

MTA Doktori Tanácsa
1051 Budapest
Nádor u. 7

BÍRÁLAT

Szalai István

„Fluidumok fázisegyensúlyi és szerkezeti tulajdonságainak statisztikus mechanikai vizsgálata”

című akadémiai doktori értekezéséről

A fluidumok fázisátmeneteit csak a megfelelő termodinamikai tulajdonságok pontos leírásával érthetjük meg. Bár az alapvető elméleti módszerek (perturbatív eljárások, integrál egyenletek, ill. a klaszikus sűrűség funkcionál technika különféle változatai) kidolgozása a múlt század második felében megtörtént, azok pontosságának javítása ill. komplex esetekre való alkalmazása további komoly erőfeszítéseket igényelt. Ebben a munkában játszott jelentős szerepet a Jelölt, aki kutatómunkája során a terület több vezető személyiségével dolgozott együtt, pl. Douglas Hendersonnal (a témakör nagy öregje, aki hírnevét - többek között - a folyadékok perturbációs elméletének John Barkerrel való kifejlesztésével, a keménygömb folyadék szerkezetére vonatkozó eredményeivel, valamint a Yukawa folyadékokra vonatkozó MSA megoldás kidolgozásával alapozta meg), ill. Siegfried Dietrichhel (az MPI Metals Research igazgatója). A Szalai István által vizsgált témakörök öt csoportra bonthatók: Dipoláris fluidumok leírása, mágneses folyadékok vizsgálata, folyadékkristályok fázisegyensúlyainak tárgyalása, Monte Carlo módszerek fejlesztése/alkalmazása fázisátmenetekre, valamint elektroliotok nano-pórusokban való viselkedésének leírása. A fenti témakörök a folyadékok statisztikus fizikájának izgalmas, ma is aktív területét képezik, így a Jelölt sokakat érdeklő, intenzíven kutatott témákkal foglalkozik.

A disszertáció 185 számozott oldalt és nagyszámú illusztrációt tartalmaz; gondos és szép munka. A szövegben csak elvétve található elírás, melyek listáját eljuttattam a jelölthöz.

Az első fejezet röviden, de közérthetően tekinti át a disszertáció megértéséhez szükséges statisztikus fizikai alapokat és a vizsgálatok során alkalmazott elméleti módszereket. Szerencsésebb lett volna több helyen az angol mozaikszavak helyett magyar rövidítések megalkotása és alkalmazása.

A második fejezet a dipoláris folyadékok tulajdonságait tanulmányozza. Először a Jelölt egy a Mean Spherical közelítésen alapuló módszer segítségével a dipoláris Yukawa folyadék tulajdonságait tárgyalja, majd megmutatja, hogy a Kalikmanov által dipoláris merevgömb esetre kidolgozott Ruelle-típusú perturbációs elmélet hibás, és javított elméletet dolgoz ki rá, mely a ritka rendszer limitben egzakt. A pont-dipólussal rendelkező Lennard-Jones rendszer (Stockmayer fluidum) leírására újfajta perturbációs eljárást dolgoz ki, amely a dipoláris lágy-gömb és a Weeks-Chandler-Andersen típusú vonzó perturbáció kombinációján alapul. Ezek alapján, Szalai István új, a korábbiaknál pontosabb állapotegyenletet származtat a nagy sűrűségű Stockmayer gázokra.

A harmadik fejezet a mágneses folyadékok vizsgálatával foglalkozik. A ferrofluidumok mágnesességének MSA elmélete kidolgozása után, a Jelölt meghatározza a ferrokolloidok, a két- és kvázikétdimenziós ferrofluidumok mágneses tulajdonságait, valamint a bidiszperz Stockmayer fluidum fázisdiagramját, ill. elméletet dolgoz ki a két fal közé szorított dipoláris folyadékok viselkedésének leírására.

A negyedik fejezetben a Jelölt az Onsager és Person-Lee elméletek keretében ill. azok kiterjesztéseiben a folyadékkristály fázisok közti átmeneteket vizsgálja változatos molekula geometria mel-

lett. Az itt bemutatott munka során a korong alakú, a potenciálvölgygel körülvelt ellipszis, a lineáris merevgömb láncok, és a derékszögű potenciállal körülvelt konvex testek kerültek tárgyalásra.

Az ötödik fejezet az elméleti eredmények számítógépes ellenőrzésére a Jelölt és munkatársai által ki- ill. továbbfejlesztett Taylor-sorfejtésen alapuló Monte Carlo metodológiát és annak ellenőrzését mutatja be NpT, NpTE, NVT és nagykanonikus sokaságokra.

A hatodik fejezetben egyensúlyi és nem-egyensúlyi molekuláris dinamikai módszerekkel meghatározza a henger alakú pórusokba zárt elektrolitok ion-diffúziós együttthatóját, valamint egyen- és váltóáramú vezetését. Végül SPC/E vízben mozgó KCl ionok esetében vizsgálta a részecskék diffúzióját, az oldat fajlagos vezetését, ill. a pórusokra jellemző folyadék szerkezetet. Megmutatta továbbá, hogy polarizálható fal mellett a dipólusok a pórus tengelyével párhuzamosan rendeződnek.

Szalai István főbb eredményeit öt tézispontban és számos alpontban foglalta össze. **Ezek mindegyikét elfogadom a jelölt saját, új tudományos eredményeként.** Szerencsésebb lett volna talán az alpontok számának csökkentése.

A Jelölt a disszertációban ismertetett eredményeit nagy számú (45) tudományos publikációban közölte, melyek rangos nemzetközi folyóiratokban jelentek meg (2 J. Phys. Chem., 5 J. Chem. Phys., 5 Phys. Rev. E, 15 Molec. Phys., ...). Munkáira több, mint 360 független hivatkozás érkezett, ami azok elismertségét bizonyítja.

A következő kérdésekre kérem a Jelölt választát:

(1) A disszertáció jelentős részében központi szerepet játszanak a Mean Spherical közelítésen (MSA) alapuló elméletek. Milyen változás várható az eredményekben, ha MSA helyett a Percus-Yevick vagy a Hypernetted Chain közelítést alkalmazná?

(2) Fejtse ki részletesebben, hol követett el hibát Kalikmanov a dielektromos permittivitásra vonatkozó levezetés során!

(3) A molekulák geometriájának figyelembe vételére az egyik hatékony eljárás a Rosenberg-féle ún. Fundamental Measure Theory. Várható-e, hogy ezen az alapon az elliptikus geometriájú folyadékkristály molekulák pontosabb leírása adható meg, mint ami a disszertációban szerepel? Ha igen, mi a disszertációban ismertetett módszer-választás motivációja?

(4) A nano-pórusbeli elektrolit oldatok tárgyalásakor SPC/E potenciált használ a víz leírására. Hogyan változnának az eredmények más víz potenciál esetén?

(5) Tervezi-e a tanulmányozott fázisátmenetek időfüggő vizsgálatát, pl. a klasszikus dinamikus sűrűség funkcionál technika keretében?

A kérdésekre adott válaszoktól függetlenül megállapítom, hogy Szalai István munkássága eredeti, nemzetközileg is elismert eredményekkel gazdagította a komplex folyadékok statisztikus fizikai leírását. Ezek alapján a védés kitűzését, és az MTA doktora cím odaítélését feltétlen javaslom.

San Diego, 2011. március 2.

Dr. Gránásy László
MTA doktora