

# **Bírálat**

**Somfai Ellák**

Hőmérsékleti egyensúlytól távoli statisztikus fizikai rendszerek

numerikus modellezése

című MTA doktori értekezéséről

Írta: Baranyai András egyetemi tanár, ELTE, Kémiai Intézet

A cím egy kicsit félrevezető volt a számomra és, azt hiszem, a bizottság számára is, amelyik opponensnek kért fel. Jobban beleolvasva, érdeklődési területemtől távolabbi kutatásokról szól, mint amire számítottam. Ez, természetesen, nem a jelöltet minősíti, hanem az opponenst, aki felületes volt, amikor elvállalta a dolgozat bírálatát.

A dolgozat két fő fejezetből áll. Az első három részre tagolódik, és diffúziós jelenségeket tárgyal: kristályfelületen, növekedési folyamatokban és táguló térben. A második rész szemcsés anyagok modellezésével foglalkozik. Bár a diffúzió általánosságban nemegyensúlyi folyamat az egyensúlytól távoli kifejezés, érzésem szerint, nem szerencsés, hiszen pl. a kristályfelületen bolyongó adatom mozgását semmilyen termodinamikai erő nem hajtja, ahogy az egyensúlyi fluidumokban is mindig van öndiffúzió. Szemcsés anyagoknak, ahogy a szerző is írta, makroszkópikus méretük folytán nincs termális mozgásuk, tehát a hőmérsékleti egyensúly sem lehet rájuk érvényes, hiszen a hőmérséklet változása nem

befolyásolja a ülepedett szerkezetüket. Adekvát cím lehetne inkább „Diffúziós jelenségek és szemcsés anyagok modellezése”.

A címmel kapcsolatos megjegyzésemtől eltekintve a dolgozat nagyon szépen van szerkesztve. Érthető, világos nyelvezettel íródott, kellően tagolt, jól követhető. Nem nagyon vannak benne tipográfiai hibák sem.

Az első rész a réz kristály Cu(001) felületére deponált indium atom diffúzióját vizsgálja kísérletileg pásztázó alagút mikroszkóppal, szimulációval diszkrét modellen és analitikus megoldásra vezető folytonos leírással. A jelölt numerikusan pontosan, s egyben szemléletesen írja le az adatok bolyongásának a felületi vakanciák viselkedése által meghatározott mechanizmusát.

A jelölt végső konklúziója, hogy a konkrét példára megállapított mechanizmus relevanciája egyéb rendszerekre is érvényes. Milyen méretbeli vagy fizikai-kémiai különbsége lehet a fémkristálynak és az adatoknak, ami már más mechanizmust követ?

A következő rész diffúzió-dominált növekedési folyamatokat vizsgál. A bevezetőben a jelölt utal néhány kísérletileg is megfigyelhető jelenségre, amelyekben a növekedési folyamat sebességét a diffúzió határozza meg. A továbbiakban azonban a számítások nem kapcsolódnak kísérleti adatokhoz, hanem modelltípusok vizsgálatát szolgálják. A diffúzió limitált aggregáció skálázásához a jelölt egy szimulációs eljárást ír le, amelyben a nóvum, hogy rácsmentes modellre adaptálta a „zajcsökkentés” módszerét. Ezzel a technikával igazolni tudta, hogy a DLA fürtök nem multiskálázódnak. Az ennyire steril modellértelmezéseknél kijön belőlem a kémikus, és azt kérdezem, hogy mi lenne, ha a fürtökbe beépülő részecskék, ahogy a kémiában tipikus, szögfüggő kapcsolódási preferenciákkal is rendelkeznének? Például a hópihéék is diffúzió-dominált növekedési folyamatokban keletkeznek, de lévén makroszkópikus entitások, a vázolt atomos aggregáció egy módosított változata lenne érvényes rájuk, mivel lényegében kristálydarabkák fürtjeiről van szó.

Az I.C. fejezet a táguló térben történő diffúzió skálainvarianciáival foglalkozik. A fejezet eredményeit a T5 tézispont foglalja össze. A probléma számomra nehezen köthető valós rendszerek viselkedéséhez, bár a szerző említ néhány lehetséges területet. Az univerzalitás keresése, ami egyébként végigvonul az egész dolgozaton, ebben a részben megköveteli, hogy a részecskék kölcsönhatása az annihilációra vagy az egybeolvadásra szorítkozzon., ami nem gyakran előforduló jelenség. Igazából egy, a populáció dinamikához köthető modell tűnik szorosabban kapcsolódónak. Ha mondjuk, a jelölt diffúziót vizsgálna táguló térben, például egy dugattyúban lévő véges méretű és kölcsönhatású részecskék fluidumában, akkor mit tudna mondani annak viselkedéséről és viszonyáról az általa leírt problémához képest?

A II. fejezet a diffúzióhoz nem kapcsolódó problémakörrel, szemcsés anyagok modellezésével foglalkozik. Erről a problémakörrel először 1990-ben az első európai folyadék-konferencián hallottam, ahol a dolgozatban is többször idézett Edwards professzor elmondta, hogy csak egy élelmiszer-konszerntől tudott kutatási támogatást szerezni, ezért most a pudingokról fog beszélni. Ezt akkor még derűtség fogadta és, emlékeim szerint, viszonylag elementáris észrevételekről beszélt. Mára viszont a jelölt egy jól megalapozott kutatási területbe merül bele, amit négy alfejezetben ismertet. Az elsőben a szimulációs technika leírása, a másodikban az általa végrehajtott numerikus szimulációkból nyert erőhálózatok univerzalitása, a harmadikban pedig a torlódási átmenet közelében tapasztalható kritikus átmenet leírása szerepel. Az utolsó alfejezetben, hasonlóan a dolgozat legelső részéhez kísérleti eredményekkel is összeveti a modellszámítások eredményeit. Ennek az utolsó résznek az erénye, hogy kísérleti eredményekhez köthető, talán azért is, mert rugalmas hullámok szemcsés anyagokban történő terjedésének van gyakorlati jelentősége is.

A dolgozat alaposan megírt munka egy általános törekvéssel, hogy tudniillik minden vizsgált problémát valamilyen skálázási technikával akár a modell saját paramétertartományán belül, akár analóg módon leírható problémákkal együtt egy univerzálitási osztályba igyekszik

sorolni. Ezt a feladatot a jelölt nyolc tézispontjában összefoglalva a vizsgált modellekre megtette. Földhözragadt kémikusként ugyan némelyik problémát egy kicsit sterilen absztraktnak találtam, ahol csak utalások szintjén volt felvetve a kapcsolat lehetősége valós, esetenként kísérletileg is vizsgálható problémákhoz. Mindazonáltal, mivel nem ismerem a területet annyira, hogy meg tudjam ítélni a prezentált anyag súlyát és jelentőségét (azon túlmenően, amit a publikációk és a kapcsolt hivatkozások mutatnak), feltételezve az eredeti közlemények bírálóinak nagyobb kompetenciáját, a dolgozatot vitára bocsáthatónak gondolom, és sikeres védelem esetén az MTA doktori cím megítélését támogatom.

Budapest, 2015. szeptember 24.