

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

Somfai Ellák

*Hőmérsékleti egyensúlytól távoli
statisztikus fizikai rendszerek numerikus modellezése*

című MTA Doktori értekezéséről

Dolgozatában Somfai Ellák a nemegyensúlyi statisztikus fizikai rendszerek vizsgálata során nyert eredményeit foglalja össze. Munkája szerteágazó, a nem-egyensúlyi rendszerek több olyan területére is kiterjed, amelyek az elmúlt 15-20 évben a fizikai kutatások frontvonalába tartoztak: diffúziós folyamatok vizsgálatával magyarázatát adta egy érdekes felületfizikai jelenségnek, valamint tisztázta a diffúzió által dominált növekedési folyamatoknak a szakirodalomban meglévő több ellentmondásos eredményét is. Vizsgálatait kiterjesztette táguló térben végbemenő folyamatokra, amellyel ígéretes módszert dolgozott ki jelenségek egy tágabb körének kezelésére. Szemcsés anyagok statikus és kvázistatikus jellemzőinek elemzésével feltárta az erőláncok térbeli hálózatának statisztikus és szerkezeti jellemzőit, vizsgálta a rendszer rezgési sajátosságait, valamint a hullámterjedés tulajdonságait. A jelenségkör fizikai, anyagtudományi érdekessége mellett gyakorlati jelentőséggel is bír, több esetben modern ipari alkalmazások alapjául is szolgálhatnak.

A kutatómunka tisztán elméleti jellegű, de számos esetben a jelölt kísérleti csoportokkal szorosan együttműködve érte el eredményeit. Az együttműködés keretében elméleti vizsgálatait érdekes kísérleti felfedezések motiválták, valamint kutatómunkájával magyarázatát adta több jelenségnek is. A jelölt munkája elsősorban a statisztikus fizika megközelítési módszereire épül, kiterjedten használ mind analitikus elméleti számolásokat, mind számítógépes szimulációt. A munka nagy erényének tartom a szimulációs vizsgálatok pontosságát, a kifejlesztett a szimulációs módszereknek a szakirodalomban meglévőkhöz viszonyítva néhol egyedülálló hatékonyságát.

A dolgozat felépítése

A 110 oldalas dolgozat hat fő részből épül fel, amelyeket egy *Függelék* egészít ki: *Bevezetés*, *Diffúziós jelenségek kristályfelületeken*, *Diffúzió-dominált növekedési folyamatok*, *Diffúzió táguló térben*, *Szemcsés anyagok modellezése*, valamint az *Összefoglalás*. A *Bevezetés* nagyon röviden, mindössze két oldalban, mutatja be azt a szakterületet, ahol a jelölt saját kutatómunkáját végezte. Az első bekezdés egy történeti áttekintést ad a nem-egyensúlyi rendszerek statisztikus fizikájának fejlődéséről, vázolja az elmúlt évtizedek főbb kutatási irányait. A következő bekezdésben a jelölt nagyon röviden ismerteti, hogy kutatómunkája a

tágabb szakterület mely ágaihoz kapcsolódik, majd a fejezet hátralévő részében elsősorban a vizsgálati módszerek bemutatásán keresztül tudunk meg többet a jelölt saját kutatásairól.

A dolgozat szerkesztése mindenképpen sajátos, mert a *Bevezető* nem ad áttekintést az érintett területek nyitott kérdéseiről, itt nem ismerjük meg a jelölt vizsgálatainak motivációit és nem történik meg semmilyen célkitűzés megfogalmazása sem. A következő fejezetek már a tézispontokban is megfogalmazott eredmények bővebb kifejtését tartalmazzák. Ezt a szerkesztési módot azzal lehet indokolni, hogy a jelölt munkája sokszínű, több, egymástól elkülönülő területre is kiterjed, amelyek között a fő kapocs a statisztika fizika, valamint a vizsgálati módszerek közül a számítógépes szimuláció kiterjedt használata. Ennek következtében a kutatómunka háttérének bemutatása átkerült a konkrét eredményeket ismertető fejezetek elejére, a fő fejezetek első egy-két alfejezete vette át ezt a szerepet. Ezek a bevezető jellegű alfejezetek bőséges referenciákra épülnek, ami a jelölt széleskörű ismereteire utal, ugyanakkor meglehetősen rövidke, tömörek. Célszerűnek tartottam volna bővebben kifejteni a vizsgálatok motivációit, a szakterület eredményeit és legfontosabb nyitott kérdéseit, hogy jobban elhelyezhető legyen a jelölt saját munkássága. Erre a dolgozat terjedelme lehetőséget biztosított volna.

Ezt követően a jelölt a diffúziós jelenségek (diffúzió kristályfelületeken, diffúzió-dominált növekedési folyamatok és diffúzió táguló térben) és a szemcsés anyagok vizsgálata során elért eredményeit jól elkülönülő fejezetekben (alfejezetekben) tárgyalja. Az egyes fejezetek a jelenség, illetve problémakör rövid irodalmi áttekintésével kezdődnek, ahol egyben megfogalmazódnak a konkrét kutatási feladatok és célkitűzések is. A saját eredmények ismertetése nagyon szépen, didaktikusan van felépítve. A jelölt viszonylag kisszámú egyenlettel, a nem szakember számára is kifejezetten érthetően, élvezetesen fogalmazza meg a legfontosabb eredményeit. A fejezetek elején röviden kitér arra is, hogy az ismertetésre kerülő eredmények milyen publikációkban jelentek meg, valamint részletezi ezek létrejöttében játszott szerepét is.

A dolgozat végén található *Összefoglalás* című fejezet ismét nem szokványos, fél oldalban elsősorban a jelölt eredményeinek visszhangját ismerteti a tudományos szakirodalomban és a tágabb médiában. A szokásos értelemben vett összefoglalás szerepét inkább a függelék A pontja játssza, amely az új tudományos eredményeket tézispontok formájában mondja ki, bár itt hiányzik a módszertani aspektusok bemutatása.

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. A szöveges kifejtést nagyon szép grafikus illusztrációk egészítik ki, az ábrák többnyire jól kidolgozottak, informatívak és támogatják a szerző következtetéseit.

A dolgozat 154 referenciára támaszkodik, amelyek között számos könyv, monográfia szerepel. A dolgozat alapjául szolgáló, valamint a saját, de a dolgozat témájához szorosan nem kapcsolódó publikációk elkülönítve kaptak helyet.

Megjegyzések, a dolgozat szerkesztésével kapcsolatban

1. Az egyes fejezetek elején a vizsgálatok irodalmi háttérének bemutatása nagyon célirányosan történt, alig megy túl az ismertetés a kapcsolódó publikációk bevezetőinek anyagán. Az elért eredmények jelentőségének megvilágításához hasznos

lett volna kitekinteni a tágabb szakterületre is, ami növelte volna a kutatómunka, illetve a dolgozat háttérének mélységét.

2. A szerző munkája erősen támaszkodik a számítógépes szimuláció lehetőségeire, több eredménye hatékony szimulációs módszer fejlesztését is magában foglalja. Ez alapján hasznosnak találtam volna 2-3 oldalban bővebben kifejteni a szerző által kidolgozott szimulációs módszereket, vázolni implementációjuk nehézségeit és demonstrálni képességeiket összevetve a szakirodalom korábbi eredményeivel.
3. A dolgozat szerkesztése gondosan történt, a szövegben nagyon kevés az elírás. A szerző gondot fordított a magyar szakkifejezések használatára is.
4. Mivel a szerző az eredményeinek összegzését a *Függelékben* helyezte el, hasznosnak tartottam volna, ha az *Összefoglalás* fejezetben nagyobb teret fordít arra, hogy elhelyezze eredményeit a szakirodalomban, röviden bemutassa, hogy a jelölt maga, illetve mások a szakterületen hogyan folytatták a kutatásokat, gondolták tovább az eredményeket. Érdemes lett volna egy kitekintést adni arról, milyen jövőbeni tervei, lehetőségei vannak a munka folytatásának.

A jelölt kutatómunkája

A nagyon rövid bevezetőt követően, már a negyedik oldaltól a szerző ismerteti a legfontosabb eredményeit, az érintett szakterületeknek megfelelően két nagyobb fejezetre bontva. Doktori munkásságának nagyobb részét a diffúziós jelenségek területén végezte, ennek megfelelően az eredményeket bemutató fejezet további három alfejezetre tagolódik. Az egyes fejezetek/alfejezetek elején a szerző tömör, elsősorban jelenségszintű leírását adja a konkrét kérdéskörnek, bevezeti a későbbiek megértéséhez szükséges fogalmakat, és röviden vázolja a kitűzött kutatási célokat, azok jelentőségét.

Fontos jellemzője a jelölt kutatásainak, hogy munkája elméleti jellegű, amelyben kiterjedten használja a számítógépes szimuláció eszköztárát. Diszkrét modelleket dolgozott ki, fejlesztett tovább, vagy implementált a szakirodalomból, amelyekhez hatékony szimulációs módszereket fejlesztett. Ez a megközelítés lehetővé tette számára, hogy a korábbiaknál pontosabb, realisztikusabb modellezést végezzen és szorosan együttműködjön kísérleti csoportokkal. Több esetben projektjeinek motivációját egy-egy konkrét kísérleti megfigyelés, mérési eredmény adta, majd elméleti vizsgálatai alapján egy szélesebb jelenségek kör leírását, magyarázatát tudta megadni. Erre talán legszebb példa az I.A fejezetben bemutatott kristályfelületeken lejátszódó diffúziós jelenségek, de a szemcsés anyagok területén is számos kísérleti eredményt tárgyal, amelyekkel jó egyezést talált.

Indium atomok réz egykristály (001) indexű felületén történő mozgását kísérleti partnerekkel szorosan együttműködve vizsgálta. Pásztázó elektronmikroszkópos felvételek alapján megállapították, hogy az Indium atomok mozgását a felületi vakanciák okozzák. A kísérletek által feltárt mechanizmus alapján szemléletes atomi modellt dolgozott ki, amellyel nagy pontossággal sikerült leírni a jelenséget. Elvégezte a diszkrét modell kontinuum kiterjesztését is.

A jelölt dolgozatban bemutatott munkásságának egy jelentős része a diffúzió-limitált aggregációs jelenségek témaköréhez tartozik. Ezen a több évtizede művelt, érett szakterületen is sikerült érdeklődést kiváltó eredményeket elérnie. Vizsgálatai során több olyan kérdésre kereste a választ, amelyekre a szakirodalomban az elmúlt évtizedek során olykor

ellentmondásos eredmények születtek. Az általa fejlesztett szimulációs módszereknek köszönhetően a korábbiaknál jelentősen nagyobb rendszerméreteket volt képes szimulálni és így tisztázni tudta a DLA fürtök skálázási tulajdonságait.

Hatékony mintavételezésen alapuló numerikus eljárást dolgozott ki a diffúzió-limitált aggregáció nemlineáris kiterjesztésére, amellyel részletesen elemezte skálaexponensek függését a modell paraméterétől, valamint meghatározta a modellek multifraktál spektrumát is. Számítógépes szimulációval vizsgálta a csatorna geometriában létrejött DLA fürtök strukturális jellemzőit, majd analitikus és numerikus vizsgálatokkal megmutatta, hogy a növekedő geometriában lejátszódó növekedés, skálainvariáns struktúrák egy széles osztályára leképezhető egy fix szélességű tartományon történő növekedésre.

A szemcsés anyagok terén vizsgálatai elsősorban a statikus és kvázistatikus jellemzőkre terjedtek ki. A diszkrét elem szimulációs módszer segítségével numerikusan vizsgálta a szemcsés anyagban nyomás alatt létrejövő erőhálózat statisztikus és strukturális tulajdonságait, valamint ezek függését a külső nyomástól és a rendszer belső paramétereitől. Rugalmas hullámok terjedését részben lineáris algebra alkalmazásával, részben pedig a perturbált rendszer időfejlődésének molekuláris dinamikai szimulációval történő direkt előállításával analizálta.

Összességében a dolgozat didaktikusan felépítve, jól megvilágítja a Tézispontokban tömören összefoglalt kutatási eredmények hátterét. A tézispontokban megfogalmazott eredmények 13 publikációra épülnek, amelyek közül kettő a Nature-ben, 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 hivatkozásaik alapján, komoly nemzetközi visszhangot váltottak ki. A publikációk néhány szerzősek, a szerző hat cikkben szerepel az első helyen, általában pedig második a szerzői listán. Fontos megemlíteni, hogy az egyes fejezetek elején kitér a saját szerepére az eredmények létrejöttében, továbbá egyes tézispontok megfogalmazásában az egyes szám első személy használatával is kiemeli domináns szerepét. Ugyanakkor nem tartom szerencsésnek, hogy a T3 tézispont egyetlen olyan publikációra épül, amely a Physical Review E folyóiratban történt 2004-es megjelenése óta egyetlen független hivatkozást sem kapott.

A jelöltnek a következő kérdéseket szeretném feltenni:

1. A nemlineáris növekedési modell (dielektromos letörési modell) egyik érdekes alkalmazása a szakirodalomban a heterogén anyagokban keletkező repedések növekedésének, illetve struktúrájának vizsgálata volt. Számítógépes szimulációval azt találták, hogy a repedések fraktáldimenziója az η paraméter és a külső terhelés típusa (húzás, nyírás, ...) mellett a diszkretizációhoz használt rács típustól, sőt adott rácsnál a szomszédsági viszonyok kezelésétől is függött (például: J. Kertész, *Dielectric breakdown and single crack models*, in H. J. Herrmann and S. Roux (eds.), *Statistical models for the fracture of disordered media*, North Holland, Amsterdam). Mivel szimulációkat csak viszonylag kis rendszereken lehetett végezni, kérdéses volt, hogy a rácsjellemzők hatását véges méret effektus okozza. A hatékonyabb szimulációs módszerek használatával, nagyobb méretű rendszerek szimulációjával, hogyan sikerült tisztázni a nemlineáris növekedés ilyen jellegű problémáit?

2. A mérés technika nagyon sokat fejlődött az elmúlt két évtizedben a szemcsés anyagok területén is. Fotoelasztikus anyagból készült részecskék használatával az erőláncok megjeleníthetők és bizonyos mértékű kvantitatív kiértékelésükre is van lehetőség. Történtek-e laboratóriumi mérések arra vonatkozóan, hogy az erőláncok statisztikájára, az erőláncok alapján definiált részecske klaszterek méreteloszlására vonatkozó elméleti jóslataikat kísérletileg is megerősítsék?
3. A statikus erőhálózat alapján definiált részecskeklaszterek skálázási exponensei a rendszer számos paraméterétől függetlennek bizonyultak. Mi történik akkor, ha a rendszer nem izotróp, például ha az erőláncok egy kétdimenziós homokdombban jönnek létre a gravitációs erő hatására, vagy egy kétdimenziós cellában, amit nyírásnak teszünk ki? Hogyan változnak a skálaexponensek?
4. Említi, hogy az erőhálózat skálaexponensei eltérnek a perkoláció esetén kapott értékektől, amelynek oka, hogy a kontaktus erők között hosszútávú korrelációk jönnek létre. Történtek-e próbálkozások arra, hogy ezeket a hosszútávú korrelációkat kvantitatív módon jellemezzék? Hogyan befolyásolja a rendezetlenség (polidiszperzitás) mértékének növelése ezeket a korrelációkat?
5. A szemcsés anyagokban az impulzusterjedésre vonatkozó munkái alapján lát-e lehetőséget arra, hogy egy impulzusra adott válasz akusztikus mérésével kvantitatív információt nyerjünk az erőhálózat struktúrájáról?
6. A dolgozatban bemutatott legújabb munkája a táguló térben lezajló növekedési folyamatokkal foglalkozik. Ha az ehhez kapcsolódó egyetlen publikációt nem tekintjük, kicsit talán meglepő, hogy a dolgozat alapjául szolgáló közlemények között a legfrissebb 2007-ben jelent meg. Milyen irányokban folytatta tovább a dolgozatban összefoglalt kutatásait?

Összefoglalva, a dolgozat egy magas színvonalú, gazdag kutatói munkásságot mutat be. A jelölt eredményei a nemegyensúlyi statisztikus fizika olyan területeihez kapcsolódnak, amelyek az elmúlt két évtizedben nagy érdeklődést váltottak ki. A vizsgált problémák ugyan szerteágazóak, de a közös módszertani háttér, a számítógépes modellezésre és szimulációra épülő megközelítések keretbe foglalják az eredményeket. Több publikációja a szakma vezető folyóirataiban jelent meg. A publikációk impakt faktora és idézettsége alapján az eredmények komoly nemzetközi visszhangot váltottak ki. A jelölt didaktikusan felépítve, világosan megmutatta, hogy milyen motivációkból kiindulva, milyen konkrét kísérleti, vagy elméleti problémák vizsgálata alapján érte el eredményeit. A tézispontok tömören fogalmazzák meg a szerző eredményeit, amelyet a dolgozat részletesebb kifejtése, valamint a megadott 13 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, 2015. október 21.

Dr. Kun Ferenc
egyetemi tanár