

Bírálat Németh Péter Aszteroida-becsapódáshoz köthető összetett gyémántszerkezetek című MTA doktori értekezéséről

Szerző egy világviszonylatban igen kurrens téma feldolgozását tűzte ki célul. Ahogy a dolgozatban írja: a vizsgálatokkal célom volt megismerni a Canyon Diablo meteoritból származó – az 1960-as években lonsdaleitként leírt – típusanyag, valamint a Gujba, Orgueil, Murchison és a Popigai meteoritminták összetett szerkezetét, illetve közelebb kerülni az összetett szerkezeteket létrehozó folyamatok megértéséhez, tulajdonságainak és anyagtudományi alkalmazhatósági lehetőségeinek megismeréséhez. A jól körvonalazott cél elérését szerző a legkorszerűbb műszeres módszerek bevonásával igyekezett megvalósítani. Amint vizsgálataiból látszik, ez alapvető fontosságú a nanogyémántok szerkezetének megértéhez. Ennek hiánya téves információkat eredményezhet.

A dolgozat szövege jó fogalmazású, helyesírás szempontjából kifogástalan. A rövid terjedelmű dolgozat terjedelme az irodalomjegyzékkel együtt 40 oldal. Az ábrák kitűnően szerkesztettek, nagyszerűen tanulmányozhatók és jelentősen segítik a szöveg megértését. A szöveg és az illusztrációk technikai szerkesztése az ajánlásoknak megfelelő. A szöveg közötti hivatkozások egyeznek az irodalomjegyzékben lévőkkel. Az irodalomjegyzék mutatja a téma nemzetközi jelentőségét.

A bevezetésben szerző először összegzi a lonsdaleit (hexagonális gyémánt) kutatástörténetét. Utána ismerteti a saját kutatómunkájának lényegét, ami a meteoritokban lévő nanogyémántok kristályszerkezetével kapcsolatos. A Minták és analitikai módszerek c. fejezetben részletesen bemutatja azokat a mintákat, melyeket kutatása során felhasznált, illetve megismertet a speciális mintaelőkészítési technikákkal. Végül kitér azokra a műszeres vizsgáló módszerekre, melyekkel a gyémántszerkezeteket tanulmányozta, különös tekintettel az XRD és TEM technikákra. Tekintettel arra, hogy a becsapódásos eredetű gyémántok nanoméretű szerkezeti részleteinek tanulmányozásához, - amint a dolgozatban írja - 0,13 nm-nél kisebb atomi távolságok feloldása szükséges, egy külön kis fejezetben foglalkozik a cél elérésére szükséges ultranagy-felbontású TEM-technikával. Éppen ez a módszer tette lehetővé a szerző számára, hogy ebben a nagy nemzetközi érdeklődéssel kísért témában jelentős, új tudományos megállapításokhoz, többek között egy új anyagcsalád azonosításához eljusson. A konvencionális TEM és az ultranagy-felbontású TEM közötti felbontásbeli különbségeket több látványos ábrával is szemléletessé teszi az olvasó számára.

A negyedik fejezetben, - melynek címe Összetett gyémántszerkezetek - összegzi az új megállapításait. Ennek első alfejezetében részletesen ismerteti a gyémánt, grafén és a kettő közötti határterület egységeiből álló ún. diafit nanokompozitokat. Ultranagy-felbontású TEM-vizsgálattal felfedte ezeknek a finom szerkezeti jellegzetességeit. Munkájában megkülönböztet diafit 1 és diafit 2 nanokompozitokat. Részleteiben tanulmányozza a két szerkezeti típus összenövéseit. A második alfejezetben arra a tényre (valójában hibára) hívja fel a figyelmet, hogy a HRTEM-felvételekből számított FFT-k diffrakciós mintázataival azonosítottak hexagonális gyémántot. De amint megjegyzi, ez a mintázat mérési hibahatáron belül megkülönböztethetetlen a köbös gyémánt, a rendezetlen c/h rétegeket tartalmazó gyémánt, a grafít és a diafit kompozitok elektrondiffrakciójától. Közvetlen megfigyeléseit alapul véve részleteiben kitér arra is, hogy milyen technikai és számolási paraméterek tennék lehetővé a hexagonális gyémánt jelenlétének korrekt igazolását. Minthogy ilyen, a hexagonális gyémántot valóban igazoló mérési adatokkal még nem találkozott az irodalomban, megkérdőjelezi a lonsdaleit

meglétét. A harmadik alfejezetben diafitszerkezetű nanogyémántokat tanulmányozott az Orgueil és Murchison (CI kondrit) meteoritokból. Ezekben korábban szintén azonosítottak lonsdaleiteket. Saját tapasztalataiból felhívja a figyelmet arra a tényre, hogy nemcsak a TEM felbontása, de a megfelelő mintavastagság is nélkülözhetetlen a nanogyémánt-szerkezetek pontos megfigyeléséhez. A Murchison és Orgueil mintákban számos nanogyémánt-szemcse jelenít meg hatszöges szimmetriát, azonban a nagyfelbontású STEM képek elemzése arra utal, hogy a hatszöges szimmetriát az $\{10\cdot10\}$ grafénsíkoknak az $\{113\}$ gyémántsíkokkal való komplex összenövése, vagyis a diafit 2 típusú szerkezet okozza. Egyes nanogyémánt-szemcsékben tizenkettes forgási szimmetriát mutató elrendezéseket is megfigyelt, melyet a diafit 2 szerkezetben lévő grafén-egység 30 fokos elfordulásával és az egységnek a köbös gyémánthoz való kötődésével magyaráz. A negyedik alfejezet a nanogyémántoknak az EELS és Raman spektroszkópos jellegzetességeivel foglalkozik, és a szerző azokat az egyedi eltéréseket, melyek a köbös gyémánttól különböznek, éppen a diafit-szerkezetek jelenlétére vezeti vissza. Az ötödik alfejezetben rendezetlen c/h rétegeket tartalmazó gyémánt, grafit és diafit roppant változatos összenövéseit mutatja be a Canyon Diablo meteoritból szeparált nagykeménységű szénszemcsékből. Megállapítja, hogy a szénszemcsék nanoszerkezeti komplexitásának megértéséhez elengedhetetlen az ultranagy-felbontású TEM, mely nagyszámú (111) rétegződési hiba és (111) iker, vagyis rendezetlen c/h rétegeket tartalmazó gyémánt domének jelenlétére utal. A szerkezet megfeleltethető rendezetlen c/h rétegeket tartalmazó gyémántnak, amely csóvás, elnyújtott reflexiókat eredményez a diffrakciós felvételeken és megmagyarázza a korábban a hexagonális gyémánthoz társított d-értékeket. A köbös és rendezetlen c/h rétegeket tartalmazó gyémántban feltűnő diafit 1 és 2 nanokompozitok kivételesen összetett szerkezetet eredményeznek. Megállapításait, mint máshol is, TEM-fotókkal illusztrálja. A 6. alfejezetben a HRTEM képek hexagonális mintázatának és a diffrakciós felvételek hexagonális elrendezésű reflexióinak magyarázatáról értekezik. A korábbi kutatók a hexagonális szimmetriájú mintázatokat a hexagonális gyémántnak tulajdonították. Szerző viszont a jelenséget másképpen magyarázza: a diafit 2 típusú szerkezetet szintén a 0,21 nm d-értékű hexagonális elrendezésű reflexióik megjelenése jellemzi, ugyanez jellemző a $\langle 0001 \rangle$ rendezetlen c/h rétegeket tartalmazó gyémántra is. Sőt, megállapítása szerint a diafit 1 szerkezet egymáson lévő köbös gyémánt és grafén egységei szintén hasonló geometriájú diffrakciós felvételt eredményeznek. A 7. alfejezetben a rendezetlen c/h rétegeket tartalmazó gyémánt XRD-felvételeinek jellegzetességeit mutatja be és megjegyzi: helytelen a szemcsék röntgendiffrakciós felvételeinek értékelése pusztán nanoméretű hexagonális és köbös gyémántok fizikai keverékeként. Ráadásul egy ilyen leegyszerűsített modell nem ragadja meg a TEM-képek által feltárt szerkezeti komplexitást, ideértve a diafit nanokompozitok jelenlétét. Az alfejezet további részében kitér az XRD-felvételek finom részleteire, és konklúzióként megállapítja, hogy a tiszta köbös és tiszta hexagonális gyémánt fizikai keveréke nem reprodukálja megfelelően a kísérleti diffrakciós adatokat. Végül a 8. alfejezetben a diafit-szerkezetek XRD jellegzetességeit mutatja be. A feladat nehézségére jellemző, hogy az XRD adatok teljes magyarázatához egyidejűleg kell figyelembe venni a rendezetlen c/h rétegzett gyémánt diafit 1 és diafit 2 szerkezetekkel való kombinációját és a feltehetőleg szintén rendezetlen hexagonális/romboéderes rétegződés megjelenését a diafit 1 grafén egységeiben.

Az 5. fejezet első alfejezetében a lonsdaleit-kérdéssel foglalkozik. Mivel éppen szerző bizonyította, hogy eddig minden lonsdaleitnek tartott „fázis” nem feleltethető meg az eredeti definíció szerinti hexagonális gyémántnak, úgy gondolom kézenfekvő, hogy ennek alapján a lonsdaleit diszkreditálható. Ugyan a név megtartható ennek a speciális anyagtípusnak jellemzésére, de nem felel meg az ásvány definíciónak. A 2. alfejezetben az összetett gyémántszerkezetek lehetséges képződési lehetőségeit tárgyalja. Megállapítása szerint: a grafit-gyémánt fázisátalakulás energetikai viszonyainak számolásához fontos lenne a diafit-szerkezetek bevonása. Azonban azt is megjegyzi, hogy az eddigi adatok szerint a becsapódásos gyémántokat

inkább a rendezetlen c/h rétegződésű gyémánt és diafit szerkezetek változatos – semmint egy adott – szerkezettypusainak megjelenése jellemzi, amely komoly kihívást jelent a sokkmeta-morfózis P-T viszonyainak megértésében. Végül a 3. alfejezetben az összetett gyémántszerkezetekben rejlő anyagtudományi lehetőségekről esik szó. A diafit nanoszerkezetek kivételes mechanikai tulajdonságokat eredményeznek, köszönhetően annak, hogy a gyémánt extrém keménysége ötvöződik a grafén kiváló flexibilitásával és törési szívósságával. A diafit nanokompozitok tudatos beépítésével megvalósítható, hogy a nagykeménységű gyémánt húzófeszültség hatására például képlékenyen viselkedjen. A téma másik fontos alkalmazási lehetősége, hogy a diafit nanokompozitok kivételes elektromos tulajdonságokkal rendelkezhetnek. A diafitok szabályozott előállításával nemcsak ultrakemény, hanem képlékeny, valamint a vezetőtől a szigetelőig hangolható elektromos tulajdonságokkal rendelkező anyagokat is tervezhetünk. Ennek eredményeként új alkalmazások jöhetnek létre a csiszolóanyagoktól az elektronikán át a nanomedicináig vagy a lézertechnológiáig. Éppen a fentiek miatt világviszonylatban is roppant nagy jelentőségű a nanogyémántok szerkezetének kutatása.

A tézisekről: szerző kilenc tézist fogalmazott meg. Minthogy mindegyik tartalmaz új, eddig ismeretlen kutatási eredményeket, még ha különböző mértékben is, ezeket kivétel nélkül elfogadom. Számos közülük további, jelentős érdeklődést kiváltó kutatásokra inspirálhatja a kutatókat.

Összességében megállapítható, hogy egy tapasztalt kutató sok új tudományos eredményt tartalmazó, világviszonylatban is kiemelkedően kurrens témát bemutató értekezése született meg. Szerző munkájának értékét, jelentőségét jelzik az utóbbi évtizedben sok kiemelkedő lapban megjelent publikációi. Munkája során bizonyította az összetett gyémántszerkezetek és a dominánsan alkalmazott TEM- és XRD-technikákkal, illetve a hozzájuk kapcsolódó számítási módszerek magas szintű hozzáértését.

Fentieket figyelembe véve melegen támogatom az értekezés nyilvános vitára bocsátását.

Miskolc, 2024. március 20.



Szakáll Sándor

MTA doktora, professzor emeritus