

BÍRÁLAT

Zsoldos Ibolya „Szén nanoszerkezetek mint trivalens poligonhálózatok modellezése és mechanikai szimulációi” című MTA doktori értekezéséről

1. Témaválasztás, kutatási cél

A nanoszerkezetek, nanokompozitok, nanotechnológiák az utóbbi évtized kiemelkedő kutatási területei, melyek egyik fontos ága a szén nanoszerkezetek, mint például a szén nanocsövek, a fullerének, illetve a grafén alkalmazási területeinek feltárása. Ezekkel kapcsolatban számos alapkutatási eredmény az alkalmazott kutatásokban, sőt a műszaki gyakorlatban is felhasználást nyert, így már kereskedelmi forgalomban is megjelentek, vagy legalábbis üzemi szintű technológiai fejlesztés alatt állnak egyes nanocsövekkel, vagy grafén részecskékkal erősített nanoszerkezetű kompozitok, illetve nanocsövekkel társított, mikrométerű szénsálakkal erősített hibridkompozitok. Másfelől jelentős eredmények születtek az elektronikai alkalmazások, nanoszerkezetű elektronikai félvezetők, kapcsolóeszközök kifejlesztése területén is. Alapvetően új lehetőség a nanocsövekből és a grafénből célorientált, pl. elektronikai alkalmazásra optimalizált superminiaturizált, vagy mechanikai terhelésre optimalizált szuperszilárd anyagszerkezetek kialakítása.

Zsoldos Ibolya doktori értekezése az utóbbi korszerű területhez, a fizika és a műszaki anyagtudomány dinamikusan fejlődő határterületéhez kapcsolódik, ezért a **választott téma aktuálisnak**, illetve mind az alap-, mind az alkalmazott anyagtudományi kutatások szempontjából is **jelentősnek minősíthető**.

Az értekezésnek a Bevezetésben (3-4. oldal) megfogalmazott **célja** a Jelölt, görbült felületekre illesztett trivalens poligonhálózatokat alkotó szén nanoszerkezetek modellezési és szimulációs kutatási eredményeinek összefoglalása.

2. Formai követelmények

A doktori értekezés terjedelme a fedőlapot (1 oldal), a tartalomjegyzéket (1 oldal), a köszönetnyilvánítást (1 oldal), és az irodalomjegyzéket (5 oldal) nem számítva, 92 oldal, amelynek a végén 9 oldalas, a téziseket is tartalmazó összefoglalás található.

Az értekezés világos megfogalmazású, ábrákkal gazdagon illusztrált, célszerűen szerkesztett munka. Az egyes kutatási feladatok háttérét képező irodalmi eredményeket nem külön fejezet, hanem témánként, az 1.1., a 2.1., illetve a 3.1. alfejezetek foglalják össze, míg a saját eredményeket elsősorban az alfejezetcímekben zárójelbe tett saját publikációkra való utalás jelzi, ami azonban helyenként nehezíti az irodalmi és saját eredmények egyértelmű szétválasztását. Ugyancsak nehézséget okoz, hogy a hivatkozott publikációk címei nem szerepelnek az irodalomjegyzékben. Segítette volna továbbá a kezelhetőséget egy jelölés- és rövidítésjegyzék, még akkor is, ha ezt az alkalmazott matematikai jelölések száma nem feltétlenül tette szükségessé.

Megjegyzendő, hogy a 3.2. fejezetben a Brenner potenciál levágófüggvényéhez alkalmazott polinomok együtthatóihoz megadott formulák számítási menetét, valamint a 3.3. fejezetben ismertetett húzásszimulációs algoritmus megvalósított programját célszerű lett volna Függelékben mellékelni.

Összességében megállapítható, hogy az értekezés **megfelel a formai követelményeknek**.

3. Vizsgálati módszerek

Az értekezésben Jelölt egyrészt a trivalens poligonhálózatok geometriájának, illetve topológiájának eredményeit felhasználva, matematikai és fizikai megfontolások alapján dolgozta ki a szén nanocső elágazások csempés szerkesztésére alkalmas módszert, másrészt ezek térbeli, fizikailag realizálható, egyensúlyi, ún. relaxált alakjainak meghatározásához a Desktop Molecular Modellert (DTMM), egy kereskedelmileg kapható korszerű szoftvert, informatikai eszközt alkalmazott. A relaxált szerkezetek szemléltetéséhez, a síkbafejthetőség bizonyításához – a 3D-s DTMM modellek mellett – azok térbeli papírmmodelljeit is elkészítette.

A nanocső hálózat húzásszimulációjának megvalósításához Jelölt dolgozott ki megfelelő, az általa módosított Brenner potenciált alkalmazó algoritmust és számítógépes eljárást.

Megállapítható, hogy Jelölt a kutatási feladatok megoldásához célszerűen választott és **korszerű elméleti és számítógépes módszereket** alkalmazott.

4. Az értekezés tartalmi áttekintése és értékelése

Jelölt az *1.1. fejezetben* foglalja össze a síkbeli trivalens konvex poligonhálózatot alkotó sejtrendszerek topológiájával kapcsolatos irodalmi eredményeket. Ezek közül a számos alkalmazást nyert Aboav törvény képezte a vonatkozó saját kutatási munka alapját, amely rögzített n -oldalú poligont alkotó (tipikus) sejt véletlenül választott közvetlen szomszédja $m(n)$ oldalélszámának feltételes várható értékére egy, a sejtrendszerrel függő „ a ” paraméter tartalmazó, hiperbolikus alakú becslést ad, amellyel a sejt közvetlen szomszédai oldalélszámainak $n \cdot m(n)$ összege lineáris összefüggéssel írható le. E paraméterre különböző sejtrendszerek empirikus statisztikai vizsgálata alapján különböző közelítéseket javasoltak.

E formula levezetését is megkísérelték a maximális entrópia elvének alkalmazásával, melynek nem korrekt voltát a Jelölt által is hivatkozott (7. oldal) cikkében S.N. Chiu mutatta ki, aki egy másik – Jelölt által nem hivatkozott – cikkében (S.N. Chiu: Mean-value formulae for the neighbourhood of the typical cell of a random tessellation, Adv. Appl. Prob. 26. (1994) 565-576) a Palm módszert alkalmazva, trivalens, konvex, véletlen poligonhálózatokra levezette az Aboav törvény egzakt formuláját, amelynek következményeként az értekezésben is szereplő Weaire formula is megkapható. Ebben az „ a ” paraméter a tekintett, n -oldalú sejt előfordulási valószínűségétől ($p_n = P(N=n)$), valamint az n -oldalú szomszédok száma és az oldalélszám, mint véletlen változók közötti, általános esetben nem könnyen meghatározható kovarianciától függő kifejezésként azonosítható. Chiu e cikkében alsó- és felső becsléseket is megadott az $m(n)$ várható szomszédszámra, amelyek a hálózat és a tekintett sejt statisztikai jellemzőitől függenek.

Jelölt, a kutatás első lépéseként, az *1.2. fejezetben* az „ a ” paraméter lehetséges szélső értékeinek vizsgálatához, a különböző trivalens sejthálózatokban a sejtek kapcsolódásainak és az irodalmi adatok tanulmányozása alapján, extrémális jellegű tulajdonságokkal rendelkező hatszögrács alapú, periodikus mintázatokat szerkesztett, amelyek aszimptotikus viselkedéséből helyes következtetéseket vont le az „ a ” paraméter értékeire, illetve azok tartalmi jelentésére vonatkozólag. A tartalmi jelentés illusztrálására olyan sejtrendszereket szerkesztett, amelyek egyebek mellett különböző típusú fizikai és biológiai sejtrendszerek differenciálódásának különböző fázisait is modellezhetik. Ezzel kapcsolatban felmerül a kérdés, hogy a hatszögcellák határát alkotó négyszögek (1.4. ábra), illetve háromszög párok (1.5. ábra) számának növelése milyen feltételek mellett történt? Feltehetőleg az alaprács hatszögeinek a mérete rögzített maradt és a határoló cellák számának növelése mellett a

méretük arányos csökkenése volt feltételezve, hiszen ellenkező esetben az egész sík egyetlen olyan cellává fajulna, amelynek határai a végtelenbe lettek kitolva. Másfelől, az 1.5. ábrán látható hálózatban a trivalens tulajdonság megőrzése is hangsúlyozandó feltétel, hiszen, ha a háromszög-párok csúcsai összeérnek, akkor negyed- és hatodrendű elágazások is keletkeznek. Megjegyzendő, hogy Chiu egzakt formuláját felhasználva, az „a” paraméter lehetséges értékeit illetően végezhető összehasonlító elemzés vélhetően további bizonyítékot is szolgáltatott volna az eredményekhez.

A szén nanocsöves struktúrák szerkezeti, mechanikai és elektromos tulajdonságainak irodalmi összefoglalása után (2.1. fejezet) Jelölt a 2.2., 2.3. és 2.4. fejezetekben bemutatja a szén nanocső elágazások, illetve hálózatok általa kidolgozott, speciális csempéken alapuló szerkesztési módszerét, és ennek alkalmazásait, amelyek például a háromnál több elágazások esetében kifejezetten újszerűek. Ezek tekinthetők a **disszertáció súlyponti, legfontosabb eredményeinek**.

A 2.2. fejezetben a nanocső elágazások síkbeli sejtrendszerekből való származtatása nagyon logikusan a grafén hatszöges rendszerébe épített, 5-, 6- és 7-szögek gyűrűiből kialakított, ún. csempék segítségével történik, amelyek kontúrja pontosan illeszkedik, és így lefedi a hatszöges rendszer 6-7 sejt alkotta részletét. A csempék a különböző típusú (karosszék, cikk-cakk), külső végükön lezárt nanocsövek és a grafénhoz való csatlakozásuk síkvetületei, amelyek a DTMM programmal végzett relaxáltatás révén térbeli C-C kapcsolatokkal, egyensúlyi kötőhelyzetekkel rendelkező szerkezetté alakíthatók.

A 2.2.1. fejezet a különböző kiralitású nanocsövek T, X, Y, tetraéderes, illetve oktaéderes elágazásainak szerkesztését mutatja be az ezekhez kidolgozott csempék felhasználásával, amelyek jelentőségét jól jellemzi, hogy a különböző kiralitású nanocső könyökök, illetve a maximum három, különböző mértékben eltérő kiralitású nanocsőből álló elágazások esetében kísérletileg megfigyelt elektromos viselkedés alapján ezek várhatóan különböző típusú nanoméretű elektronikai, így pl. kapcsoló, egyenirányító és logikai áramkörök alapjait képezhetik.

A 2.3. fejezet a szén nanocsöveknek különböző egyéb, görbült felületű, fullerén típusú nanostruktúrákhoz való csatlakoztatásának módszerét és alkalmazásait ismerteti.

A 2.4. fejezetben Jelölt azt bizonyítja, hogy a tetszőleges szén nanocsőhálózat megszerkeszthető alkalmas nanocső könyökök és Y elágazások felhasználásával. Ehhez feltárja a kétágú nanokörök karosszék és cikk-cakk típusú nanocsövekből előállítható módoszatait, bemutatja ezek és a három, illetve többágú (pl. négyágú), az elektromos viselkedés szempontjából fontos könyököket is tartalmazó nanokörök szerkesztését és azok DTMM programmal, a közvetlenül kapcsolódó szénatomok mellett azok környezetét is figyelembe vevő Brenner potenciál felhasználásával relaxáltatott eredményeit. Ugyancsak a Brenner potenciált alkalmazva, kiszámítja a relaxáltatott szerkezetekre az egy kémiai kötésre eső átlagos kötési energiát, amelyek minden esetben a grafénre és a C60 fullerénre vonatkozó értékek közé esnek, amiből azt a következtetést vonta le, hogy stabilak. Megjegyzendő, hogy az egyedi, egyenes szén nanocsőhöz tartozó érték bevonása az összehasonlítás finomítását is segítette volna.

Itt felmerül a kérdés, hogy vajon az átlagos kötési energia ismert, stabil szerkezetekre vonatkozó értékek közé esése milyen esetekben, milyen feltételek mellett garantálja a vizsgált szerkezet stabilitását?

Jelölt helyesen ismerte fel, hogy a nanocső könyökök, illetve Y elágazások nanokörbe építése geometriai kényszerrel jelent, amelynek következtében azok egyensúlyi állapota megváltozik, ezért lokális vizsgálatokat is végzett a kapcsolódások környezetében. Mindezek alapján karosszék és cikk-cakk típusú nanocsőelemekből felépülő hálózatokra kimutatta, hogy a

kohéziós energia a cikk-cakk típusú nanocsőelemek részarányának növekedésével csökken, tehát a stabilitás nő.

A 3. fejezet a nanocsőhálózatok szilárdságával foglalkozik. Jelölt a 3.1. fejezetben foglalta össze a nanocsővek elméleti úton becsült, vagy mechanikai vizsgálat révén kapott szilárdságát illető irodalmi eredményeket, valamint a kapcsolódó atomok koordinációs szféráját is figyelembe vevő Brenner potenciállal kapcsolatos ismereteket. Az exponenciális függvényekből felépülő Brenner potenciál kifejezésében egy koszinusz formájú ún. levágó függvény szűkíti a kölcsönhatások hatókörét, amely az egyensúlyi kötéstávolság környezetében 1 értékű, azonban azon kívül gyorsan nullába viszi a potenciálfüggvény értékét. Az utóbbi érvényes a potenciálfüggvény deriváltjaként kapható kötőerő alakulására is. A levágófüggvény azonban egyúttal jelentősen megnöveli a kötésszilárdságként értelmezhető erőcsúcs értékét, és törés is jelentkezik a kötőerő lefutásában az egyszer folytonosan differenciálható illesztés miatt.

Jelölt a 3.2. fejezetben írta le a javaslata szerint egy $f_1(r)$ negyed-, illetve $f_2(r)$ harmadrendű polinomból összetett, az említett problémákat lényegében kiküszöbölő (3.8) levágó függvény paramétereit meghatározó (3.9)-(3.17) és (3.29) feltételeket, valamint az ezeknek megfelelő 9 együttható számításához a (3.20)-(3.28) formulákat. A feltételek szerinti levágófüggvény hatásintervallumának kezdetén a potenciálfüggvényhez egyszer folytonosan deriválható módon illeszkedik, ami azt jelenti, hogy a második deriváltként kapható lokális húzómerevség már eltér a potenciálfüggvényből számíthatótól. Ez elsősorban akkor jelenthet nem elhanyagolható különbséget, ha – mint Jelölt egyébként ezt javasolja – az illeszkedési pontot a potenciálmínimum helyére, azaz az egyensúlyi kötéstávolságra helyezzük. Ilyenkor ugyanis a kapcsolódó atomok alkotta rendszernek nem csak a húzószilárdsága, hanem az egyensúlyi helyzetre jellemző húzó-nyomó merevsége is megváltozik a potenciálfüggvény által meghatározotthoz képest (3.4. ábra). Ez az adott helyen kiküszöbölhető, ha a levágófüggvény kétszer folytonosan deriválható módon illeszkedik. Ennek szükségességét illetően azonban nyilvánvalóan *mélyebb fizikai megfontolások* dönthetnek.

A láncolt, azaz egymásután, de csak egyszer alkalmazandó (3.20)-(3.28) képleteket áttekintve, észrevehető, hogy az a_3 formulája maga is tartalmazza az a_3 -at, másfelől az $f_2(r)$ polinom b_1 együtthatójában is megjelenik a „ d ” érték, amely az $f_1(r)$ polinom kezdeti érintőjének meredeksége, így nem érthető, hogy miért befolyásolná az $f_1(r)$ polinom felső végéhez csatlakozó $f_2(r)$ polinom együtthatóit.

Az elvégzett ellenőrző számítások (ld. Melléklet) alapján, az alábbi együtthatók esetén a következő összefüggések adódtak (az a_3 (3.22) kifejezésében a_3 helyett a_4 szerepel, míg a b_1 (3.26) képletében a d felesleges, továbbá a b_0 (3.28) számítási összefüggésében az a_3 helyett b_3 írandó):

$$a_3 = \frac{4a_4(R_T^3 - R_1^3 - 3R_T^2(R_T - R_1)) + 3b_3(R_2 - R_T)^2 + d}{3(R_T - R_1)^2}$$

$$b_1 = -2b_2R_2 - 3b_3R_2^2$$

$$b_0 = -b_1R_1 - b_2R_2^2 - b_3R_2^3$$

Az ellenőrző számítások szerint tehát ezek a közölt számítási, illetve szimulációs vizsgálati eredményeket nyilvánvalóan nem érintő gépelési, azaz index, vagy betűcsere hibák, amelyeknek azonban az ad hangsúlyt, hogy a 10. tételben is szerepelnek. Valószínűleg azért

nem tűntek fel, mert átmásolással kerültek oda, másfelől a vonatkozó, rangos folyóiratban megjelent (I. Zsoldos, I. Laszlo: Computation of the loading diagram and the tensile strength of carbon nanotube networks. Carbon 47 (2009) 1327-1334) lektorált publikációban is ebben a formában szerepelnek (ahonnan egyébként a b_0 kifejezése kimaradt). Ugyanakkor a számítások menetének a disszertációhoz fűzött függelékben való leírása feltehetően észrevételte volna őket.

A levágófüggvényben két része egy inflexiós pontban csatlakozik, amelynek (f_T , R_T) koordinátái a levágófüggvény értelmezési tartományában, illetve a (3.29) monotonitási feltétellel korlátozott értéktartományán belül szabad paraméterek. Irodalmi mérési adatokra támaszkodva, a szabad paramétereknek Jelölt olyan értékeket választott, amelyeknél a kötőerő adott maximális érték (13,3 nN). Az ennek alapján módosított Brenner potenciállal végzett számítások révén a nanocsövek szilárdságára a hivatkozott irodalmi adatoknál szignifikánsan nagyobb értékeket kapott, ami a levágófüggvény módosító hatásának tulajdonítható.

Kérdés: A Brenner szerinti levágófüggvény (3.4) formulájában ugyan $f_{ij}(r_{ij})$ szerepel, azonban e formula szerint a $\cos(\cdot)$ kifejezés és az R_1 , R_2 intervallumhatárok által meghatározott f_{ij} függvény maga nem függ az ij -től. Ezt a tekintett kapcsolódó atomok és azok sík-hatszöges környezetének szimmetriája magyarázhatja. Előfordul-e a disszertációban tárgyalt esetekben, hogy a kapcsolódó atompárok térbeli elsődleges környezete nem szimmetrikus, és a számításokban nem is vehető szimmetrikusnak? Ekkor módosítandó-e, és ha igen, akkor hogyan módosítandó a levágófüggvény?

A módosított Brenner potenciált felhasználva, Jelölt szimulációs modellt dolgozott ki, amellyel vizsgálatokat végzett „szupergyémánt” szerkezetű nanocső hálózatok húzóerő-deformáció kapcsolatának és húzószilárdságának meghatározására. Ennek eredményeit a 3.3. fejezetben foglalta össze.

Nem világos, hogy a húzásszimuláció során a „kocka alakú elemi cella oldalfalain” alkalmazott „periodikus határfeltételek” (82. oldal) pontosan hogyan értelmezendők? A 3.6. ábra (felirata hiányzik) pillanatfelvételei alapján az valószínűsíthető, hogy a peremek a kocka alsó- felső- és oldalsíkjain is befogottak, a rögzített alsó síkkal szemben az oldal- és felső befogások függőleges irányban elmozdulhatnak, azonban a keresztirányú kontrakció mindenütt gátolt. A leírás szerint a nanocsövek mindegyike azonos, karosszék típusú, elágazásaik is azonos szerkezetű, tehát ezek tekintetében a szimmetria teljes, a 3.6. ábrán a deformáció mégsem szimmetrikus az alsó és a felső részeken, így a nagy deformáció és ennek következtében a tönkremenetel is a felső részre korlátozódik.

A húzásszimuláció révén kapott értékek egyébként reálisaknak, az irodalmi eredményeknek összevethetőeknek bizonyultak, a vonatkozó számítások véleményem szerint korrekt összefüggések alapján történtek.

Célszerű lett volna a nanocsőhálózat szilárdságát nem csak a keresztmetszet egységre vetített szilárdsággal, hanem a nanocsőhálózat szakítóerejének a keresztmetszetet metsző számú nanocső átlagos szakítóerejéhez viszonyított nanocsőszilárdság-kihasználás fokával is jellemezni, ezzel lényegében kiküszöbölve a hálózat nanocsőelem-hossztól függő pórusosságának fajlagos szilárdságot csökkentő befolyását.

5. Tézisekről

Jelölt a tudományos eredményeit 11 tézisben foglalta össze, amelyek négy téma köré csoportosulnak, amelyeken belüli állítások egymáshoz szorosan kapcsolódnak.

- Az 1. és 2. tézis az Aboav paraméterrel és annak a síkbeli trivalens poligonhálózatokkal való kapcsolatával foglalkozik.

Az **1. tézis** az Aboav paraméter értéktartományára vonatkozó újszerű állítás, amely elfogadok azzal a megjegyzéssel, hogy az Aboav törvény S.N. Chiu által pontosított alakja (S.N. Chiu: Adv. Appl. Prob. 26. (1994) 565-576) elemzése révén az állítás további megerősítést kaphatott volna.

A **2. tézis**, amely szerint az Aboav paraméter negatív és pozitív értékei különböző típusú, de jól meghatározott szerkezetű trivalens poligonhálózatokat jellemeznek, szintén elfogadható, újszerű állítás.

- A 3-6. tézisek a kidolgozott csempéken alapuló szerkesztési módszer és alkalmazásaival kapcsolatos fontos eredményeket fogalmazzák meg.

A **3. tézis** a módszer nanocső elágazások szerkesztésére való alkalmasságára, a **4. tézis** a szerkesztés szabályaira, az **5. és 6. tézis** a módszerrel definiált elágazó nanocső szerkezetekre és csatlakozásokra vonatkozó állítások, amelyeket együtt új tudományos eredménynek fogadok el.

- A 7-9. tézisek a kidolgozott nanocső elágazások és könyökök, mint építő elemek felhasználásával szerkeszthető nanokörökkel kapcsolatos állítások.

A **7. tézis** a definiált nanokörök szerkeszthetőségére, a **8. tézis** a geometriai kényszerek stabilitására, a **9. tézis** a cikk-cakk típusú nanocsővek arányának hatásáról szóló állítások, amelyek együtt szintén új tudományos eredménynek fogadhatók el.

- A 10. és 11. tézis a vizsgált nanocső hálózat húzásszimulációjához kapcsolódó eredményeket foglalja össze.

A **10. tézis** A Brenner potenciál Jelölt által módosított, két polinomból összetett levágófüggvény előnyeit fogalmazza meg és megadja a vonatkozó együtthatók számítási formuláit. A megadott összefüggések a gépelési hibák miatt nem teljesen korrektek, ezért a tézis ebben a formában nem fogadható el.

A **11. tézis** a vizsgált nanocső hálózat módosított Brenner potenciált alkalmazó húzásszimulációja alapján megfogalmazott állítás, melyet elfogadok, ugyanis megítélésem szerint a számítások korrekt összefüggések alapján történtek.

6. Összefoglaló megállapítások

A 2010-ben született értekezés eredményeit Jelölt 2003 és 2009 között számos nemzetközi folyóiratcikkben, illetve konferenciákban publikálta. A Web of Science szerinti 19 publikációból 13 folyóiratcikk és 2 konferenciacikk kapcsolódik a disszertációhoz, amelyek összességükben 29 idegen hivatkozást kaptak. Ezek közül 2 folyóiratcikk jelent meg az értekezés elkészülte után.

Az értekezés egyik legfontosabb eredményének tekinthető csempés szerkesztési módszer, illetve annak alkalmazásai Jelöltnek figyelemre méltó nemzetközi elismerést szereztek. A munkáira kapott egyéb hivatkozások mellett, E. Taşci fizikus e csempés módszer alapján dolgozta ki a nagyobb átmérőjű csövek csatlakozásainak szerkesztési algoritmusát, valamint egyes mechanikai hajtások nanomodelljeit, és úgy a vonatkozó cikkének (E. Taşci and S. Erkoç: An algorithm for constructing various kinds of nanojunctions using zig-zag and armchair nanotubes. J Nanosci Nanotechnol 2007 Apr-May, 7(4-5), 1653-1661), mint a munkáit összefoglaló PhD disszertációjának (Emre Taşci: Generation and simulation of nanostructures of cage structures. PhD Thesis, Middle East Technical University, Ankara, Turkey, 2007) *absztraktjában* is kiemelte, hogy a csempés módszert Zsoldos Ibolyától vette át.

Jelölt tehát a tézisekhez kapcsolódó eredményeket **megfelelően publikálta** és eredményei révén **nemzetközi elismertséget** szerzett.

Összefoglalva, megállapítható, hogy Zsoldos Ibolya a korábbi tudományos fokozatának megszerzése után a nanocsöves szerkezetek lehetséges formái és alkalmazási területei tanulmányozása, tervezése területén magas színvonalú tudományos munkát végzett és jelentős, nemzetközileg figyelemre méltó eredményeket ért el, hozzájárult a tudomány továbbfejlődéséhez, ezért javaslom a disszertáció **doktori védésre bocsátását** és sikeres védelem esetén az **MTA Doktora cím odaítélését**.

Budapest, 2012. február 12.

Vas László Mihály
az MTA doktora

A Brenner potenciál levágófüggvényét közelítő polinom együtthatóinak ellenőrző számítása

Az értekezésben a Jelölt által alkalmazott, két polinomból összetett (3.8) levágófüggvény (3.18) és (3.19) összetevői és deriváltjaik:

$$f_1(r) = a_0 + a_1 r + a_2 r^2 + a_3 r^3 + a_4 r^4, \quad R_1 \leq r \leq R_T \quad (M1)$$

$$f_1'(r) = a_1 + 2a_2 r + 3a_3 r^2 + 4a_4 r^3 \quad (M2)$$

$$f_1''(r) = 2a_2 + 6a_3 r + 12a_4 r^2 \quad (M3)$$

$$f_2(r) = b_0 + b_1 r + b_2 r^2 + b_3 r^3, \quad R_T \leq r \leq R_2 \quad (M4)$$

$$f_2'(r) = b_1 + 2b_2 r + 3b_3 r^2 \quad (M5)$$

$$f_2''(r) = 2b_2 + 6b_3 r \quad (M6)$$

Az $f_1''(R_T) = 0$ feltételből a (3.24) formulát kapjuk:

$$a_2 = -3a_3 R_T - 6a_4 R_T^2 \quad (M7)$$

míg az $f_1'(R_1) = d$ a (3.25) összefüggést szolgáltatja:

$$a_1 = d - 2a_2 R_1 - 3a_3 R_1^2 - 4a_4 R_1^3 \quad (M8)$$

Hasonlóképpen az $f_2''(R_T) = 0$ feltétel a (3.23) képletre

$$b_2 = -3b_3 R_T \quad (M9)$$

míg az $f_1'(R_2) = 0$ a d -t nem tartalmazó (3.26)-ra vezet:

$$b_1 = -2b_2 R_2 - 3b_3 R_2^2 \quad (M10)$$

Ugyancsak egyszerűen kapható az $f_1(R_1) = 1$ -ből a (3.27):

$$a_0 = 1 - a_1 R_1 + a_2 R_1^2 + a_3 R_1^3 + a_4 R_1^4 \quad (M11)$$

illetve az $f_2(R_2) = 0$ -ből a (3.28)-nak megfelelő alak, amelyben az a_3 helyett a b_3 szerepel:

$$b_0 = -b_1 R_2 - b_2 R_2^2 - b_3 R_2^3 \quad (M12)$$

A b_3 együttható értekezésben közölt formájának meghatározásához érdemes az $f_2(r)$ eltolt alakját használni a következők szerint:

$$f_2(r) = \beta_0 + \beta_1(r - R_T) + \beta_2(r - R_T)^2 + \beta_3(r - R_T)^3 \quad (M13)$$

$$f_2'(r) = \beta_1 + 2\beta_2(r - R_T) + 3\beta_3(r - R_T)^2 \quad (M14)$$

$$f_2''(r) = 2\beta_2 + 6\beta_3(r - R_T) \quad (M15)$$

Itt $f_2(R_T) = f_T$ -ből $\beta_0 = f_T$, $f_2''(R_T) = 0$ -ból $\beta_2 = 0$ következik, így ezek felhasználásával az (M14)-ből az $f_1'(R_2) = 0$ feltétellel kapható:

$$\beta_1 = -3\beta_3(R_2 - R_T)^2 \quad (M16)$$

összefüggést az (M13)-ba helyettesítve, az $f_2(R_2) = 0$ feltételt is érvényesítve, a (3.20) formulához jutunk:

$$0 = f_T - 3\beta_3(R_2 - R_T)^3 + \beta_3(R_2 - R_T)^3 \Rightarrow b_3 = \beta_3 = \frac{f_T}{2(R_2 - R_T)^3} \quad (M17)$$

ahol figyelembe vettük, hogy az (M4) és (M13) jobboldalán lévő polinomok harmadfokú tagjainak együtthatói megegyeznek.

Az $f_1(r)$ (M1)-beli a_4 és a_3 együtthatói – jól követhető, egyszerű átalakításokat alkalmazó – kiszámításához szintén eltolt alakot érdemes használni a következők szerint

$$f_1(r) = \alpha_0 + \alpha_1(r - R_1) + \alpha_2(r - R_1)^2 + \alpha_3(r - R_1)^3 + \alpha_4(r - R_1)^4 \quad (M18)$$

$$f_1'(r) = \alpha_1 + 2\alpha_2(r - R_1) + 3\alpha_3(r - R_1)^2 + 4\alpha_4(r - R_1)^3 \quad (M19)$$

$$f_1''(r) = 2\alpha_2 + 6\alpha_3(r - R_1) + 12\alpha_4(r - R_1)^2 \quad (M20)$$

Itt $f_1(R_1) = 1$ -ből $\alpha_0 = 1$, $f_1'(R_1) = d$ -ből $\alpha_1 = d$, $f_1''(R_T) = 0$ -ból

$$\alpha_2 = -3\alpha_3(R_T - R_1) - 6\alpha_4(R_T - R_1)^2 \quad (M21)$$

következik, amelyeket az (M17)-el együtt az $f_1'(R_T) = f_2'(R_T)$ egyenletbe helyettesítve, átrendezéssel kapjuk az α_3 kifejezését:

$$\begin{aligned} d + 2(-3\alpha_3(R_T - R_1) - 6\alpha_4(R_T - R_1)^2)(R_T - R_1) + 3\alpha_3(R_T - R_1)^2 + 4\alpha_4(R_T - R_1)^3 = \\ = -3b_3(R_2 - R_T)^2 \Rightarrow d - 3\alpha_3(R_T - R_1)^2 - 8\alpha_4(R_T - R_1)^3 = -3b_3(R_2 - R_T)^2 \end{aligned} \quad (M22)$$

$$\alpha_3 = \frac{d - 8\alpha_4(R_T - R_1)^3 + 3b_3(R_2 - R_T)^2}{3(R_T - R_1)^2} \quad (M23)$$

Az

$$f_1(R_T) = f_T = 1 + d(r - R_1) + \alpha_2(r - R_1)^2 + \alpha_3(r - R_1)^3 + \alpha_4(r - R_1)^4 \quad (M24)$$

egyenletbe az (M21)-et, majd az (M23)-at behelyettesítve:

$$\begin{aligned} f_T &= 1 + d(r - R_1) - 3\alpha_3(R_T - R_1)^3 - 6\alpha_4(R_T - R_1)^4 + \alpha_3(r - R_1)^3 + \alpha_4(r - R_1)^4 = \\ &= 1 + d(r - R_1) - 2\alpha_3(R_T - R_1)^3 - 5\alpha_4(R_T - R_1)^4 = \\ &= 1 + d(R_T - R_1) - 2 \frac{d - 8\alpha_4(R_T - R_1)^3 + 3b_3(R_2 - R_T)^2}{3(R_T - R_1)^2} (R_T - R_1)^3 - 5\alpha_4(R_T - R_1)^4 \end{aligned} \quad (M25)$$

Az (M25) átrendezése után, figyelembe véve, hogy $a_4 = \alpha_4$, a (3.21) formulához jutunk:

$$a_4 = \alpha_4 = \frac{3f_T - 3 - d(R_T - R_1) + 6b_3(R_2 - R_T)^2(R_T - R_1)}{(R_T - R_1)^4} \quad (M26)$$

Végül, az (M1)-beli a_3 meghatározásához tekintsük az (M18)-ban az r^3 – binomiális tétel és az (M1)-el való összevetés révén kapható – együtthatóját:

$$\begin{aligned} a_3 &= \alpha_3 - \alpha_4 \binom{4}{3} R_1 = \frac{d - 8a_4(R_T - R_1)^3 + 3b_3(R_2 - R_T)^2 - 12a_4R_1(R_T - R_1)^2}{3(R_T - R_1)^2} = \\ &= \frac{-4a_4(R_T - R_1)^2(2R_T + R_1) + 3b_3(R_2 - R_T)^2 + d}{3(R_T - R_1)^2} = \\ &= \frac{-4a_4(2R_T^3 - 3R_1R_T^2 + R_1^3) + 3b_3(R_2 - R_T)^2 + d}{3(R_T - R_1)^2} = \\ &= \frac{4a_4(R_T^3 - R_1^3 - 3R_T^2(R_T - R_1)) + 3b_3(R_2 - R_T)^2 + d}{3(R_T - R_1)^2} \end{aligned} \quad (M27)$$

amely a (3.22)-vel azonos, de itt a jobboldali nevezőben a_4 szerepel az a_3 helyett.