

Bírálat

Erdélyi Zoltán

„Diffúzió és szilárdtest-reakció nanoskálán”

című MTA doktori értekezéséről

A jelölt doktori értekezésében a nanoskálán lejátszódó diffúziós folyamatok elméleti és kísérleti vizsgálatában elért eredményeit foglalja össze. Az irodalomban használatos kontinuum modell nem adja meg a diffúzió pontos leírását a diszkrét rácsban, amikor erős összetétel változások vannak az atomi távolsággal összemérhető skálán. A korábban használt diszkrét modellek pedig nem voltak alkalmasak bizonyos hosszú hatótávolságú effektusok (pl. mechanikai feszültségek) figyelembe vételére. A kétfajta leírás közötti űrt tölti ki a jelölt munkássága. Erdélyi Zoltán kutatásainak egyik fontos eredménye a Martin-féle diszkrét diffúziós modell továbbfejlesztése. A jelölt a modell felhasználásával vizsgálta, hogy a diffúziós együttható koncentráció függése hogyan befolyásolja a koncentrácioprofil alakját. Ezen kívül tanulmányozta a rétegszerkezetekben lezajló anomális kinetikákat és a feszültségek hatását a nanoskálájú diffúzióra. Vizsgálatai korszerű nanoszerkezetű anyagokban (pl. multirétegekben) lezajló folyamatok megértéséhez járultak hozzá. Mindezeket figyelembe véve a disszertáció témaválasztása aktuális és az eredmények a gyakorlati felhasználás szempontjából is jelentősek.

A jelölt kutatómunkája során a diffúziós jelenségeket elméleti és kísérleti módszerekkel is tanulmányozta. Számításait a legkorszerűbb modellek felhasználásával illetve azok továbbfejlesztésével végezte el. Kiemelendő, hogy Erdélyi Zoltán kutatásai során az elméleti és kísérleti munka példaértékűen kapcsolódott egymáshoz: a kísérletek az elméleti eredmények alátámasztására, gondosan megtervezetten lettek kivitelezve, illetve a modellezések elsősorban az új kísérleti eredmények magyarázatára készültek. A kutatás során alkalmazott kísérleti módszerek korszerűek. Ilyen például a szinkrotron sugárzással végzett in-situ röntgendiffrakció és az atompróba tomográfia. A jelölt kutatómunkáját széles körű nemzetközi együttműködésben végezte. Partnerei elsősorban francia és német egyetemek voltak.

Az értekezés 127 oldal terjedelmű és hét fejezetből áll. Az öt oldalas Bevezetés utáni második fejezet 21 oldalon írja le a kutatás előzményeit az irodalom alapján. A maradék öt fejezet tézispontonként mutatja be az új tudományos eredményeket. A disszertációt egy 134 cikket felsoroló irodalomjegyzék és a köszönetnyilvánítás zárja. Ugyan minden saját kutatást bemutató fejezet végén található egy összefoglaló, amely hűen tükrözi az új tudományos eredményeket, mégis jó lett volna a disszertáció végén egyben olvasni a téziseket. Ezeket a téziszüzetben találjuk meg. Ugyancsak itt találkozunk először a tézisek alapjául szolgáló saját publikációk listájával. A disszertációban a saját cikkek az irodalomjegyzékben szétszórtan jelennek csak meg. Jó lett volna ezeket egyben látni egy külön listán a dolgozatban is.

A jelölt a háttéroidalmat gondosan kezelte és megmutatta hogy az hol kapcsolódik a saját eredményeihez. Az előzményeket taglaló 2. fejezetben elsősorban az irodalomban fellelhető kontinuum és atomisztikus modellek alapjait foglalta össze. Ez az áttekintés kiválóan megmutatja, hogy mik a korábbi elméletek azon hiányosságai, amiket a jelölt a kutatásai során pótolta. A témával kapcsolatos legfontosabb cikkek megjelennek az irodalomjegyzékben. A dolgozat nyelvezete magyaros, stílusa gördülékeny. Ugyanakkor meglepően sok (szám szerint 86) gépelési hibát vagy elírást találtam a szövegben. Csak két példa: a 14. oldalon a (2.32) képlet alatt a zárójelből hiányzik a hivatkozott egyenlet száma, vagy a 41. oldalon olvashatunk egy rosszul megfogalmazott félmondatot, nevezetesen: „a diffúzió során fellépő feszültséghatások figyelembevételére ezek a modellek nem képesek figyelembe venni”. Több helyen angol szavak maradtak a szövegben illetve az ábrákon.

A disszertációban ismertetett tudományos eredmények értékelése

Erdélyi Zoltán egyik legfontosabb eredménye, hogy a nanoskálájú diffúziós folyamatokkal kapcsolatos számításaiban figyelembe vette a diffúziós együttható erős koncentráció függését, ezzel pótolva a korábban használt elméleti modellek ezen hiányosságát. A jelölt az általa továbbfejlesztett kinetikus átlagtér modell segítségével sikeresen magyarázta a nanoskálájú anomális diffúziós kinetikákat. Megmutatta például, hogy a multirétegekben zajló diffúziós folyamatok elején az állandó koncentrációjú sík eltolódása az időnek nem négyzetgyökös függvénye, a klasszikus elméletek jóslatával ellentétben. Az új modell ezen kívül alkalmas a felületi szegregációs kinetika korábbiaknál pontosabb leírására. Elméleti számításait nívós kísérletekkel is kiegészítette. Ilyen például a Co/amorf-Si és Ni/amorf-Si rendszerekben a szilárdtest reakció nukleációs és stacionárius növekedési szakaszai között bekövetkező folyamatok szinkrotronos vizsgálata. Ezen kívül Mo/V és Ni/Cu multirétegekben kísérletileg is igazolta azon elméleti számításait, amelyek azt jósolták, hogy az egymást korlátlanul oldó kétfázisú rendszerek diffúziós határfelülete kiélesedhet a hőkezelés hatására, amennyiben a diffúziós együttható erősen függ a koncentrációtól. Megmutatta, hogy a határfelület szélességét a rétegpár diffúziós jellemzői (pl. diffúziós aszimmetria) határozzák meg a kiindulási határszélességtől függetlenül. Így nagyon keskeny határfelület esetén szélesedés következik be, míg nagyon széles határoknál keskenyedést tapasztalunk. Erdélyi Zoltán azt is megvizsgálta, hogy a mechanikai feszültségek milyen hatással vannak a diffúzió kinetikájára. Megmutatta, hogy az anomális diffúziós kinetikát nem az anyagban lévő feszültségek, hanem az atomi mozgékonyosság erős kémiai összetétel függősége okozza. Erdélyi Zoltán kísérletileg bizonyította, hogy a kristályos Cu és amorf-Si rétegekből álló hármas rétegszerkezetekben a rétegek sorrendje befolyásolja a határfelületek élességét, amely pedig meghatározza a termékfázis nukleációjának és növekedésének gyorsaságát. Munkájának további fontos eredménye a gömbi geometriájú mag-héj rétegszerkezetben lezajló reaktív diffúzió leírására alkalmas egyenletrendszer kidolgozása.

A dolgozattal kapcsolatban a következő észrevételeim és kérdéseim vannak, amelyekre kérem, hogy a védésen válaszoljon:

1. A 9. oldalon a (2.15) egyenletben a $(D_A - D_B)$ -t tartalmazó tagot nem kell megszorozni $\nabla \rho_A$ -val? Ugyancsak a (2.15) egyenlet felett szerepel, hogy $j'_A = j'_B$. Nem hiányzik itt egy mínusz előjel j'_B előtt?
2. Mekkora volt a szinkrotronos mérésekben használt röntgensugárzás hullámhossza? Milyen szempontok alapján választották ezt a hullámhosszat?
3. Multirétegek előállításakor gyakran előfordul, hogy a fázishatárokon miszfit diszlokáció hálózat alakul ki. Ráadásul a diszlokáció sűrűség a határokon tovább növekedhet a rétegek plasztikus deformációjakor (pl. hengerlés). A fázishatárokon megnövekedett diszlokáció sűrűség akár nagyságrendekkel is megváltoztathatja a diffúzió gyorsaságát, így a diffúziós együttható helyfüggését nemcsak a koncentráció változása, hanem a diszlokáció sűrűség inhomogén eloszlása is okozhatja. Kérem ismertesse röviden, hogy miként lehetne ezt a hatást beépíteni a modelljébe! A fázishatáron lévő magasabb diszlokáció sűrűség jelentős mértékben megváltoztatja-e a diffúzió kinetikáját és a koncentráció eloszlást multirétegekben?
4. A Ni/Cu határfelület élesedésével kapcsolatos szimulációkban kicserélődéses diffúziós mechanizmust tételeztek fel (40. oldal). Mennyire reális ez a feltételezés? Milyen mértékben befolyásolja a kapott eredményt, ha vakancia mechanizmust feltételezünk?

5. Az 5.3.1 fejezetében a Ge(111) hordozóra növesztett Si réteg amorf illetve kristályos állapota esetén jelentősen más hőmérsékleteket alkalmaztak a diffúziós mérésekben (amorf Si: 623 K, kristályos Si: 740-755 K). Mi volt ennek az oka?

Összefoglaló vélemény

Erdélyi Zoltán tudományos eredményeit 5 tézispontban foglalta össze, amelyek megfelelően tömörek, ugyanakkor hűen tükrözik a jelölt munkásságát. A tézisek állításait elfogadom új tudományos eredményeknek. A tézisek 19 saját cikkre épülnek, amelyekből tízben a jelölt az első szerző. Erdélyi Zoltán ezen publikációi a tématerület legrangosabb folyóirataiban jelentek meg, úgymint Science, Physical Review B, Physical Review Letters, Applied Physics Letters, Acta Materialia és Scripta Materialia. Az MTMT adatbázis alapján a tézisek alapjául szolgáló 19 cikkre eddig 162 független hivatkozás érkezett. Ez azt mutatja, hogy a jelölt eredményeinek megfelelő visszhangjuk van a téma irodalmában. A legtöbb hivatkozást a T2.3-as közlemény kapta, szám szerint 29-et. Ez a cikk a Science folyóiratban jelent meg 2004-ben, és ebben Erdélyi Zoltán az első szerző. Egyébként a jelölt által eddig írt 100 publikációjára 400 független hivatkozást kapott.

Összefoglalva megállapítom, hogy Erdélyi Zoltán MTA doktori disszertációja új és értékes tudományos eredményeket tartalmaz a nanoskálájú diffúzió és szilárdtest-reakciók elméleti és kísérleti vizsgálatában egyaránt. A tézisekben összefoglalt eredményeket alkalmasnak és elegendőnek tartom az MTA doktora cím megszerzésére, ezért támogatom az értekezés nyilvános vitára bocsátását. Sikeres védelem esetén javaslom az MTA doktora cím odaítélését.

Budapest, 2016. augusztus 31.

Gubicza Jenő
egyetemi tanár, az MTA doktora