

## **Bírálat**

Jóvári Pál

### Amorf ötvözetek atomi szintű szerkezetvizsgálata című MTA Doktori dolgozatáról

A dolgozat 134 oldalas, 236 hivatkozást tartalmaz. A dolgozat alapvetően 13 nemzetközi folyóiratban közölt cikkekre alapszik, amelyekben a jelölt számos (10) esetben első szerző. Az előbb leírtak és a dolgozatban közölt tudományometriai adatok alapján a jelölt teljesíti az MTA Doktora (Fizikai Osztály) cím megszerzéséhez elvárt teljesítményt. A dolgozat nyelvezete néhány helyen kissé száraz, néhol egy kicsit „szakácskönyv”-szerű. Az ábrák minősége elfogadható. A szerkesztés, nyelvhelyesség szintén megfelelő, azonban meg kell jegyezni, hogy számos helyen a cím túl közel van a szöveghez.

A dolgozat első 23 oldalán (+Függelék 15 oldal) a jelölt felvázolja a munka megértéséhez szükséges információkat. Itt megfelelő mélységben ismerkedhetünk meg a diffrakciós módszerekkel, műszereikkel, adatfeldolgozás problémáival, illetve a fordított Monte Carlo szimulációval. Ez utóbbi módszert használja a jelölt a kapott kísérleti információ feldolgozására, értelmezésére. Noha nem szokásos, hogy MTA Doktora címért olyan dolgozatot nyújtanak be, amelyben gyakorlatilag egy módszer alkalmazása szerepel (fordított Monte Carlo), Jóvári Pál bebizonyította a dolgozatával, hogy ez az út is járható. Már itt is kiderül a jelöltnek, a kísérleti adatok feldolgozásához, az eredmények értelmezéséhez fűződő alaposágra törekvő hozzáállása. Minden fejezet elején megfelelő részletességgel megismerkedhetünk a rendszerek fontosságával (ipari alkalmazások, tudományos kérdések), illetve az adatfeldolgozás és fordított Monte Carlo szimuláció részleteivel. Itt megnehezíti a megértést, hogy a számítások leírása során többször is hasonló szövegrészeket olvashatunk. A dolgozat megírása során a jelölt egy alaposan megfontolt gondolatmenet alapján írta le eredményeit. Minden esetben gondosan (néhány esetben talán túl gondosan is), ügyelt arra, hogy nehog „túlértékelje” a kapott

eredményeket (konfigurációkat), és olyan állításokat tegyen, amelyet nem tud 100 %-ig bebizonyítani. A dolgozathoz a következő kérdéseket tenném fel.

### *Általános kérdések*

1. Milyen esetben okozhat problémát az, hogy a neutrondiffrakció illetve röntgendiffrakció máshol szóródik (elektronfelhő, atommag)?
2. Hogyan lehetne jellemezni azt, hogy egyes mérések nem függetlenek egymástól?
3. Mikor válik két mérés redundánssá?
4. Számos esetben a neutrondiffrakciós és röntgendiffrakciós mérések más mérési tartományt fedtek le. Mennyire befolyásolja ez az eredményeket?
5. Az EXAFS, ahogy a szerző is helyesen leírja, csak a legközelebbi (lehet, hogy második legközelebbit is) szomszédot látja. Nem okoz ezen mérés használata problémát az értelmezéskor? Itt arra gondolok, hogy nem jelenik-e meg egy „folytonossági” probléma a számolt  $g(r)$ -en?
6. Számos neutrondiffrakciós mérésen látható kb.  $0.8-1 \text{ \AA}^{-1}$  nél egy kis előcsúcs. Ezt néha valamiféle hosszútávú rend meglétének szokták tartani. Mi erről a véleménye a szerzőnek?
7. Mekkora az anomális röntgen szórás szisztematikus hibája?
8. A fordított Monte Carlo szimuláció során az alkalmazott részecskeszám 5-50000 között változott. Milyen módon lehet eldönteni, hogy az alkalmazott részecskeszám megfelelő-e?
9. Amennyiben több mérése van, mint amennyi a parciális  $g(r)$ -ek meghatározásához szükséges, az segíti, vagy hátráltatja az adatok értelmezését?
10. Néhány esetben, ahogy egyébként a jelölt is leírja, a kapott párkorrelációs függvényeknek „furcsa” alakja van. Mi lehet ennek az oka, illetve mit jelent ez a kifejezés?
11. Milyen esetben nevezhetjük neutrondiffrakciós mérés esetén a szórási hosszak különbségét jelentősnek?

### *Részletes kérdések*

1. Amorf  $\text{Ge}_x\text{Te}_{100-x}$  ötvözetek (2.1 fejezet)
  - a. A szerző megállapítja, hogy  $x < 24.1$  esetén a rendszer kémiaiilag rendezett. Ezek szerint az  $N_{\text{GeGe}}$  elég kicsi ( $N_{\text{GeGe}} < 0.4$ ). Irodalomból vett állítás szerint a rendszer félvezető, amennyiben megfelelő számú Ge-Ge kötés van benne. A vizsgált összetételekben a vezetés szempontjából milyen állapotban vannak a vizsgált ötvözetek?
  - b. Mi az oka annak, hogy egyes vizsgálatoknál 2, míg más esetben 3 mérést használ a kiértékelés során (RTG, EXAFS, Ge él; RTG Ge és Te él). Forgótárcsás eljárásnál szintén három mérés van (ND, RTG és Ge él). Itt miért nem alkalmazza az EXAFS Te élnél történő mérést?
2. Az As-Te üvegek rövidtávú rendje (2.2 fejezet)
  - a. Mi az oka, hogy a mérések közül az  $\text{As}_{34}\text{Te}_{66}$  esetén hiányzik a neutrodiffrakciós mérés?
  - b. Milyen általános következtetéseket lehet levonni az AsTe párkorrelációs függvény második csúcsának változásából?
  - c. A 10. ábrán látható, hogy kis  $k$  tartományban az EXAFS mérés illesztése nem túl jó. Van ennek valami speciális oka?
3. A Ge-As-Te üvegek szerkezete (2.3 fejezet)
  - a. Általánosan is igaz lehet az az állítás, hogy amennyiben az AA és AB párkorrelációs függvény első csúcsa kb.  $0.2 \text{ \AA}$  távolságban van, akkor a meghatározott koordinációs számok nagy hibával terheltek?
  - b. Mi az oka, hogy a  $\text{Ge}_{20}\text{As}_{40}\text{Te}_{40}$  esetében a TeTe párkorrelációs függvény második csúcsa különösen kifejezett?
4. Az amorf  $\text{Ge}_{20}\text{I}_7\text{Te}_{73}$  üveg rövidtávú rendje (2.4 fejezet).
  - a. Miért szükséges megadni az  $N_{\text{GeTe}}$  és  $N_{\text{TeGe}}$  koordinációs számokat is?
5. Az amorf  $\text{GeSb}_2\text{Te}_4$  és a  $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$  szerkezete (2.5 fejezet)
  - a. Mi az oka a Te-Te és Sb-Sb párkorrelációs függvények furcsa alakjának?
6. Rövidtávú rend Cu-Zr alapú fémüvegekben (3. fejezet)
  - a. A Cargill és Spaepen által a rendezettség mértékére bevezetett paraméter milyen értéke mutat már valamiféle preferenciát?

A dolgozat a feltett kérdéseim, megjegyzéseim mellett is megfelel az MTA Doktora címért benyújtott dolgozat követelményeinek. Egy olyan hiánypótló munka, amely rámutat arra a néha már elfelejtett igazságra, hogy minden esetben a mérés szolgál annak az eldöntésére, hogy feltevéseink igazak-e.

Budapest, 2019. május 13.



Bakó Imre