

Válasz opponensi bírálatra

Opponens: Arató Péter, az MTA doktora
Magyar Tudományos Akadémia
Természettudományi Kutatóközpont
Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Intézet
Kerámia és Nanokompozitok Osztály

**MTA értekezés címe: „Szén nanoszerkezetek mint trivalens poligonhálózatok
modellezése és mechanikai szimulációi”**

Szerző: Zsoldos Ibolya egyetemi docens, PhD
Széchenyi István Egyetem
Anyagtudományi és Technológiai Tanszék

Tisztelt Arató Péter Professzor Úr!

Köszönöm az MTA doktora értekezéssel végzett hasznos, segítő értékelést, az érdekes hozzáfűzéseket, megjegyzéseket, kérdéseket. Az alábbiakban adom meg a válaszokat.

Általánosságban:

Az értekezés szerkesztését szándékosan végeztem úgy, hogy a három fejezet előtt külön-külön adtam meg a szakirodalom bemutatását. Azért gondoltam erre a megoldásra, mert annak ellenére, hogy a fejezetek tartalom szerint összekapcsolhatók, mégis egymástól elkülönülő témákról szólnak.

Sajnálom, hogy nem sikerült teljesen jó megoldást adni az egymásra épülő fogalmak sorrendiségében. Ennek az lehet az oka, hogy a munkásság során egyes fogalmak használata nálam már automatikussá vált, és nem vettem észre, hogy nem mindig kellő időben definiáltam az egyes kifejezéseket.

1. fejezethez:

Az első és második tézis valóban összefügg, hiszen a második tézis az Aboav-paraméter különböző értékeinek (amelyeket az első tézis mutat) adja meg a tartalmi jelentését.

Az első tézisnek azért adtam külön hangsúlyt, mert amikor az Aboav-törvényt megtalálták és többen igazolták is az érvényességet, akkor az „a” paraméterre sokáig azt mondták, hogy „1”-hez közeli érték, mivel olyan rendszereken ellenőrizték, ahol ez valóban így is volt. Ehhez képest határozott lépésnek tartom, hogy egy tág intervallumot sikerült találni az „a” paraméter felvehető értékeire. Mivel a 2. tézis ezeket az értékeket tartalmi jelentéshez köti, ezért valóban szoros a kapcsolat az első két tézis között. Ilyen megfontolásból az első két tézis összevonása egy tézissé indokolt lehet. Úgy gondolom, hogy ez az összevonás nem csökkenti az eredmények értékét, és köszönöm ezt a javaslatot!

2. fejezethez:

Csak köszönettel tartozom a megítélésért!

A stabilitásnak az átlagos kötési energiával definiált meghatározását a szakirodalomból vettem. A szén nanoszerkezetek esetében általában úgy vizsgálták a stabilitást, hogy átlagos kötési energiát számoltak, majd megnézték, mennyire közel van ez az érték ismert stabil szerkezetekhez, mint pl. a C60 molekulához, vagy a grafénhez. Mivel a stabilitásnak több szakterületen is van különböző értelmezése, egyetértek azzal, hogy át kellene gondolni a fogalom használatát, esetleg más elnevezést keresni a mi esetünkben, de ez nem könnyű feladat, és a szakirodalomban is el kell fogadtatni.

A 4. és 6. tézis igaz állításokat tartalmaz, és valóban a csempés szerkesztési mód alkalmazására vonatkoznak. Ha nem fogadjuk el ezeket, mint önálló téziseket, hanem ehelyett belefoglaljuk őket a csempés szerkesztési mód alaptézisébe, akkor talán ez összességében nem csökkenti a csempés módszer jelentőségét. Kívülállóként ezt természetesen jobban lehet látni. Vannak különböző szokások a különböző doktori iskolákban a tézisek kimondására. Van, ahol bőséges, akár egy-két oldalas diszkusziót írnak a tézisekhez, máshol igyekeznek a legrövidebben, legegyszerűbben fogalmazni. Tartalmilag is vannak eltérő szokások, van, ahol sok tartalmat fogalmaznak egy tézisbe, máshol több kisebb állítást választanak külön, esetleg tagolják a téziseket a), b), c) stb. állításokra. Az egyszerű, rövid megfogalmazásokat szeretem, de egyetértek azzal is, hogy ezeket több helyen össze lehet vonni egy tézisnek az összefüggő állításaiba.

A 9. tézis állítása is igaz. Kívülállóként itt is jobban meg lehet ítélni, hogy ér-e ez az állítás egy önálló tézist.

3. fejezethez:

Magam is úgy értékelem, hogy az itt bemutatott eredmény, annak ellenére, hogy nagyon sok munka van mögötte, mégis nagyon a kezdete egy új dolognak, és nem lehet ma még megmondani, mennyire van közel a valósághoz a kapott eredmény, csak annyit, hogy a nagyságrendileg vagyunk a közelében.

Sok problémát megoldottam, sok munkát elvégeztem, de maradtak még bizonytalanságok, az ismertetésben pedig még elírások is vannak.

Megpróbálom most jobban megfogalmazni, mi lehet a jelentősége ennek a fejezetnek:

A Brenner-potenciál paramétereit szénhidrogénekre vonatkozó kísérleti adatokból kapták, amelyek terheletlen szerkezetek egyensúlyi helyzetére vonatkoznak. Tehát a Brenner-potenciál a terheletlen állapot egyensúlyi helyzetének környékén írja le jól a rendszereket.

Ha elhagyjuk a Brenner-potenciálból a levágó függvényt (a használata az atomi erők számításánál nyilvánvalóan rossz), akkor az egyensúlyi helyzetnek a nem egyensúlyi helyzetekre való extrapolációját kapjuk, ennek a pontosságára azonban már nincs kísérleti bizonyíték.

Az értekezés harmadik fejezete az első olyan munka, amely kísérleti eredményekhez illesztett becslést ad az atomi erő görbe lefutására a terhelt szakaszban. A becslés jóságára azt tudom mondani, hogy az erők nagyságrendjét biztosan jól eltaláltuk, a becslésen javítani majd akkor lehet, amikor lesz pontosan definiált szerkezeten pontos nyúlásmérés. Ehhez a nanotechnológiai eszközöket ismerve, szerintem már közel állunk.

A szupergyémánt szerkezeten való futtatásnak kettős célja volt. Egyrészt azt szándékoztam megmutatni, hogy a húzásszimuláció elvégezhető komplikáltabb szerkezeteken is, nemcsak egyenes nanocsöveken, így a komplikáltabb szerkezetek terhelésekkel szembeni viselkedése becsülhető. Másrészt azt kívántam számításokkal is igazolni, hogy amíg az egyenes nanocsövek csak egy irányban mutatnak rendkívüli szilárdságot, addig nanocső hálózatokban ez tömbi tulajdonság lehet. Annak ellenére, hogy a szupergyémánt szerkezetet a valóságban ma még nagyon nehezen megépíthetőnek, vagy nem megépíthetőnek tartom én magam is, az eredményeknek elvi jelentősége van. Egyedülálló, első tanulmány volt a két cél állításainak igazolására. Van még szükség és lehetőség a módszer további javítására, ezért a 10. tézist, annak ellenére, hogy a módszer értékelhető eredményt produkál, később tovább kell majd javítani. A gödöllői Szent István Egyetemen Pataki Tamás PhD hallgatóval analizáljuk tovább a módszert és a futtatásokat. Nagyon fáradtságos, sok munkát igénylő téma. A PhD kutatásban kisebb lépésekben haladunk, különböző elágazások húzásszimulációját elemezzük részleteiben, sok tesztelésre, egyeztetésre, értékelésre van szükség, amelyeknek egy részét már elvégeztük.

Válaszok a bírálát végén feltett kérdésekre:

1. 3D véletlen trivalens poliéderhálózatok topológiai vizsgálata volt a korábbi PhD munkám. Saját algoritmussal generáltam Voronoi-rendszereket, ezek tulajdonságait, anyagszerkezetekhez köthető alkalmazásait számoltam. Később folytattam ezt a munkát, 2D poligonhálózatok esetében mutattam meg, hogy az Aboav-törvény nemcsak trivalens, hanem bármilyen poligonhálózatra igaz. Ez 3D esetben is jó sejtés, de ott már nem végeztem el az igazolást. A 2D hálózatoknál maradtam. Az Aboav-törvényhez találtam az értekezésben mutatott tartalmi jelentését. Ez azért kötődik a szén nanoszerkezetek témájához, mert a poligonhálózatoknak az a korábban nem vizsgált esete, amikor a kicsi és a nagy sejtek elkülönülő csoportokban vannak jelen a hálózatban, topológiailag a szén nanocső elágazások szerkezetét jelenti, természetesen abban az esetben, amikor csak öt-, hat- és hétszögekből áll a rendszer.
2. Csak akkor értelmezhető az Aboav-törvény, amikor nemcsak hatszögek vannak, hanem legalább még egy másfajta poligon is. A zárt csővégződésekkal rendelkező szén nanocső elágazásokban ötszögek, hatszögek és hétszögek vannak. (Előfordulhatnak nagyobb poligonok is, pl. nyolcszögek is a csatlakozásnál.) Az Aboav-paraméter értéke negatív, ha a nanocsövek kisebb átmérőjűek, a csatlakozásnál a hétszögek, és/vagy a csővégeken az ötszögek egymással szomszédosak. Az Aboav-paraméter nulla, ha a nanocsövek átmérője nagyobb, a csatlakozásnál a hétszögek, a csővégeken pedig az ötszögek egymással már nem szomszédosak, hanem hatszögekkel körülvéve egyenként találhatók. Negatív irányban akkor a legkisebb az Aboav-paraméter, amikor az értekezés 3.a. ábráján mutatott mintázatot relaxáltatjuk. Ekkor $a=-4$. A relaxáltatott szerkezet sík felülethez csatlakozó párhuzamos nanocsövek sokasága, amely igencsak extrém eset, de elméletileg létezhet ilyen szerkezet.
3. A 2.4.3. pontban mutatott nanokörök terheletlen szerkezetek, bár a geometriai kényszer nagyon kicsi terheléssel egyenértékű lehet, ha ezt a kérdést pontosabban meggondoljuk. Az eredeti Brenner-potenciált használtam az energiaszámításokhoz. Csak a 3. fejezetben bemutatott szupergyémánt szerkezet húzásánál használtam az új formulákat.
4. A a_4 , a_3 , ..., b_0 paramétersornak nem adnék fizikai tartalmat. Ezek egy matematikai illesztéshez kellettek. Jó lenne, ha fizikai tartalmú paraméterek halmazával tudnám

leírni a terhelt állapotokhoz a megfelelő atomi erőfüggvényt. Ha lesznek pontosan ismert szerkezeten terhelt állapotbeli mérések, akkor minden kiderül: jó-e Brennernek a terheletlen egyensúlyi helyzetből a terhelt állapotra kiadódó extrapolált függvénye, vagy szükség lesz illesztésre.

5. A modellezési résznél igyekeztem a fémes-nemfém nanocsövek variálhatóságával mutatni az elágazások sokszínűségét. Ezzel motiválni kívántam a szén nanocsövek családjára épülő nanoelektronikai eszközök intenzívebb kutatását és tényleges alkalmazásait. További segítség lenne ehhez, hogyha komplikáltabb szerkezeteknek az elektromos viselkedését is tudnánk jól becsülni, de ez még a mai számítástechnikai eszközök mellett is nehéz feladat. Két kutatót találtam annak idején, akik számoltak áram-feszültség karakterisztikát (Green-függvényes módszerrel), Andriotis krétai és Chernozatonskii orosz fizikusokat. Mindkettőjüket megkerestem, felajánlottam nekik, hogy a módszerüket velük konzultálva, matematikusi, programozói oldalról szeretném segíteni és alkalmazni. Nem sikerült az együttműködés. Gödöllőn Mészáros Csaba fizikussal egy éven keresztül rendszeresen konzultáltunk, hogy kialakítsunk egy saját algoritmust. Nagyon nehéznek láttam a feladatot. Nem vagyok fizikus, matematikus-mérnökként (gépészmérnökként) visszatértem a saját területemhez, ekkor választottam a terhelésvizsgálat algoritmusát.

László István fizikust kerestem meg évekkel ezelőtt, aki tudott publikálni az elektromos viselkedés becslésében, itt volt közvetlen sikere a motivációnak. Jelenleg is dolgozunk közösen, próbálunk erőteljesebb motivációt kifejteni modellezés és szimulációs tartalmú elméleti munkákkal. A szén nanoszerkezetek előállításánál találtunk jó lehetőséget, ahol modellezéssel, szimulációval új, tervezhető, kézben tartható előállítási módszert javasolunk: azt mutatjuk meg, hogy grafén nanolitográfián alapuló módszerrel 3D szén nanoszerkezeteket lehet tervezetten előállítani, azaz: egyes szerkezetek önszervező módon, maguktól felépülnek, ha megfelelő alakú terítéket sikerül pontosan kivágni grafénból.

Végül ismét megköszönöm a fáradozást, a segítséget, a sok hasznos megjegyzést és kérdést!

Győr, 2012. március 8.

Zsoldos Ibolya PhD
egyetemi docens, tanszékvezető
Anyagtudományi és Technológiai Tanszék
Műszaki Tudományi Kar, Széchenyi István Egyetem
9026 Győr, Egyetem tér 1., zsoldos@sze.hu