

Bíráói vélemény

Imre Attila

“Stabilitás és fázisátmenetek kondenzált anyagokban” című

MTA doktori értekezéséről

A disszertációban a jelölt az elmúlt kb. 18 év alatt végzett kutatómunkájának eredményeit foglalja össze. Ez idő alatt természetszerűleg több irányba és területre kiterjedő, szerteágazó kérdésekkel is foglalkozott. Az ezeket összekötő kapocs és vezérvonal a legkülönbözőbb rendszerekben is vizsgálható halmazállapotok (fázisok) közötti stabilitási határok tanulmányozása, beleértve extrém körülményeket, pl. nyomás, hőmérséklet, stb. szélsőséges értékeit, amelyek némely kombinációja kísérletileg nehezen, vagy egyáltalán nem elérhetőek, illetve az egzotikusan hangzó negatív nyomástartományokat is. A téma tehát érdekes és nemzetközi beágyazottsága is figyelemre méltó.

A dolgozat egy rövid, de élvezetesen és szemléletesen megfogalmazott bevezetőben ismerteti a fizikában nem túl gyakran (csak kondenzált fázisokban) definiálható negatív nyomású állapotokat. Mivel a téma szűkölködik irodalmi leírásokban, ezért a dolgozat hiánypótlónak tekinthető, a magyar nyelvű irodalmat illetve mindenképpen. Ezt követi négy kiterjedt fejezet, amelyekben a saját eredményeket tárgyalja a szerző. Ezek témái rendre: *“Folyadék-gőz és gőz-folyadék stabilitási határok egykomponensű folyadékoknál”*, *“A negatív nyomás szerepe rendezettebb anyagokban”*, *“Folyadék-folyadék fázisátmenet két- és többkomponensű rendszerekben”* és *“Szuperkritikus víz, mint potenciális munkaközeg IV. generációs atomreaktorokban”*. Az Összefoglalásban a tézispontok felsorolása, illetve az eredmények alkalmazása és hasznosítása kerül kifejtésre. Ezt követi az irodalomjegyzék, amelyben elkülönítve találjuk a tézisek alapjait képező saját publikációkat, a tézisek alapjait képező egyéb saját eredményeket, a témához kötődő, tézispontokban nem szereplő egyéb saját publikációkat illetve további irodalmi hivatkozásokat. A dolgozatot még két *függelék* egészíti ki, az első a negatív nyomású állapotok kísérleti előállítását és mérését írja le, a második pedig megadja a felhasznált állapotegyenleteket és a gyakran használt rövidítések listáját. Mindkét függelék roppant lényeges segítséget jelent a dolgozat megértéséhez.

A disszertáció így összesen közel 150 oldalt tesz ki, ami kétségtelenül próbára tette a bíráló kitartását és türelmét. Itt jegyzem meg, hogy az ábrák méretét túl kicsinek találtam, különösen a feliratok és a fizikai mennyiségek jelei aprók. Ha valahol még egy alsó vagy felső index is található, az már valóban alig kivehető az ábrákon.

A disszertációban bemutatott kutatás nagyrészt csapatmunkában zajlott, a résztvevők szerepét a szerző korrekt módon ismerteti. A saját, egyéni hozzájárulását végül 16 tézispontban összegzi. Ezek mögé 31, a terület vezető, nemzetközi folyóirataiban megjelent publikációt sorol, amelyekhez további, kb. 40 cikk is csatlakozik. Utóbbiak nem képezik a tézispontok alapját.

Szeretném kiemelni a munka azon értékét, hogy egyrészt, a legkülönfélébb rendszerek állapotainak stabilitását (szilárd-folyadék-kristály-folyadék-gőz) vizsgálta a szerző eredményesen szélsőséges kontroll paraméter tartományokban, igényes elméleti számításokkal, megkeresve a legalkalmasabbnak tűnő állapotegyenleteket és számítási algoritmusokat. Az elméleti kutatásokban a jelölt alkalmazza mind a klasszikus (pl. van der Waals) leírásokat, mind a legmodernebb elméleteket és numerikus technikákat, pl. a Lattice Boltzmann módszert. Másrészt keresi a kísérleti megvalósítás lehetőségeit és tevékenyen részt vesz a mérésekben. Mindezeket túl, igazi ipari hasznosítási lehetőséget is talál a mégoly elvontnak tűnő eredmények alkalmazására nyomott vizes illetve szuperkritikus vízzel hűtött atomreaktorokban, lásd az 5. fejezetet.

Kérdéseim és kritikai megjegyzéseim:

1.

- A 23-24. oldalon a Shan-Chen rendszer vizsgálata kapcsán a szerző megjegyzi, hogy a módszertől nem várható el pontos leírás, ugyanakkor 2 és 3 dimenzióban jól működik. Akkor mi a probléma?

- A szimulációkban egy folyadékfilmet - ami ugye 2 dimenziós - szimulálnak egy $512 \times 2 \times 2$ -es rácson, ami viszont 1d. Hogyan kell ezt érteni?

2. A 30-31. oldalon a széndioxid folyadék-gőz határfelületének paramétereit számolták kétféle illesztési módszerrel. Az ábrák alapján nem meggyőző az az állítás, hogy a folyadék oldalon a tanh, míg a gőz oldalon a hibafüggvény alapú leírás lenne pontosabb.

3. Milyen szemléletes magyarázat adható a vizsgált polimerek, folyadékkristályok és különböző szervesetlen anyagok üvegesedési hőmérsékletének nem monoton nyomásfüggésére? Milyen változás történhet a rendszerben a görbe extrémuma (maximuma) körül? (57-59. oldal)

4. Milyen mennyiséget mérnek és hogyan ami az üres köröket adja a 3.12 ábrán, hiszen két folyadék fázis határáról, olvadáspontról van szó?

5. A 76. oldal közepén a 4.4b ábrára történik hivatkozás, ami valószínűleg 4.8b kellene legyen.

6. A 4.10 ábrán szemléltetett kísérleti nyomás-hőmérséklet adatok ugyan így is meggyőzően mutatják, hogy a felső (UCST) illetve alsó (LCST) kritikus pontok egy folytonos görbére helyezhetők. Mégis felmerül a kérdés, nem lehetne-e a két kísérleti módszert (optikai illetve vezetőképesség mérés) úgy alkalmazni, hogy legyen olyan nyomás-hőmérséklet tartomány, ahol átfedés van?

7. A vezetőképesség és a dielektromos permittivitás általában egyidejűleg mérhető és a két adatsor bizonyos szempontból összefügg. Vitatkozom a 80. oldal első mondatával, amely szerint a permittivitás érzékenyebb lenne a szennyeződésekre,

mint a vezetőképesség.

8. A 90. oldal alján definiál a szerző egy "oldószerminőségi integrált", ami a 4.18c ábra görbéi által bezárt területtel lenne egyenlő. Nem világos, hogyan kell ezt érteni.

9. Az 5.9 és 5.10 ábrák görbesorai nem megkülönböztethetőek, talán színesben nyomtatva jobban kivehető lenne az üzenet.

Összefoglalva, a dolgozat egy igényes, szisztematikus elméleti munkát ötvöz körültekintően kivitelezett kísérleti eredményekkel. A szerző korrekt módon és helyenként kritikusan prezentálja a saját eredményeket, elemezve az esetleges hiányosságokat vagy kudarcokat. Összeveti a saját eredményeket másokéval, mindig világos határt vonva a kettő közé. A tézispontokat önálló tudományos teljesítményként értékelem. A dolgozat gondosan összeállított és logikusan felépített munka, sajtóhiba vagy elírás szinte nem akad benne.

Meggyőződésem, hogy a jelölt kutatómunkája és eredményei meghaladják az MTA tudományok doktora fokozat eléréséhez szükséges szintet. Javaslom a disszertáció nyilvános vitára való bocsájtását és sikeres védelem esetén a cím odaítélését.



Búka Ágnes

Budapest, 2015. február 17.