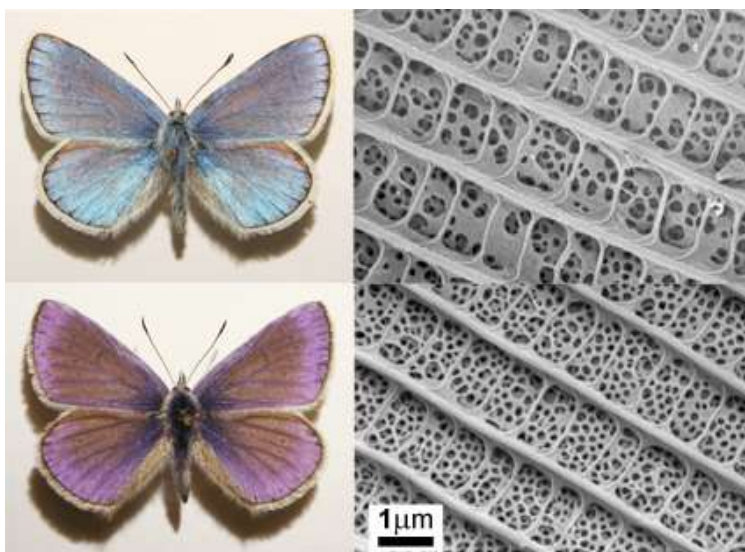


III. Makroszkopikus fizika

A makroszkopikus testek nagyszámú mikroszkopikus összetevőből állnak. A kutatások során világossá vált, hogy a közvetlenül megfigyelhető makrovilág tulajdonságainak mikroszkopikus eredete van. Ennek a kapcsolatnak feltárását elméleti síkon a statisztikus fizika módszereivel lehet elvégezni. Ezen vizsgálat első lépéseként egy, a probléma lényeges elemeit megragadó modellt vezetünk be, melynek tanulmányozása történhet analitikus módszerekkel (átlagtérmódszer, térelméleti megközelítés, perturbációs közelítés), de igen gyakran számítógépes szimulációkat is lehet végezni. A számítógépes megközelítés a vizsgálatoknál az utóbbi időben egyre nagyobb szerepet játszik, ami a nagyobb teljesítményű számítógépekre és a hatékonyabb algoritmusok alkalmazására vezethető vissza. A kapott elméleti eredmények érvényességét ezek után a kísérletekkel történő összevetéssel ellenőrizzük. A hazai kutatások a makroszkopikus rendszerek területén igen széleskörűek. Kiterjednek biológiai eredetű rendszerekre, diffúziós folyamatok vizsgálatára és szilárd testekben megjelenő diszlokációk tanulmányozására. Egyensúlytól távoli folyamatok zajlanak le szilárd testek megszilárdulásánál, folyadékelegyek mintázatképződésénél és kvantumozott rendszerek stacionárius állapotainál is. További kiemelt fontosságú témakör a nemlineáris dinamika és a kaotikus jelenségek, a spinűvegek és rendezetlen rendszerek, valamint az elektromos gázkiszárlások vizsgálata. A következőkben a fent említett jelenségekre mutatunk néhány példát.

III.1. Biológiai eredetű fotonikus nanoarchitektúrák

Az élővilág egyik szemet gyönyörködtető alkotása a lepkék szárnyain megjelenő élénk színű mintázat. Mint a biológiai kutatások megmutatták, a lepkék már 50 millió éve használják az élénk színeket, elsősorban a kék színt, szexuális kommunikációra. A kutatások során kiderült, hogy e színeket nem festékanyagok hozzák létre, hanem olyan nanoarchitektúrák, amelyek anyaguknál és szerkezetükénél fogva képesek befolyásolni a fény terjedését. Ezeknek a fotonikus nanoarchitektúráknak [M1] a kutatásába kapcsolódtak be az MTA MFA kutatói, és biológusokkal karöltve a lepkék életmódjával kapcsolatos számos tényre derítették fényt [M2].



9. kép

*Boglárkalepke hímek fajra jellemző, szerkezeti eredetű kékje és a szárnyfelszín pikkelyeiben a színt létrehozó fotonikus nano-architektúra pásztázó elektron-mikroszkópos képe. (Fent: mezei boglárka (*Polyommatus dorylas*), lent közönséges boglárka (*Polyommatus icarus*)) [M1,M2].*

III.2. Diffúziós folyamatok leírása

A gyakorlatban használt legtöbb anyag nemcsak egy adott atomfajtából áll, hanem több komponenst tartalmaz. Ilyen anyagok esetén gyakran előfordul, hogy a megcélzott összetételt úgy állítjuk elő, hogy az egyes alkotóelemeket atomi szinten összekeverjük. Ennek egyik módja, hogy a két vagy több alkotóelemet egy közös térfogatba tesszük, és hagyjuk keveredni. A keveredést a diffúzió írja le. A Debreceni Egyetem Szilárdtest Fizikai Tanszékén nemzetközileg elismert eredmények születtek a nanoszerkezetekben zajló diffúziós folyamatok alapkérdéseiről. Az elméleti/szimulációs eredményeket kísérletekkel is igazolták. Egyik legjelentősebb eredményük, hogy nanoskálán a térfogati diffúziós jelenségek eltérnek a hagyományostól, ha a diffúziós együttható erősen függ a koncentrációtól. Például, elméleti és számítógépes modellszámolásokkal elsőként jósolták meg, hogy kölcsönösen korlátlanul oldódó kétalkotós ötvözetekben az elmosódott határfelület kiélesedhet [M3]. Ezeket az eredményeket később kísérletileg is bizonyították [M4]. Szintén elméleti és kísérleti munkából született kiemelkedő eredmény, hogy megadták a nanoszerkezetekben -a diffúziós feszültségek által indukált szemcsehatármozgás következtében lejátszódó- ún. „hideg homogenizáció” jelenségének általános makroszkopikus tárgyalását, és számos kísérletben megvalósították ezt a nanotechnológiában fontos jelenséget [M5].

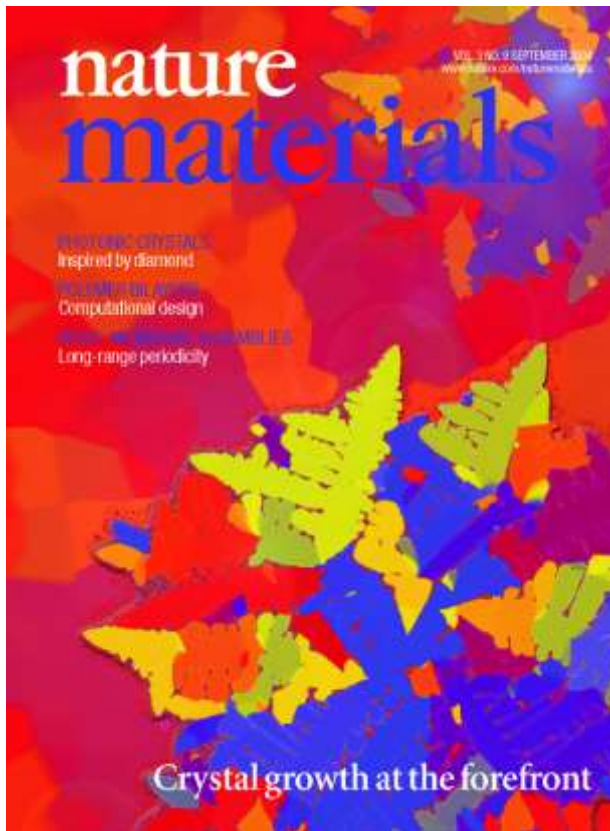
III.3. Diszlokációk statisztikus térelmélete

A kristályos anyagokban az egyik leggyakoribb hiba az ún. diszlokáció, amely az anyagban egy vonal mentén jelenik meg. A diszlokációk mennyisége és eloszlása alapvetően módosítja az anyagok mechanikai tulajdonságait. Ezért ezek kutatása ma is aktuális. Az ELTE Anyagfizikai Tanszékén a 90-es évek elején egy a korábbiakhoz képest teljesen új statisztikus fizikai megközelítéssel kidolgozták a diszlokációk kollektív mozgását leíró térelméletet, amely szigorú matematikai módszerekkel teremt meg a kapcsolatot az egyedi diszlokációk mozgása és a folytonos sűrűségfüggvényekkel operáló mezoszkopikus megközelítés között [M6,M7]. Az elmélet továbbfejlesztésével az ELTE kutatói ma képesek modellezni a diszlokációmintázatok kialakulását, diszlokációlavinák keletkezését, méreteffektusokat stb [M8,M9].

III.4. Komplex megszilárdulási alakzatok

Az olvadáspontjuk alá hűtött folyadékok megszilárdulásával létrejövő, nagyszámú kristályszemcséből álló, ún. polikristályos anyagok fontos résztvevői mindennapi életünknek. Közéjük tartoznak a technikai ötvözetek, kerámiák, ásványok, gyógyszerek, egyes élelmiszerek, a fogak, csontok, vesekövek és az érfalon kialakuló koleszterinlerakódások stb. Az MTA SZFKI kutatói kifejlesztettek egy matematikai modellt (orientációs mezőn alapuló fázismező-elméletet) és annak számítógépes implementációját, amely lehetővé teszi olyan összetett polikristályos alakzatok kialakulásának valóság-hű leírását [M10, M11], mint a rendezetlen dendritek, kristálykévék, szferolitok, ill. fraktálszerű polikristályos aggregátumok, melyek más módszerekkel kezelhetetlennek bizonyultak. Ezt az eredményt a Science News (USA) folyóirat szerkesztősége a fizika minden ágát tekintve a 2004. év 15 legfontosabb eredménye közé sorolta. A modell lényegesen hozzájárult a megszilárdulás során kialakuló kristályos mikroszerkezetek megértéséhez, és olyan anyagfejlesztésre irányuló nemzetközi projektek számítógépes anyagtudományi támogatását biztosította, mint pl. magasabb hőmérsékleten működő gázturbinalapát-anyagok, ólommentes önkenő csapágyanyagok, *in situ* kompozitok fejlesztése, vagy speciális optikai tulajdonságot mutató, ún. metaanyagok létrehozása. Újabban a modellt biológiai kristályosodási folyamatok (biomineralizáció)

leírására alkalmazzák, ahol biztató eredmények születtek [M12]. Az elért eredmények jelentőségét mutatja, hogy 9 alkalommal kerültek tudományos kiadvány címlapjára, köztük a Nature Materials folyóiratéra.



10. kép

Polkristályos növekedés polimer rétegekben a fázismező elmélet alapján [M11].

III.5. Mintázatképződés az egyensúlytól távoli struktúrákban

Az egyensúlytól távoli struktúrák létrejöttében jelentős szerepet játszik a fázishatárok dinamikája. Így a reakció-diffúziós frontok is meghatározók a technológiai szempontból fontos csapadékmintázatok kialakulásában. E frontok tulajdonságait felhasználva az ELTE és a BME kutatói nemzetközi együttműködésben lényeges előrehaladást értek el a csapadékmintázatok várható tulajdonságainak leírásában és a jellemzők kontrolljában [M13,M14]. Megalkották a több mint száz éve kutatott Liesegang-jelenség „fáziszeperáció a mozgó front mögött” modelljét, amely magyarázza a normál Liesegang-mintázatok összes tulajdonságát, s a modellből következő makroszkopikus és mikroszkopikus szintű kontroll a kísérletekben demonstrálható [M15]. Továbbá a nemegyensúlyi zaj szerepét is tárgyalhatóvá tették egzotikusabb mintázatok (pl. helikális struktúrák) megjelenési valószínűségének számolásával, majd kísérleti mérésével.

III.6. Nemegyensúlyi kvantumoz rendszerek

A nemegyensúlyi rendszerek elméletének alapproblémája, hogy a dinamika lényeges a stacionárius állapotokban is. Jelentős előrelépés az utóbbi évtizedekben a legegyszerűbb, egy-dimenziós, áramot vivő, kvantumállapotok megkonstruálásában történt. Az ELTE kutatói meghatározták a homogén, energia- és mágnesezettségáramot vivő spinláncok (transzverz Ising-modell, XY láncok) stacionárius állapotaiban a hosszú távú, az egyensúlytól távoli állapotokkal társuló korrelációkat [M16]. Ezen túl, a szabadfermion-leképezést megengedő

rendszerekben megmutatták, hogy az inhomogén (lépcsőszerű) kezdeti állapotokból megjelenő frontok tulajdonságai univerzálisak, s leírhatók a véletlen mátrixok elméletével [M17]. Az MTA SZFKI és a BME kutatói a kvantumozott rendszerek paramétereinek hirtelen megváltoztatásával járó, ún. kvencs-folyamatokat is tanulmányozták. Elsők között vizsgálták a stacionárius állapot tulajdonságait mind szabad fermionrendszerekben [M18], mind Bethe–Ansatz-módszerrel megoldható modellekben [M19].

III.7. Spinüvegek és rendezetlen rendszerek

A rendezetlenség jelenléte minden valós anyag elkerülhetetlen velejárója. Míg számos esetben a rendezetlenség jelentéktelen hatású, addig vannak olyan fizikai problémák, melyeknél a rendezetlenség szerepe döntő, sőt meghatározó. A klasszikus spinüvegek elméleti leírása több mint félévszázados múltra vezethető vissza. Ezen témakörben az ELTE kutatói az átlagtér megoldást meghaladó térelméleti vizsgálatokban játszottak kiemelkedő szerepet [M20]. Kvantumos spinüvegek és más végtelenül rendezetlen rendszerek vizsgálatánál az MTA SZFKI kutatói egy új típusú renormálási eljárás kifejlesztésében vettek részt [M21]. A hálózati modellek topológikus heterogenitásainak hatásainak feltárásában úttörő szerepet játszottak az MTA SZFKI és MFA kutatói [M22]. A spinüvegeknél kifejlesztett eljárásoknak az ideghálózatok modellezésében történő alkalmazásainál az ELTE kutatói játszottak fontos szerepet [M23].

III.8. Nemlineáris dinamika és kaotikus jelenségek

A 90-es évekre a nemlineáris dinamika és kaotikus jelenségek vizsgálata önálló hazai kutatási irányra fejlődött. Az ELTE és az MTA SZFKI kutatói számos probléma vizsgálatánál kiemelkedő eredményeket értek el (nemintegrálható hamiltoni rendszerekben az invariáns tórusok felbomlása, sodródások terjedése, tranzienst káosz, turbulencia, kvantumkáosz) [M24]. Ezen vizsgálatokból nőtt ki az ELTE-n a környezeti problémák vizsgálata, a klímakutatás és a trenddel rendelkező rendszerek vizsgálata. A magyar kutatók számos a témakört tárgyaló szakkönyv szerzői angol és magyar nyelven is [M25, M26].

III.9. Elektromos gázkisülések vizsgálata

Az MTA SZFKI kutatói az elektromosan töltött részecskék transzportjának tanulmányozására és alacsony hőmérsékletű plazmák vizsgálatára több unikális kísérleti berendezést építettek, és a jelenségek önkonzisztens leírására részecskealapú szimulációs programok egész családját fejlesztették ki. A rádiófrekvenciás gázkisülések fizikájában, a kisülések működése és az azokban lejátszódó elemi folyamatok összetett kölcsönhatásainak feltárása során elért eredmények hozzájárultak felületmódosítási eljárások továbbfejlesztéséhez olyan high-tech alkalmazásokban, mint a mikroelektronika és napelemgyártás [M27]. A sokrészecskefizika területén, -elektromos gázkisülésekben lebegtetett töltött, mikrométeres porszemcsékkel létrehozott laboratóriumi komplex plazmákkal- folyadék és szilárd fázisú anyagok hullámdiszperziós, transzport (diffúzió, viszkozitás) és szerkezeti tulajdonságainak mikroszkopikus részleteit tárták fel, egyensúlyban és külső erők hatására [M28]. A magyar kutatók hozzájárultak a plazmafizika két legújabb területének: a plazmagyógyászat és a plazma-mezőgazdaság fejlődéséhez, az itt alkalmazható gázkisülési rendszerek optimalizálásához, illetve a hideg plazmák biológiai rendszerekkel és folyadékkal való kölcsönhatásának megértéséhez [M29]. A hidegplazmák mellett fontos a világűrbeli, légköri és technológiai plazmákban zajló folyamatok megismerése is. Ezekben az esetekben a

nagyenergiájú töltött részecskék szabad atomokkal és molekulákkal való ütközéseit kell megértenünk. Hasonló folyamatok lépnek fel a részecske-besugárzáson alapuló terápiás módszerek tervezésénél, és számos iontechnológiai alkalmazásban is. Az elmúlt 30 évben a debreceni Atommagkutató Intézet munkatársai ionok és pozitronok atomokkal és molekulákkal történő ütközésiben többszörösen differenciális mérésekkel térképezték fel az ionizációs folyamatot [M30]. Értelmezték a lövedék-ion és az ionizált céltárgy atom vagy molekula együttes terében kialakuló elektron-emisszió számos, kísérletben megfigyelt tulajdonságát.

A III. fejezet hivatkozásai*

III.1 fejezet

[M1] **L.P. Biró, Z. Bálint, K. Kertész, Z. Vértesy, G.I. Márk, Z.E. Horváth, J. Balázs, D. Méhn, I. Kiricsi, V. Lousse, J.P. Vigneron**
Role of photonic-crystal-type structures in the thermal regulation of a Lycaenid butterfly sister species pair.
Phys. Rev. E **67**, 021907 (2003).

[M2] **K. Kertész, G. Piszter, Z. Bálint, L.P. Biró**
*Biogeographical patterns in the structural blue of male *Polyommatus icarus* butterflies.*
Sci. Rep. **9**, 2338 (2019).

III.2 fejezet

[M3] **Z. Erdélyi, I. A. Szabó, D. L. Beke**
Interface sharpening instead of broadening by diffusion in ideal binary alloys,
Phys. Rev. Lett. **89**, 165901 (2002)

[M4] **Z. Erdélyi, M. Sladeczek, L-M, Stadler, I. Zizak, G.A. Langer, M. Kis-Varga, D.L. Beke, B. Sepiol,**
Transient Interface Sharpening in Miscible Alloys,
Science **306**, 1913 (2004)

[M5] **D.L. Beke, Yu. Kaganovskii, G.L. Katona,**
Interdiffusion along grain boundaries-diffusion induced grain boundary migration, low temperature homogenization and reactions in nanostructured films,
Prog. in Mat. Sci. **98**, 625 (2018)

III.3 fejezet

[M6] **I. Groma,**
Link between the microscopic and mesoscopic length-scale description of the collective behavior of dislocations,
Physical Review B **56**, 5807 (1997)

[M7] **I. Groma, F.F. Csikor, M. Zaiser,**
Spatial correlations and higher-order gradient terms in a continuum description of dislocation dynamics,
Acta Materialia **51**, 1271 (2003)

* **a magyar szerzők** neve vastagon szedve (**dőlt betűvel** szerepelnek azok a magyar szerzők, akik az adott publikációban külföldi affiliációval szerepelnek)

[M8] **P.D. Ispánovity**, L. Laurson, M. Zaiser, **I. Groma**, S. Zapperi, M.J. Alava, *Avalanches in 2D dislocation systems: Plastic yielding is not depinning*, Phys. Rev. Lett. **112**, 235501 (2014)

[M9] **I. Groma**, M. Zaiser, **P.D. Ispánovity**, *Dislocation patterning in a two-dimensional continuum theory of dislocations*, Physical Review B **93**, 214110 (2016).

III.4 fejezet

[M10] **L. Gránásy**, **T. Börzsönyi**, **T. Pusztai** *Nucleation and bulk crystallization in binary phase field theory*. Phys. Rev. Lett. **88**, 206105 (2002)

[M11] **L. Gránásy**, **T. Pusztai**, **T. Börzsönyi**, J. A. Warren, J. F. Douglas *A general mechanism of polycrystalline growth*. Nature Materials **3**, 645 (2004)

[M12] V. Schoeppler, **L. Gránásy**, E. Reich, N. Poulsen, R. de Kloe, P. Cook, A. Rack, **T. Pusztai**, I. Zlotnikov *Biom mineralization as a Paradigm of Directional Solidification: A physical model for molluscan shell ultrastructural morphogenesis* Advanced Materials **30**, 1803855 (2018)

III.5 fejezet

[M13] **T. Antal**, M. Droz, J. Magnin, **Z. Rácz**, **M. Zrinyi**, *Derivation of the Matalon-Packter law for Liesegang patterns*, J. Chem. Phys. **109**, 9479 (1998)

[M14] I. Bena, M. Droz, **I. Lagzi**, K. Martens, **Z. Rácz**, **A. Volford**, *Designed Patterns: Flexible Control of Precipitation through Electric Currents*, Phys. Rev. Lett. **101**, 075701 (2008)

[M15] S. Thomas, **I. Lagzi**, **F. Molnár Jr.**, **Z. Rácz**, *Probability of the Emergence of Helical Precipitation Patterns in the Wake of Reaction-Diffusion Fronts*, Phys. Rev. Lett. **110**, 078303 (2013)

III.6 fejezet

[M16] **T. Antal**, **Z. Rácz**, **L. Sasvári**, *Nonequilibrium Steady State in a Quantum System: One-dimensional Transverse Ising Model with Energy Current*, Phys. Rev. Lett. **78**, 167 (1997)

[M17] **V. Eisler, Z. Rácz**,
Full Counting Statistics in a Propagating Quantum Front and Random Matrix Spectra,
Phys. Rev. Lett. **110**, 060602 (2013)

[M18] **F. Iglói**, H. Rieger,
Long range correlations in the non-equilibrium quantum relaxation of a spin chain,
Phys. Rev. Lett. **85**, 3233 (2000)

[M19] **B. Pozsgay, M. Mestyán, M. A. Werner, M. Kormos, G. Zaránd, G. Takács**,
Correlations after quantum quenches in the XXZ spin chain: Failure of the Generalized Gibbs Ensemble,
Phys. Rev. Lett. **113**, 117203 (2014)

III.7 fejezet

[M20] C. De Dominicis, **I. Kondor, T. Temesvári**
Beyond the Sherrington-Kirkpatrick Model,
in "Spin Glasses and Random Fields", ed. P. Young, World Scientific (1997)

[M21] **F. Iglói**, C. Monthus
Strong disorder RG approach of random systems,
Phys. Rep. **412**, 277 (2005)

[M22] M. A. Muñoz, **R. Juhász**, C. Castellano, **G. Ódor**
Griffiths phases on complex networks,
Phys. Rev. Lett. **105**, 128701 (2012)

[M23] **T. Geszti**
Physical models of neural networks,
Singapore: World Scientific (1990).

III.8 fejezet

[M24] **Z. Kaufmann**, H. Lustfeld, **A. Németh, P. Szépfalusy**
Diffusion in Normal and Critical Transient Chaos,
Phys. Rev. Lett. **78**, 4031 (1979)

[M25] P. Cvitanović, R. Artuso, R. Mainieri, G. Tanner, **G. Vattay**
Chaos: Classical and Quantum,
ChaosBook.org (Niels Bohr Institute, Copenhagen 2016)

[M26] Y.-Ch. Lai, **T. Tél**
Transient Chaos, Complex Dynamics on Finite-Time Scales,
(Springer, New York, 2011)

III.9 fejezet

[M27] J. Schulze, **A. Derzsi**, K. Dittmann, T. Hemke, J. Meichsner, **Z. Donkó**
*Ionization by Drift and Ambipolar Electric Fields in Electronegative Capacitive Radio
Frequency Plasmas*,
Phys. Rev. Lett. **107**, 275001 (2011)

[M28] **Z. Donkó**, J. Goree, **P. Hartmann**, **K. Kutasi**
Shear viscosity and shear thinning in two-dimensional Yukawa liquids;
Phys. Rev. Lett., **96**, 145003 (2006)

[M29] **K. Kutasi**, V. Guerra, P. Sá
*Active species downstream an Ar-O₂ surface-wave microwave discharge for biomedicine,
surface treatment and nanostructuring*,
Plasma Sources Science & Technology, **20**, 035006 (2011)

[M30] **Á. Kövér**, G. Laricchia,
Triply differential study of positron impact ionization of H₂
Physical Review Letters **80** 5309-5312. (1998)