

Bírálat

Pusztai Tamás

A polikristályos megszilárdulás fázismező

modellje – nukleáció és növekedés

c. MTA doktori értekezéséről

A fázisátalakulások elméletében az 1970-es években, a kritikus jelenségek megértése által kiváltott óriási fellendülésnek alig előrelátható következménye volt, hogy Langer 1980-as úttörő munkáját követően lassan beindult egy sok tekintetben bonyolultabb problémakör: az elsőfajú fázisátalakulások elméleti leírása is. Ennek a területnek a bonyolultságát a folyadékból növesztett kristályos fázisoknak a szimmetriák és kinetikai kényszerek által korlátozott, mégis hihetetlenül gazdag morfológiai sokfélesége adja. Ez a sokféleség mind az ásványok, mind a technika sokféle ágában használt szerkezeti anyagok formájában körülvesz minket, ami a területet a fizikán túli alkalmazásokban is fontossá teszi.

Ez a kutatási irány az ezredforduló körül indult el igazán nagy méretekben, és kezdettől fogva markáns résztvevője volt az SzFKI-ban, mai nevén Wigner FK-SzFI-ben Gránássy László körül formálódó csoport, benne Pusztai Tamással és a csoporthoz formálisan nem tartozó, de meghatározó munkáikban részt vevő Börzsönyi Tamással. A jelen disszertáció Pusztai Tamás jól elválasztható személyes hozzájárulását foglalja össze ebben a kiemelkedően sikeres kutatási programban, amely megkerülhetetlenül fontos eredményeket tett hozzá a problémakör megértéséhez.

A *fázismező-elméletnek* nevezett leírasmód az atomi skálához képest nagyobb méretekben definiált, helyfüggő rendparaméterekkel jellemzi a rendszer állapotát, kristályosodásának előrehaladását, orientációs lehetőségek közötti megoszlását. A rendparaméterekből és hely szerinti deriváltjaikból egy Ginzburg-Landau-szerű szabadenergia épül fel, amelyet kétféle numerikus számításokban lehet felhasználni: egyensúlyi állapotok gyors feltárására, és növekedési kinetika hosszadalmas, nagy terjedelmű számításokkal való

követésére. A disszertáció mindkét irányban végzett intenzív és eredményes munkáról számol be, amely sok nem-triviális új gondolattal vitte előre a terület feltárását.

A munka különös kreativitást kívánó része a rendparaméterek megválasztása, a fizikai tartalmat kifejező de matematikailag kezelhető szabadenergia-tagok megkonstruálása. Ebben a tekintetben Pusztai Tamáshoz kapcsolódik többek között az addig kétdimenziós modellek háromdimenziós kiterjesztése, benne egy váratlan matematikai lépéssel: az orientációk kvaterniókkal való kezelésével, amelynek kivitelezhetősége az atomnál durvább hosszúságskálán múlik.

A tartalmilag is sokrétű munkából kiemelem az előrehaladó kristály-növekedési front mentén történő orientációváltás nukleációjának felvetését és kimerítő körbejárását, amelynek során három különböző mechanizmus is előkerült: a szennyezések körüli orientációváltás, az orientációs diffúzió lelassulása a túlhűtéstől (ez a felismerés a Gránássy-Pusztai kettős egy fontos korai munkájára: a folyadék fluktuáló anizotropiájának bevezetésére épül), és a kristályos anizotropia által vezérelt orientációváltás. Mindezeket meggyőzően sikerült összekapcsolni valóságos természeti és szerkezeti anyagokban megfigyelt morfológiai alakzatokkal.

Az alábbi kérdések csak részletek tisztázására és a további munka perspektíváira irányulnak, a válaszoktól nem függ a disszertáció iránti teljes elismerésem és maximálisan pozitív véleményem.

- A morfológiák szemmel való követésén túl elképzelhető-e az eredmények összevetése kisszögű röntgen- vagy neutron-szórás kísérletekkel is?
- Használható lehet-e a modell hideg megmunkálással létrejövő szerkezetek elemzésére?
- A dendrites növekedés sokszor többé-kevésbé fraktális geometriát követ: a csúcs előrehaladásával egyidőben növekednek az oldalágak, és sokszor ezek ütközhetnek bele szennyező szigetekbe. Mennyire lényeges oldala ez a folyamatnak, és leírja-e a bemutatott elmélet?

- A Ginzburg-Landau szabadenergiában miért nem szerepel $\nabla\varphi \cdot \nabla c$ alakú szorzat? A koncentráció-gradiens, mint vektori hajtóerő valóságos fizikai effektus lehet.
- A spinodális bomlás lehetősége itt úgy jelenik meg, mint a leírás érvényességi határa, pedig a kristályos fázis anizotrópiája miatt ez a határ sokszor elmosódott: keverékek nukleációs alapú szétválását és spinodális bomlását egyaránt a diffúzió kontrollálhatja, és nagyon hasonló morfológiákhoz vezethetnek. Benne van-e ez a lehetőség az elméletben?

Összefoglalva: Pusztai Tamás disszertációjában magas színvonalú, kiemelkedően sikeres és termékeny kutatómunka eredményeit mutatja be. A tézisekben összefoglalt eredményeket változtatás nélkül elfogadom saját eredményeinek. Javaslom a nyilvános védés kitűzését, és az MTA Doktora cím odaítélését.

Budapest, 2014. február 23.



Geszti Tamás

a fizikai tudomány doktora