

DEBRECENI EGYETEM

Természettudományi Kar

Elméleti Fizikai Tanszék

4026 Debrecen, Bem tér 18/B, 4010 Debrecen, Pf. 5.

Telefon: (52) 509200/11193, Fax: (52) 346 758

Bírálat

Pusztai Tamás

A polikristályos megszilárdulás fázismező modellje – nukleáció és növekedés

című MTA Doktori értekezéséről

Dolgozatában Pusztai Tamás a túlhűtött olvadékban lejátszódó polikristályos megszilárdulási folyamatok elméleti vizsgálata során nyert eredményeit foglalja össze. Munkájában a megszilárdulási folyamatokra korábban kidolgozott fázismező modellekre épített, amelyek már komoly sikereket értek el a homogén csíráképződés, valamint az idegen felületen történő heterogén nukleáció leírásában 90° -os nedvesítési szög mellett. A jelölt világosan megfogalmazza a vizsgálatainak motivációját, a szakterület nyitott kérdéseit. A jelenségkör anyagtudományi érdekessége mellett hatalmas gyakorlati jelentőséggel is bír, a modern ipari alkalmazásokhoz szükséges újszerű kompozitok, előre tervezett mechanikai vagy elektromágneses tulajdonságokkal rendelkező anyagok gyártástechnológiai fejlesztését is szolgálja. A szakterület fontosságát, valamint a szerző munkájának elismertségét a tudományos közösségben kiválóan mutatja, hogy több nemzetközi projektek témavezetője volt, valamint publikációra évente 100-nál több hivatkozást kap (forrás: SCOPUS).

A munka nagy erényének tartom, hogy a jelölt egy jól megtervezett kutatási programot hajtott végre, amelynek keretében lépésről-lépésre haladva kiterjesztette a kétdimenziós fázismező elméletet, alkalmassá téve azt a polikristályos növekedés legfontosabb részfolyamatainak a csíráképződésnek és a növekedés folyamatának leírására. Ezt követően kidolgozta az elmélet háromdimenziós térre történő kiterjesztését is, amellyel egyrészt reprodukálta a két dimenzióban feltárt alapvető struktúrákat, másrészt újszerű, csak három dimenzióban létező struktúrákat tárt fel. A kutatómunka tisztán elméleti jellegű, a polikristályos növekedés egyes modelljeiben parciális differenciálegyenlet rendszereket származtatott, amelyek megoldása nagyskálájú számítógépes szimulációval történt.

A dolgozat felépítése

A 104 oldalas dolgozat hat fő részből épül fel: *Bevezetés, A megszilárdulással kapcsolatos alapfolyamatok, A fázismező modell alapjai, Csíráképződés, Növekedés*, valamint az *Összefoglalás, tézispontok*. A *Bevezetés* célratorően mutatja be a jelölt saját kutatómunkájának motivációjául szolgáló jelenségkört, annak elméleti és gyakorlati jelentőségét, vázolja a szakterület legfontosabb nyitott kérdéseit, valamint néhány oldal után megfogalmazza a dolgozat fő célkitűzéseit is. A fejezet rövid irodalmi áttekintéssel bemutatja

a különböző hosszúság skálákon alkalmazható elméleti leírás megközelítési módszereit, valamint vázolja a szerző által használt fázismező modellek alap koncepcióját.

Nagyon hasznosnak találtam az ezt követő *A megszilárdulással kapcsolatos alapfolyamatok* című fejezetet, amely nagyon világosan, közérthetően foglalja össze azokat a részfolyamatokat, amelyek domináns szerepet játszanak a megszilárdulás időfejlődésében és alapvetően meghatározzák a létrejött struktúrák jellemzőit. Itt bevezetésre kerülnek a szakterület legfontosabb alapfogalmai és egyfajta áttekintést kapunk a kutatómunkát motiváló kísérleti eredményekről is.

A jelölt vizsgálatai elsősorban a fázismező modellre épülnek. Ennek megfelelően az ezt bemutató *A fázismező modell alapjai* című fejezet a dolgozat legrészletesebb része. Rövid történeti áttekintést követően a szakirodalom alapján megmutatja a fázismező modellben a csíráképződés és kristálynövekedés leírására bevezetett rendparaméterek motivációját és részletesen kifejti, hogyan építhető fel a rendszer szabadenergiája a rendparaméterek funkcionáljaként. Kitér arra, hogy a szabadenergia szélsőértékeit keresve, hogyan származtathatók időfüggetlen, illetve a növekedés folyamatát leíró időfüggő megoldások, továbbá az anizotropia és lokális orientáció jellemzése milyen mennyiségek bevezetésével érhető el. A fejezet egyrészt támaszkodik az előző két fejezetre, másrészt nagyon jól előkészíti a jelölt saját eredményeinek későbbi bemutatását is. Ez az első három fejezet tekinthető egyfajta tömör irodalmi áttekintésnek.

Ezt követően a csíráképződés és növekedés fázismező vizsgálata során elért eredményeit jól elkülönülő fejezetekben tárgyalja. Az egyes fejezetek szintén a problémakör rövid irodalmi áttekintésével kezdődnek, ahol egyben megfogalmazódnak a konkrét kutatási feladatok és célkitűzések is. A saját eredmények ismertetése nagyon szépen, didaktikusan van felépítve. Az elméleti háttér birtokában csak kisszámú egyenlettel, a nem szakember számára is kifejezetten érthetően, élvezetesen fogalmazza meg a legfontosabb eredményeit.

A dolgozat általános felépítése jól áttekinthető, egyértelműen elkülönül benne a jelölt munkásságának bemutatása, könnyen azonosíthatók a jelölt saját eredményei. A dolgozat megfogalmazása lényegre törő, világos, dicséretesen kevés benne az elírás. Az ábrák többnyire jól kidolgozottak, informatívak és támogatják a szerző következtetéseit. Hasznosnak tartom, hogy a dolgozat végén található *Összefoglalás* fejezet tartalmilag megegyezik a téziszűzettel. A dolgozat 76 referenciára támaszkodik, amelyek között számos könyv, monográfia szerepel.

Megjegyzések, kérdések a dolgozat szerkesztésével kapcsolatban

1. Az irodalmi háttér bemutatása nagyon célirányosan történt, az első három fejezet elsősorban azt szolgálja, hogy felvezesse a jelölt által használt fázismező modell motivációját, alapfogalmain, valamint a modellel végzett vizsgálatok menetét és kihívásait. Alig tudunk meg valamit arról, hogy mezoszkopikus skálán vannak-e más elméleti megközelítések (más hosszúságskálákon használt módszereket röviden vázol a szerző), vagy esetleg ugyancsak a fázismező modellt használva mások milyen sikereket értek el. Azt is érdekes lett volna röviden bemutatni, hol vannak a fázismező modellel történő leírás határai, vannak-e olyan kísérleti eredmények, amelyeket a modell nem tud kellő pontossággal leírni. Ehhez természetesen szerencsés lett volna

további referenciákkal kiegészíteni a dolgozatot, ami növelte volna a kutatómunka, illetve a dolgozat háttérének mélységét.

2. A szerző munkája, a megfelelő fázismező modell származtatását követően elsősorban numerikus számolásokra, számítógépes szimulációra épül. Ezért hasznosnak éreztem volna, 2-3 további oldalban tárgyalni a modellek számítógépes megvalósításának problémáit. Szintén hasznos lett volna egy olyan jellegű ábrával kiegészíteni a numerikus módszerek bemutatását a dolgozat elején, mint a 72. oldalon szereplő 32. ábra.
3. A dolgozat szerkesztése gondosan történt, a szövegben nagyon kevés az elírás. Egy két zavaró apróságot lehet említeni:
 - Az 55. oldalon látható 18. ábrára nem találtam hivatkozást. Az 54. oldal kapcsolódó bekezdése csak a kísérleti eredményt bemutató 19. ábrára hivatkozik.
 - A referenciák között a 67. esetén csak a szerzők neve van feltüntetve.
 - Kicsit zavaró, hogy a referenciák megadásának formátuma nem egységes, helyenként nem világos, pontosan mi a kötetszám és az oldalszám, időnként feltűnik az éven belüli kiadás száma is a koordináták között.

A jelölt kutatómunkája

A negyedik fejezettől kezdve a szerző ismerteti a szakterületen elért legfontosabb elméleti eredményeit. Az egyes fejezetek elején a szerző túlzó részletek nélkül, elsősorban jelenségszintű leírását adja a konkrét kérdéskörnek, bevezeti a későbbiek megértéséhez szükséges fogalmakat, és megvilágítja a *Bevezetőben* vázlatosan kitűzött kutatási célok háttérét, jelentőségét. A fázismező modell keretében végzett vizsgálatai nem előzmény nélküliek, egy nagyon sikeres kutatócsoport tagjaként, munkája korábbi modellfejlesztések eredményeire épül. A szerző jól körülhatárolja, milyen alapokra építkezett a dolgozat eredményeinek elérésénél.

A bevezető fejezetekre építve nagyon világosan mutatja be saját munkásságát. A csíráképződésre bevezetett három modelljének analitikus és numerikus eredményeit a növekedés fázismező modellezése követi. A növekedést bemutató fejezet bár nagyon világos és szemléletes, az előző csíráképződéshez viszonyítva erősen kvalitatívnak hat. Szerencsés lett volna látni kvantitatív eredményeket, mennyiségi összefüggéseket is.

A fázismező modell háromdimenziós kiterjesztésénél a kvaterniók felhasználásával elegáns leírását adja az orientációs mezőnek, illetve térfogatelemek relatív orientációjának. Kifejti a rendszer szabadenergiáját az új változók segítségével és megadja a mozgásegyenleteket, amelyekhez nagyon szemléletes jelentést tud társítani. A háromdimenziós vizsgálatai elsősorban a két dimenzióban talált kristályosodási módusok reprodukálására szorítkozik, de talál egy olyan struktúrát is, amelynek nem volt kétdimenziós megfelelője.

Elmondható, hogy a dolgozat jól megvilágítja a Tézisfüzetben tömören összefoglalt kutatási eredmények háttérét. A tézispontokban megfogalmazott eredmények 10 publikációra épülnek, amelyek közül kettő a Nature Materials-ban, egy pedig a Physical Review Letters-ben jelent meg, de a többi publikáció is jó impakt faktorral rendelkezik. Ezek a publikációk mindenképpen azt jelzik, hogy a szerző jelentős eredményeket ért el, amelyek, a

hivatkozásai alapján, komoly nemzetközi visszhangot váltottak ki. A publikációk néhány szerzősek, a szerző három cikkben szerepel az első helyen, általában pedig második a szerzői listán. Mivel kutatócsoport tagjaként dolgozott, hasznos lett volna, ha a dolgozatban röviden vázolja saját szerepét az eredmények elérésében.

Kicsit talán meglepő, hogy a dolgozat alapjául szolgáló közlemények között a legfrissebb 2009-ben jelent meg. A bíráló szívesen olvasott volna arról, hogy a kutatómunkát milyen irányokban tervezi folytatni a szerző, hol látja a következő kihívásokat a fázismező modell számára.

A jelöltnek a következő kérdéseket szeretném feltenni:

1. Hogyan viszonyul egymáshoz a két- és háromdimenziós modell számítógépes szimulációjának CPU idő igénye? A dolgozatában az összevetés alapját a számolásokhoz használt PC klaszter mérete jelenti, de nem világos, hogy hány magra/szálra kell gondolni, illetve milyen processzorokról van szó. A szimulációs programnak melyik a legidőigényesebb része?
2. A dolgozatban számos helyen összehasonlítja a szimulációval kapott eredményeit kristálynövekedésre végzett kísérletekkel. Az egyezés sok esetben valóban impresszív, azonban az összehasonlítás mindig csak „vizuálisan” történik. Struktúrák hasonlóságának kvantitatív jellemzésére bevezettek-e valamilyen kísérletekben és szimulációban egyaránt mérhető mennyiséget?
3. Részletesen elemezte a szennyezők hatását a dentrit-csúcs eltérülésére. Az 55. oldal ábrái nagyon szépen illusztrálják a szennyező méretének, orientációjának és a dentrit-csúcs tengelyétől mért távolságának a hatását. Történt-e a mennyiségi jellemzése a szennyezők hatásának, fel lehet-e állítani valamilyen összefüggést például a szennyező mérete és az eltérülés mértéke között?
4. A lehűlés közben megszilárduló anyagban előfordulhat az is, hogy a például a hőmérséklet gradiens miatt mechanikai feszültség jön létre, ami repedések kialakulását okozza. A jelenségre nagyon szép példa a vulkánkitörést követően a megszilárduló lávában létrejövő repedések, amelyek sokszor meglepően szabályos, hatszöges alakú lávaoszlopok kialakulását eredményezik. Magyarországon ilyen képződmény a Hegyestű (Balaton-felvidéki Nemzeti Park).
Alkalmassá lehet-e tenni a kontinuum fázismező elméletet az ilyen repedések által okozott diszkontinuitás kezelésére és a megszilárdulás közben létrejövő repedésnövekedés leírására?
5. A háromdimenziós kristályosodás esetén kiválóan reprodukálta a korábban két dimenzióban talált struktúrákat, kristályosodási módusokat. Egy olyan struktúrát mutat be, amelynek nincs kétdimenziós megfelelője, de itt is nagyon szép egyezést talál a kísérleti eredményekkel. Megemlíti, hogy a különleges struktúra létrejöttének részleteit még nem sikerült megérteni. Az itt hivatkozott saját publikációk közül a legfrissebb 2008-ban jelent meg. Ezt a kutatási irányt később nem folytatta, vagy a probléma olyan nehéznek bizonyult, hogy azóta sem született kimerítő magyarázat a jelenségre?

A dolgozat egy magas színvonalú kutatómunka összefoglalása. A jelöltnek a dolgozatban bemutatott eredményei kohérens egészt alkotnak, amelyet a szakterület legelismertebb folyóirataiban publikált. A publikációk impakt faktora és idézettsége alapján az eredmények komoly nemzetközi visszhangot váltottak ki. A jelölt világosan megmutatta, hogy milyen motivációkból kiindulva, milyen konkrét kísérleti problémák vizsgálata alapján fejlesztette tovább a fázismező modellt eljutva egészen a háromdimenziós kiterjesztésig. Elméleti eredményei egyrészt reprodukálták a csíráképződés és a polikristályos növekedés fő jellemzőit, a megfigyelt morfológiákat, másrészt segítettek feltárni a strukturális jellemzőkért felelős mechanizmusokat mezoszkopikus skálán. Tudományos értékük mellett eredményeinek kiterjedt gyakorlati hasznosítása lehetséges. A tézispontok tömören fogalmazzák meg a szerző eredményeit, amelyet a dolgozat részletesebb kifejtése, valamint a megadott 10 közlemény megfelelően alátámaszt.

A fentiek alapján a doktori munka tudományos eredményeit elegendőnek tartom az MTA doktori cím megszerzéséhez és a nyilvános védelem kitűzését javaslom.

Debrecen, 2014. március 26.

Dr. Kun Ferenc
egyetemi docens