21-22 (1998)
- [111] O'Hern CS, Silbert LE, Liu AJ, Nagel SR: *Jamming at zero temperature and zero applied stress: The epitome of disorder*; Phys. Rev. E **68**, 011306 (2003)
- [112] O'Hern CS, Langer SA, Liu AJ, Nagel SR: *Random packings of frictionless particles*; Phys. Rev. Lett. **88**, 075507 (2002)
- [113] Mueth DM, Jaeger HM, Nagel SR: *Force distribution in a granular medium*; Phys. Rev. E **57**, 3164-3169 (1998)
- [114] Blair DL, Mueggenburg NW, Marshall AH, Jaeger HM, Nagel SR: *Force distributions in three-dimensional granular assemblies: Effects of packing order and interparticle friction*; Phys. Rev. E **63**, 041304 (2001)
- [115] Erikson JM, Mueggenburg NW, Jaeger HM, Nagel SR: *Force distributions in three-dimensional compressible granular packs*; Phys. Rev. E **66**, 040301 (2002)
- [116] Fortuin C, Kasteleyn P: *On the random-cluster model: I. Introduction and relation to other models*; Physica **57**, 536-564 (1972)
- [117] Edwards SF, Oakeshott RBS: *Theory of powders*; Physica A **157**, 1080-1090 (1989)
- [118] Makse HA, Kurchan J: *Testing the thermodynamic approach to granular matter with a numerical model of a decisive experiment*; Nature **415**, 614-617 (2002)
- [119] Snoeijer JH, Vlugt TJH, van Hecke M, van Saarloos W: *Force network ensemble: A new approach to static granular matter*; Phys. Rev. Lett. **92**, 054302 (2004)
- [120] Liu CH, Nagel SR, Schecter DA, Coppersmith SN, Majumdar S, Narayan O, Witten TA: *Force fluctuations in bead packs*; Science **269**, 513-515 (1995)
- [121] Coppersmith SN, Liu C, Majumdar S, Narayan O, Witten TA: *Model for force fluctuations in bead packs*; Phys. Rev. E **53**, 4673-4685 (1996)
- [122] Da Silva M, Rajchenbach J: *Stress transmission through a model system of cohesionless elastic grains*; Nature **406**, 708-710 (2000)
- [123] Ostojic S, Vlugt TJH, Nienhuis B: *Universal anisotropy in force networks under shear*; Phys. Rev. E **75**, 030301 (2007)
- [124] Moukarzel CF: *Isostatic phase transition and instability in stiff granular materials*; Phys. Rev. Lett. **81**, 1634-1637 (1998)

- [125] Alexander S: *Amorphous solids: Their structure, lattice dynamics and elasticity*; Phys. Rep. **296**, 65-236 (1998)
- [126] Tanguy A, Wittmer JP, Leonforte F, Barrat JL: *Continuum limit of amorphous elastic bodies: A finite-size study of low-frequency harmonic vibrations*; Phys. Rev. B **66**, 174205 (2002)
- [127] Silbert LE, Liu AJ, Nagel SR: *Vibrations and diverging length scales near the unjamming transition*; Phys. Rev. Lett. **95**, 098301 (2005)
- [128] Wyart M, Nagel SR, Witten TA: *Geometric origin of excess low-frequency vibrational modes in weakly connected amorphous solids*; Europhys. Lett. **72**, 486-492 (2005)
- [129] Wyart M, Silbert LE, Nagel SR, Witten TA: *Effects of compression on the vibrational modes of marginally jammed solids*; Phys. Rev. E **72**, 051306 (2005)
- [130] Silbert LE, Ertas D, Grest GS, Halsey TC, Levine D: *Geometry of frictionless and frictional sphere packings*; Phys. Rev. E **65**, 031304 (2002)
- [131] Kasahara A, Nakanishi H: *Isostaticity and mechanical response of two-dimensional granular piles*; Phys. Rev. E **70**, 051309 (2004)
- [132] Shundyak K, van Hecke M, van Saarloos W: *Force mobilization and generalized isostaticity in jammed packings of frictional grains*; Phys. Rev. E **75**, 010301 (2007)
- [133] Zhang HP, Makse HA: *Jamming transition in emulsions and granular materials*; Phys. Rev. E **72**, 011301 (2005)
- [134] Unger T, Kertész J, Wolf DE: *Force indeterminacy in the jammed state of hard disks*; Phys. Rev. Lett. **94**, 178001 (2005)
- [135] Makse HA, Gland N, Johnson DL, Schwartz L: *Granular packings: Nonlinear elasticity, sound propagation, and collective relaxation dynamics*; Phys. Rev. E **70**, 061302 (2004)
- [136] Wyart M: *On the rigidity of amorphous solids*; Ann. Phys.-Paris **30**, 1 (2005)
- [137] Howell DW, Behringer RP, Veje CT: *Fluctuations in granular media*; Chaos **9**, 559-572 (1999)
- [138] Makse HA, Gland N, Johnson DL, Schwartz LM: *Why effective medium theory fails in granular materials*; Phys. Rev. Lett. **83**, 5070-5073 (1999)
- [139] Goddard JD: *Nonlinear elasticity and pressure-dependent wave speeds in granular media*; Proc. R. Soc. London Ser. A **430**, 105-131 (1990)
- [140] Coste C, Falcon E, Fauve S: *Solitary waves in a chain of beads under Hertz contact*; Phys. Rev. E **56**, 6104-6117 (1997)

- [141] Jia X, Caroli C, Velicky B: *Ultrasound propagation in externally stressed granular media*; Phys. Rev. Lett. **82**, 1863-1866 (1999)
- [142] Liu CH, Nagel SR: *Sound in sand*; Phys. Rev. Lett. **68**, 2301-2304 (1992)
- [143] Liu CH, Nagel SR: *Sound in a granular material - disorder and nonlinearity*; Phys. Rev. B **48**, 15646-15650 (1993)
- [144] Liu CH: *Spatial patterns of sound-propagation in sand*; Phys. Rev. B **50**, 782-794 (1994)
- [145] Jia X, Mills P: *Sound propagation in dense granular materials*; in: Powders and Grains 2001, pp. 105-112 (2001)
- [146] Gilles B, Coste C: *Low-frequency behavior of beads constrained on a lattice*; Phys. Rev. Lett. **90**, 174302 (2003)
- [147] Roux JN: *Contact disorder and nonlinear elasticity of granular packings: A simple model*; in: Powders and Grains 1997, pp. 215-218 (1997)
- [148] Nesterenko VF: *Propagation of nonlinear compression pulses in granular media*; J. Appl. Mech. Tech. Phys. **24**, 733-743 (1983)
- [149] Hinch EJ, Saint-Jean S: *The fragmentation of a line of balls by an impact*; Proc. R. Soc. A **455**, 3201-3220 (1999)
- [150] Rosas A, Lindenberg K: *Pulse dynamics in a chain of granules with friction*; Phys. Rev. E **68**, 041304 (2003)
- [151] Rosas A, Lindenberg K: *Pulse velocity in a granular chain*; Phys. Rev. E **69**, 037601 (2004)
- [152] Domenico SN: *Elastic properties of unconsolidated porous sand reservoirs*; Geophysics **42**, 1339-1368 (1977)
- [153] Sharafipour M, Dano C, Hicher PY: *Wave velocities in assemblies of glass beads using bender-extender elements*; in: 17th ASCE engineering mechanics conference, University of Delaware, Newark, DE, 16 (2004)
- [154] Hicher PY: *Elastic properties of soils*; J. Geotech. Eng.-ASCE **122**, 641-648 (1996)

KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

Köszönöm szüleimnek, hogy elindítottak azon az életpályán, ami a kutatói hivatáshoz vezetett. Tanáraink közül legtöbbet kémiatáráromnak, Schweighofferné Gizi néninek köszönhetek, aki fáradhatatlan lelkesedéssel motivált sokunkat. Diploma témavezetőm, Vicsek Tamás intuitív meglátásával új dimenziót nyitott meg számomra a fizika megismerésében. PhD témavezetőm, Leonard Sander vezetésével tanultam meg a kutatói munka lényegét.

Köszönöm munkatársaimnak, akikkel a posztdoktori és azt követő időszakban dolgozhattam együtt, az ötleteiket, munkájukat, biztatásukat. Külön köszönet illeti posztdoktori mentoraimat: Wim van Saarloostól sokat tanultam arról, hogy hogyan kell elméleti problémákat kezelni, Robin Ball gyökeresen eredeti ötletei számos alkalommal új utat törtek.

Köszönettel tartozom a Wigner FK vezetésének, hogy lehetővé tették két éve a hazatérésemet. Köszönöm jelenlegi munkatársaimnak, köztük Szabó Balázsnak, Gillemot Katalinnak, Buka Ágnesnek, Éber Nándornak, Salamon Péternek, Tót-Katona Tibornak, Fodor-Csorba Katalinnak, Kenderesi Viktornak, Jánossy Istvánnak, valamint Donkó Zoltánnak a kellemes és konstruktív munkahelyi légkört; legtöbbet Börzsönyi Tamásnak köszönhetek, aki számtalan alkalommal egyengette a beilleszkedésemet. Köszönöm Iglói Ferencnek, hogy elolvasta és tanácsaival segítette a disszertáció megírását. Köszönettel tartozom Kmety Andreának publikációim és hivatkozásaim rendbetételéért az MTMT rendszerben.

Különösen köszönöm feleségemnek, Sinkovics Annamáriának, hogy mindig mellettem állt, az életem legnehezebb időszakaiban is kitartóan, töretlenül segített és bátorított. Köszönöm, hogy javaslataival segítette strukturálttá és érthetővé tenni ezt a disszertációt. Feleségemnek, valamint kisfiamnak, Manónak és kislányomnak, Barkának köszönöm az utóbbi időszakban a türelmüket és támogatásukat.