

Bírálat

Szalai István

Fluidumok fázisegyensúlyi és szerkezeti tulajdonságainak

statisztikus mechanikai vizsgálata

c. MTA doktori értekezéséről

A körülöttünk levő élő és élettelen világ legfontosabb anyagai között kitüntetett szerepet töltenek be a folyadékok. Tulajdonságaik megértése a fizika fontos, de nehéz feladata: nehéz, mert bár a statisztikus mechanika elvei teljesen világosak, semmilyen leegyszerűsítő körülmény nem könnyíti meg a szükséges számítások elvégzését. A huszadik század utolsó harmadára született meg az az analitikus matematikai eszköztár, amely mégis lehetővé teszi fontos tulajdonságok elméleti meghatározását a folyadékot alkotó atomok és molekulák kölcsönhatásaiból kiindulva. Ez az eszköztár közelítő egyenletekből, azok megoldásainak egyre több esetet lefedve növekvő készletéből, és a megoldható egyenleteken túllépő perturbációs számításból áll, és gyarapszik számos kutatócsoport kitarató, célratörő, sok képzelőerőt és türelmet igénylő munkájának köszönhetően. Mivel maguk a molekuláris kölcsönhatások is csak közelítően ismertek, az előrehaladásban életbevágó fontossága volt annak, hogy ugyanekkorra vált reálissá ugyanezeknek az eredményeknek numerikus szimulációval való kiértékelése, amely a fizika önálló ágaként lépett be kísérlet és elmélet közé. Az azonos kölcsönhatásokból kiinduló analitikus egyenletek és numerikus szimulációk egymást ellenőrző volta óriási lendületet adott a folyadékok statisztikus mechanikájának. Ezen a területen végzett intenzív, kiterjedt és kiemelkedően eredményes kutatómunkát mutat be Szalai István értekezése.

A bemutatott munka különböző rendszerekre: dipoláris molekuláris fluidumokra, mágneses kolloid-oldatokra, folyadékkristályokra, nanopórusokba zárt elektrolitoldatokra vonatkozó eredményeket ismertet. Ezeket a felhasznált eszköztár – egyszerűsített kölcsönhatások feltételezése, párhuzamosan végzett, majd az eredményekben összehasonlított analitikus és numerikus számítások – hasonlósága köti össze, de nyilvánvaló, hogy nem csak példák gépies kidolgozásáról van szó, hanem a konkrét rendszerhez való igazítás komoly szellemi erőfeszítést igényel, pl. annak mérlegelését, hogy az adott esetben mi a legkisebb, perturbációként kezelhető járuléka a kölcsönhatásnak.

Az eredményekről maximálisan pozitív a véleményem, az elvégzett munkát magas színvonalúnak és az MTA doktori követelményeket messzemenően kielégítőnek tartom. Ezért csak röviden jegyzem meg azt, amivel elégedetlen vagyok: ez maga az értekezés, amelyben a Jelölt mindent be akar mutatni, és ezt az olvasást nagyon megnehezítő módon, a munka belső összefüggéseit kevésbé megmutató, „egy cikk – egy alfejezet” beosztásban hajtja végre. Ezzel nem azt akarom mondani, hogy érdemes lett volna egy könyvírásnyi szellemi energiát szentelni az anyag didaktikusabb, tömörebb, olvasmányosabb megírásának, inkább azt hiszem, hogy egy ekkora volumenű munkánál szerencsésebb lett volna a doktori szabályzat által támogatott „rövid értekezés” (lényegében a kibővített tézisek és csatolt válogatott publikációk) lehetőségét választani.

Kérdéseimet és megjegyzéseimet az egyes fejezetekhez kapcsolva sorolom fel.

2. Dipoláris molekuláris fluidumok

- A 32. oldalon említi, hogy az elektromos térerősség növelésével divergál a kémiai potenciál, de ez az állapotegyenletből kiesik. Nem éppen ez a divergáló kémiai potenciál jelenik-e meg a 2.9/a ábrán bemutatott izomerizációs egyensúly növekvő térfüggésében?
- A 2.11 ábrán kellene-e látni a szövegben említett, a (2.100) formulában megjelenő $y=1$ körüli szingularitást?
- A 2.13 ábrán éppen a nagy dipólmomentumoknál a GPS elmélet látszik jobbnak, ellentétben a szöveggel.

3. Mágneses folyadékok

- Az orientációs eloszlás inhomogén esetben helyfüggő, valahogy ezt fejezik ki a (3.92) egyenletek – kérem, magyarázza meg, hogy lehet eljutni ezekhez az egyenletekhez.
- Az is szigorúan kétdimenziós eset lenne, ha a mágneses momentum vektora szigorúan merőleges lenne a folyadék síkjára, csak fel és le irány között választhatna (az Ising-modellhez hasonlóan). Létezik ilyen ferrofluidum?

5. Szimulációs módszerek

- Van-e valami általános szempont, hogy kevesebb pontban végzett hosszabb szimulációs futásokból többféle fluktuációs mennyiséget számolni, ez milyen esetben előnyösebb, mint több pontban rövidebb futásokkal egyszerűbb mennyiségeket?
- Az 5.2 táblázatban öt, sőt hét jegyre megadott illesztett paraméterek is megjelennek. Valóságos ez a pontosság? Mekkora a hibája egy ilyen illesztésnek? Ugyanez vonatkozik a következő fejezet 6.3 táblázatára is.
- Ha a szimulációt reális rendszerekkel hasonlítja össze, mennyire lehet fontos hibaforrás, hogy a molekulák közötti kölcsönhatás valójában nem bontható fel teljesen párerőkre? Mekkora korrekciót jelenthetnek pl. a háromtest-erők?

6. Elektrolitoldatok nanopórusokban

- A nem-egyensúlyi molekuláris dinamika leírásában főleg kitérőnek látszik a korrelációs függvényekre épülő diszkusszió: itt két szembeáramló „színtöltés” stacionárius áramlásának direkt számítása történik.
- Pórusokban a fal nem csak határfeltételt jelent, hanem fizikai tulajdonságai is vannak: tapadás, súrlódás, ütközés. Mit tartalmaz ezekből a bemutatott elmélet?

A kérdésekre adott válaszoktól függetlenül a bemutatott munkát jónak és kivételesen nagy volumenűnek tartom. A bemutatott 56 cikknek, amelyek közül 46 kapcsolódik közvetlenül a tézispontokhoz, jelentős része a témakör vezető folyóirataiban jelent meg, egy részük a téma meghatározó kutatóinak társszerzőségével készült. Mindennek alapján javaslom a dolgozat nyilvános vitára bocsátását és az MTA Doktora cím megadását.

Budapest, 2011. február 23.

Gesztai Tamás

az MTA doktora (a fizikai tudomány doktora)