

MANGAN DENTRİTLERİ VE DİFÜZYON İLE SINIRLI KÜMELEŞME MODELİ

Mehmet BAYIRLI

Gazi Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizik Anabilimdalı, Ankara.

* Bahçeli Evler Mh. Zübeyde Hanım Sk. No:12/6, Balıkesir

ÖZ

Bu çalışmada, manyezit cevheri yüzeylerindeki mangan kümelerinin nasıl büyüyerek oluştuğu, difüzyonla sınırlı kümeleşme (DLA) modeline göre simülasyonla elde edilmesi mümkün olan kümelerle karşılaştırılarak, incelenmektedir. Bu amaçla manyezit cevheri numunelerinde oluşmuş birbirinden farklı mangan kümelerinin görüntü tarayıcı ile resimleri elde edilerek bilgisayar ortamına geçirilmektedir; bunlar kullanılarak her bir kümenin yoğunluk korelasyon fonksiyon üsleri ve fraktal boyutları hesaplanmaktadır.

Anahtar Kelimeler : Difüzyon ile sınırlı kümeleşme (DLA) modeli, Monte Carlo Yöntemi, Tarama ile Görüntüleme Yöntemi, Manyezit Cevheri, Mangan Kümeleri.

ABSTRACT

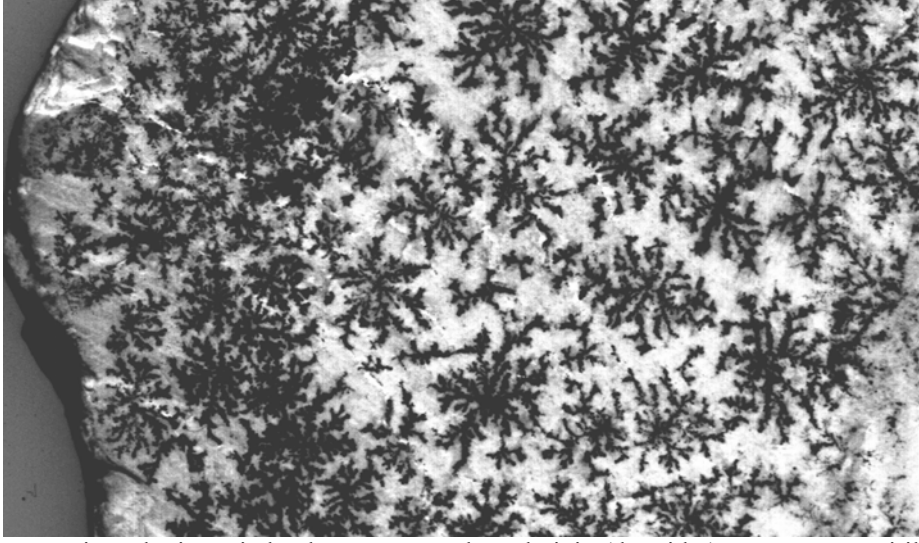
In this study, the mechanism for the growth of manganese dendrites on surfaces of magnesite ore is studied by comparing them with the aggregates obtained by simulations according to the diffusion limited aggregation (DLA) model. For this purpose the pictures of the naturally occurring manganese dendrites of different forms encountered on the samples of magnesite ore are obtained by a scanner; these pictures are used for computing the exponents of the density correlation functions and the fractal dimensions.

Key Words: Diffusion-Limited Aggregation (DLA) Model, Monte Carlo Method, Scanning Method, Magnesite ore, Manganese Dendrites.

1. GİRİŞ

Doğadaki yapılar farklı geometrik şekillere (desenlere) sahiptir. Her bir yapı ortamdaki temel yapı taşlarına göre farklı bir tanecikler kümesidir. Heterojen çevre şartları ve düzensizlik olmasına rağmen kümelerin nasıl olup da düzenli, simetrik veya kısmen simetrik özellikler taşıdığı doğa bilimleri araştırmalarına konu teşkil etmiştir [1, 2, 3].

Organik azoik (cansız) yapılar için tanecik kümeleşmesinin bir örneği, manyezit cevheri üzerindeki düzlem ve arayüzeylerinde oluşmuş mangan kümeleri (çiçekleri, dentritleri) dir.



Şekil 1. Manyezit cevheri üzerinde oluşan mangan kümelerinin (dentritler) tarama yöntemi ile elde edilen görüntüsü.

Kümeler, cevherdeki düzlem ve ara düzlemlerde mangan içerikli bileşik moleküllerinin (MnO) herhangi bir çekirdeğin etrafında birikmesi ile oluşur. Kümelerin temel özelliği çekirdekten dışa doğru uzanan beş yada altı dallı seyrek yapılı olmasıdır. Fraktal karakterlidir [4].

Mangan çiçekleri (dentrit, küme) doğal manyezit cevherinin üst, iç ve ara katmanlarındaki düzlem yüzeylerde gözlenmektedir. Katı manyezit cevheri doğal şartlarda oluşmuş sanayi ve teknolojik uygulamaları olan bir maden cevheridir. Cevher, Türkiye’de Eskişehir ve Kütahya (Beşçam bölgesi) civarında çıkarılıp, çevrede bulunan tesislerde işlenmektedir. Manyezit cevheri, hidrotermal maden yatağı oluşumu grubuna girer. Yani, magnezyum iyonları içeren sıcak suların, serpantin ana kayacının kırık ve çatlaklarında çökmesi, yığılması sonucunda oluşurlar.

Manyezit cevherinin üzerinde bulunan siyah noktalı desenler, madencilik ve mineralojide mangan çiçekleri (mangan dentritleri) olarak isimlendirilmektedir (Şekil 1). Mangan çiçeklerinin, manyezit cevherinin oluşumu sırasında cevherin arayüzeylerinde oluştuğu gözlenmektedir. Mangan oksitinin (MnO), manyezit cevheri içerisindeki oranı eser miktardadır. Bundan dolayı cevherin kimyasal analizi yapıldığında MnO miktarı ihmal edilmektedir.

Manyezit ana minerali ile birlikte silika bileşikleri, kalker, dolomit ve hematit minerallerinin bir araya gelerek oluşturdukları mineral topluluklarına manyezit cevheri denir. Oluşum ortamına bağlı olarak değişmek üzere genel olarak, %85-90 manyezit minerali ile %10-15 diğer minerallerden oluşur. Buna göre tipik bir manyezit cevherinin kimyasal bileşimi (kompozisyonu) ; % MgO : 46-47, % SiO_2 : 0,2-1,0, % CaO : 0,80 – 2,0, % Fe_2O_3 : 0,05 – 0,10, % Al_2O_3 : 0,05, % CO_2 : 44 – 46 şeklinde verilebilir.

2. MATERYAL VE METOD

2.1. Difüzyon İle Sınırlı Tanecik Kümeleşme (DLA) Modeli

İki boyutlu uzayda mangan kümeleri gibi dentritik (dallı ve alt dallı) özellik taşıyan yapılar için difüzyon ile sınırlı tanecik kümeleşme modeli (diffusion-limited aggregation (DLA)) 1981 yılında T.Witten ve L.M.Sender tarafından takdim edilmiştir. Kapalı örgü modelidir ve örgünün merkezine bir çekirdek tanecik yerleştirilir. İkinci tanecik merkezden uzakta bulunan herhangi bir kenar örgü gözünden bırakılarak rasgele (random) hareket ettirilir. Bu tanecik çekirdeğin etrafındaki herhangi bir komşu göze ulaşınca kümenin elemanı olur. Daha sonraki tanecikler için aynı algoritma tekrarlanır. Eğer tanecik hareketi esnasında kapalı örgünün dışına çıkarsa o tanecik iptal edilir. Daha sonra aynı işlem yeni ve farklı tanecikler için önerilir [2, 3]. Küme oluşturulur. Günümüze kadar DLA modeli simülasyon çalışmalarında bir kümedeki tanecik sayısı 10^2 den 10^7 ye kadar ulaşmıştır. Ayrıca iki ya da çok boyutlu uzayda bulunan kümeler için de çalışma yapılmaktadır [4, 5, 6].

2.2. Yoğunluk Korelasyon Fonksiyonu

Tanecik kümelerinin en temel istatistiksel büyüklüklerinden biri yoğunluk korelasyon fonksiyon üssüdür. Kümedeki taneciklerin örgü içerisindeki dağılım için fiziksel bir ölçüsüdür. Kapalı kare örgüde tanecik yoğunluğu $\rho(\vec{r})$ işgal edilmiş örgü gözü için tanecik yoğunluğu 1, boş örgü gözü için 0 olarak alınır. N tanecikli küme için yoğunluk korelasyon fonksiyonu,

$$C(r) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{r}'} \rho(\vec{r}') \rho(\vec{r}' + \vec{r}) \quad [1]$$

bağıntısı ile tanımlanır. Bu fonksiyon tanecikler arası elektrostatik yaklaşım olup yalnızca kapalı kare örgüde iki gözü ayıran r uzaklığına bağlıdır ve alacağı değerler kümenin boyutlarından daha küçük ise doğru olabilir. Daha büyük değerler için anlamsızdır [2].

2.3. Topolojik Boyut

Kapalı kare örgü tamamen nesnelere ile doldurulmuş ise örgü boyut Öklit boyutu d ile tanımlanır. Bu durumda Öklit boyutu 1, 2, 3.... gibi tam değerler alır. Bir küme en uç durumda kendine ait içinde bulunduğu uzayı tamamen doldurabildiğinden dolayı kümenin topolojik boyutu d_f içinde bulunduğu uzay Öklit boyutu d ve $d_f \leq d$ ilişkisini sağlamaktadır.

Bir tanecik kümesinin topolojik boyutunu hesaplamada kullanılan metotlardan biri kutu sayma yöntemidir. Kümeye ait nesnelere bulunduğu r yarıçaplı bölge içinde N(r) deki gözler sayılır.

$$N(r) = r^{d_f} \quad [2]$$

bağıntısının log - log grafiğinin doğruya karşılık ($\log N$ nin $\log 1/r$ 'ye bağlı değişim grafiği) eğimi topolojik boyutu verir [5, 6].

2. 4. Tarama Yöntemi

Magnezit cevheri üzerindeki mangan kümeleri (çiçekleri, dentritleri) nin topolojik boyutunu hesaplamak için en önemli yöntemlerden biri tarama yöntemidir.

Tarama yönteminde; yüzeyde bulunan kümelerin tarayıcı (scanner) ile görüntüsü elde edilir (Şekil 1). Bilgisayar ortamına taşınan ve seçilen herhangi bir kümenin etrafındaki kümeye ait olmayan oluşumlar temizlenir. Kümeye ait tüm alan belirlendikten sonra kapalı kare örgü içerisine taşınır. Küme kapalı kare örgüde haritalandırılır. Yazılım yardımı ile kapalı kare örgüdeki her gözün doluluk oranı belirlenir. Örgü gözünün herhangi biri dolu ise tanecik yoğunluğu 1, eğer boş ise 0 alınır. Daha sonra örgü içindeki toplam dolu gözler saydırılır. Dolu gözlerin sayısı kümeyi meydana getiren toplam tanecik sayısı olarak atanır. Kutu-sayma yöntemi kullanılarak denklem (1) deki r yarıçaplı (radius of gyration) bölgede tanecik miktarı $N(r)$ alınarak logaritmaların değişiminin oluşturduğu doğrunun limit değerindeki eğimi (d_f) hesaplanır [2].

3. BULGULAR

Bu çalışmada, Monto Carlo simülasyon yöntemi kullanıldı. Difüzyon ile sınırlı tanecik kümeleşme (DLA) modeli için hazırlanan algoritmaya göre Delphi-Demo bilgisayar dilinde yazılan program (yazılım) ile bilgisayarda, mangan dentritleri benzeri oluşumlar elde edildi. Oluşumlar kapalı kare örgüde haritalandı. Örgü içinde dolu olan gözler için tanecik yoğunluğu 1, boş olan gözler için ise 0 alınarak yoğunluk korelasyonu fonksiyonun üs ve topolojik boyut değerleri hesaplandı.

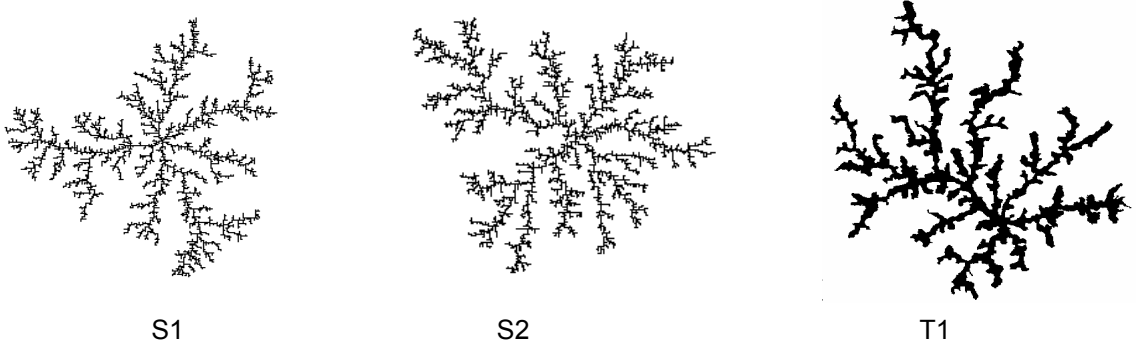
T.A. Witten ve L.M. Sender, kenar uzunluğu (300,300) nokta birimi (pixel) olan kapalı kare örgüde merkezi çekirdek koordinatı (150,150) nokta birimi (pixel) ve 3624 tanecikli bir küme için yoğunluk korelasyon fonksiyonun üssünü $0,343 \pm 0.005$ ve topolojik boyut değerini $1,670 \pm 0.003$ olarak hesaplamıştır [2]. Bu çalışmada simülasyon hesaplaması sonucunda korelasyon fonksiyon üssü 0.343 ± 0.005 ve topolojik boyut değeri $1,657 \pm 0.021$ olarak bulunmuştur. Bilgisayarda hazırlanan yazılımın sonuçları ile literatürdeki sonuçlar uyumludur. Böylece programın güvenilirliği sağlanmıştır [2, 3, 7].

Tarayıcı (scanner) kullanarak doğal manyezit cevheri yüzeyinde bulunan mangan dentritleri (kümeleri) bilgisayar ortamına taşındı. Seçilen herhangi keyfi mangan dentritlerinden bir kaç tanesi alınarak kümeye ait olmayan oluşumlar temizlenip, küme karelendi. Her bir karenin doluluk oranı belirlenerek dolu bir karenin (gözün) tanecik yoğunluğu 1, boşun ki 0 alındı. Daha sonra mangan kümelerinin yoğunluk korelasyon fonksiyon üssü ve topolojik boyut değerleri hesaplandı. Hesaplanan değerler Çizelge 1.'de sunulmaktadır.

Şekil 2.'de S1, S2 bilgisayar ile oluşturulan simülasyon ve T1 ise tarayıcı ile elde edilen kümelerin görünüşleri verilmektedir.

Şekil 3.'de yoğunluk korelasyon fonksiyonu $C(r)$ nin örgü sabiti r nin logaritmalarının ve Şekil 4.'de ise kümenin tanecik sayısı $N(r)$, örgü sabitinin tersi ($1/r$) nin logaritmanın doğruya karşılık gelen kısmın değişim grafiği sunulmaktadır.

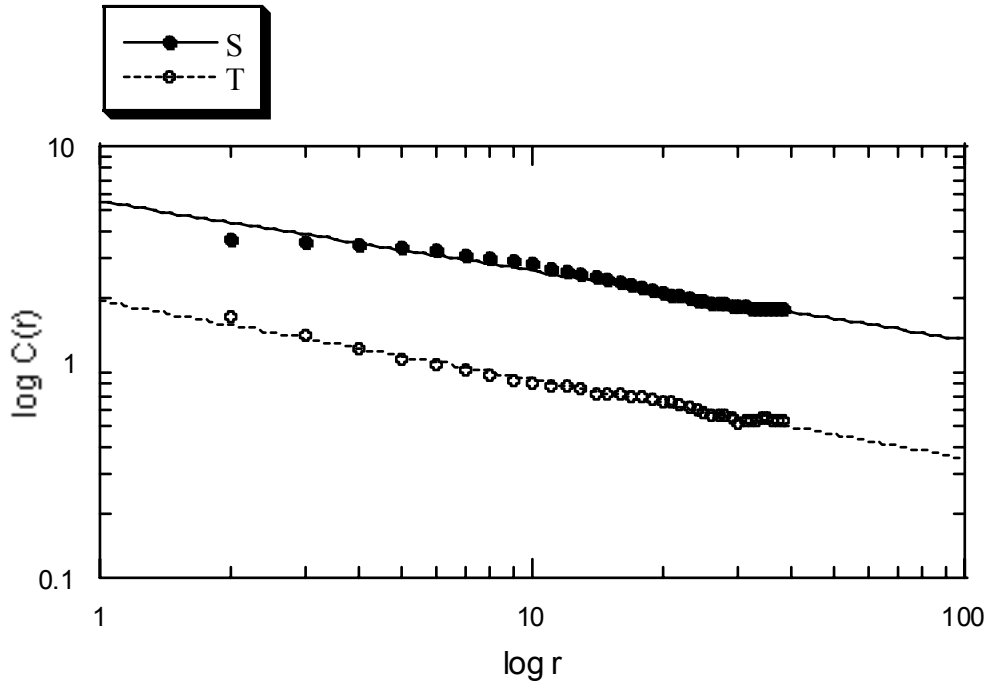
Şekil 2. S1 ; kenarı 300 nokta birimi (pixel) olan kapalı kare örgüde 5001 tanecikli simülasyon ile oluşturulan bir küme. Merkezi taneciğin koordinatları



(150,150) dir.

S2 ; kenarı 300 nokta birimi (pixel) olan kapalı kare örgüde 5001 tanecikli simülasyon ile oluşturulan bir küme. Merkezi taneciğin koordinatları (150,150) dir.

T1 ; kenarı 426348 nokta birimi (pixel) olan kapalı örgüde 16248 tanecikli tarama ile oluşturulan bir küme. Merkezi taneciğin koordinatları (213174, 213174) dir.

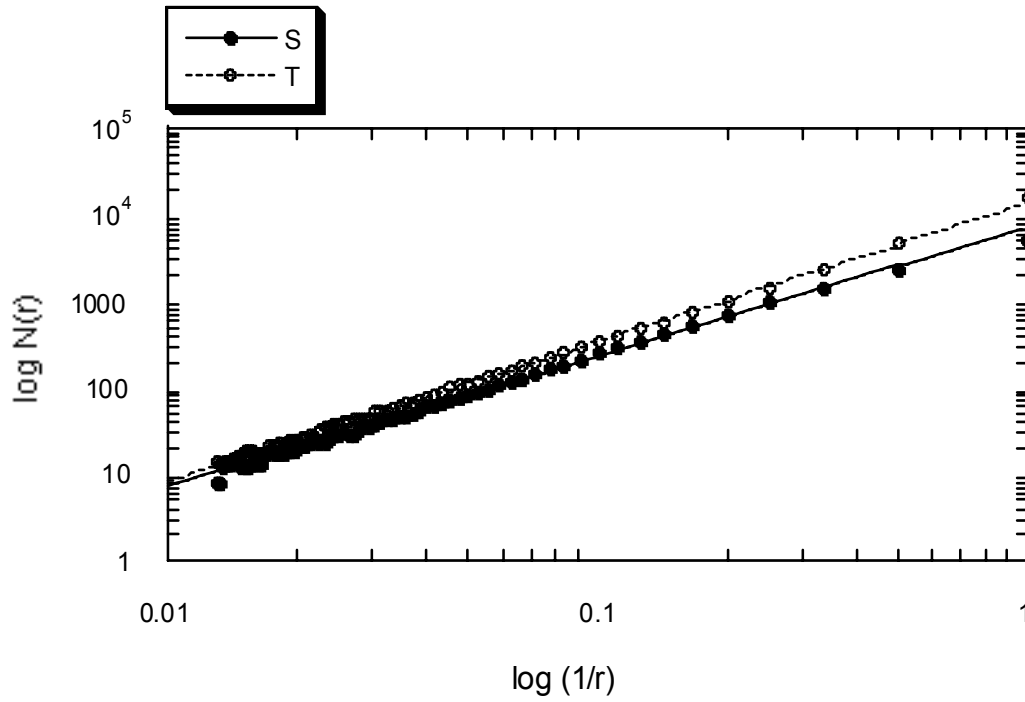


Şekil 3. Tarama yöntemi ve bilgisayar simülasyonu ile elde edilen iki kümenin yoğunluk korelasyon fonksiyon değişimlerinin karşılaştırılması (S1; Simülasyon, T; Tarama).

Çizelge 1. Bilgisayar simülasyonu ve tarama yöntemi ile elde edilen kümelerin yoğunluk korelasyon fonksiyon üsleri ile topolojik boyut değerleri.

Sıra No	Simge	Örgü Boyutu	Merkezi Çekirdek Koordinat	Tanecik Sayısı	Fit Aralığı	α	Topolojik Boyutu (d)
1	S1	300,300	150,150	5001	2-40	$0,343 \pm 0.005^*$	$1,657 \pm 0.021$
2	S2	300,300	150,150	5001	3-27	$0,346 \pm 0.004$	$1,654 \pm 0.014$
3	T1	426348	213174 , 213174	16248	3-27	$0,341 \pm 0.004$	$1,659 \pm 0.034$

* Sonuçlarda hata oranı yalnızca istatistik hata olarak verilmiştir.



Şekil 4. Tarama ve simülasyon yöntemi ile elde edilen iki kümenin topolojik boyut değişimlerinin karşılaştırılması (S1; Simülasyon, T; Tarama).

3. TARTIŞMA VE SONUÇ

Doğal mangan kümeleri ayrı ayrı incelendiğinde, büyüklük ve simetri bakımından farklı oldukları görülür. Merkezi çekirdeğe bağlı beş ya da altı dallı ve bu dallara herhangi noktadan eklemli alt dallı ve bu dallara herhangi noktadan eklemli alt dallardan oluşmaktadır. Seyrek yapı, kendine benzer (self – simirility), dentritik ve fraktal özellik gösterirler.

Monte Carlo simülasyon yöntemi kullanılarak DLA modeli simülasyonu kümeleri ile doğal manyezit cevheri yüzeyinde bulunan mangan kümeleri (çiçekleri, dentritleri) ile aynı görünümündedir.

Literatürde yapılan çalışmada, yoğunluk korelasyon fonksiyon üssü $0,343 \pm 0.005$ ve topolojik boyut değeri $1,670 \pm 0.003$ olarak hesaplamıştır [2]. Bu çalışmada simülasyon sonucunda korelasyon fonksiyon üssü 0.343 ± 0.005 ve topolojik boyut değeri $1,657 \pm 0.021$ olarak bulunmuştur. Dolayısı ile topolojik boyut için $d \geq D$ şartı sağlar ve kümeler kapalı kare örgü yüzeyini tam dolduramamaktadır.

Doğal mangan dentritlerinin simülasyon ve tarama yöntemi ile korelasyon yoğunluk fonksiyon üssü ve farktal boyut hesaplanan ve litaratür değerleri Çizelge 2.'de sunulmaktadır.

Çizelge 2. Simülasyon ve tarama yöntemi kullanılarak oluşturulan kümelerin yoğunluk korelasyonfonksiyon üsleri ve topolojik boyut değerlerinin litaratür sonuçları.

	Literatür Sonuçlar	Simülasyon	Tarama
Yoğunluk Koralelasyon Fonksiyon Üssü (α)	$0,343 \pm 0.004^{(1)}$	$0,343 \pm 0.005$ $0,346 \pm 0.004$	$0,341 \pm 0.004$
Topolojik Boyutu (d)	$1.670 \pm 0.003^{(2)}$	$1,657 \pm 0.021$ $1,654 \pm 0.014$	$1,659 \pm 0.034$

1.Kaynak [2]

2. Kaynak [2, 3]

Daha önce yapılan çalışmaların sonuçları, bu çalışmada simülasyon ve tarama yöntemi kullanılarak mangan kümeleri (dentrit) lerinin istatistiksel sonuçları ile uyumludur. Dolayısı ile iki boyutlu uzayda ($d=2$), manyezit cevheri yüzeyinde doğal mangan kümeleri (çiçekleri, dentrit) lerini, difüzyonla sınırlı tanecik kümeleşme (DLA) modeli ile açıklamak mümkündür.

TEŞEKKÜR

Bu çalışmada, öneri ve katkılarından dolayı Sayın Nevzat AKTEKİN'e teşekkürlerimi arz ederim.

KAYNAKLAR

- [1] Ben-Jacop, E., "From Snowflake Formation to Growth of Bacterial Colonies. Part I: Diffusive Patterning in Azoic Systems", *Contemporary Physics*, 34:247-273, (1993).
- [2] Witten, T. A., Sander, L. M., "Diffusion-Limited Aggregation a Kinetic Critical Phenomenon", *Physical Review Letters*, 47:1400-1403, (1983).
- [3] Witten, T. A., Sander L. M., "Diffusion-Limited Aggregation", *Physical Review B*, 27:5686-5697, (1983).
- [4] Meakin, P., "Progress in DLA Research", *Physica D*, 86:104-112, (1995).
- [5] Meakin, P., "Formation of Fractal Clusters and Networks by Irreversible Diffusion – Limited Aggregation", *Physical Review Letters*, 51:1119-1122 (1983).
- [6] Meakin, P., "Off-lattice Simulations of Cluster-Cluster Aggregation in Dimensions 2-6", *Physics Letters*, 107A:269-272, (1985).
- [7] Bayırlı, M., "İki Boyutlu Uzayda Tanecik Kümeleşmesinin İncelenmesi", *Doktora Tezi*, Gazi Üniversitesi, Ankara, (2003).