

Hivatalos bírálói vélemény

Zsoldos Ibolya

Szén nanoszerkezetek mint trivalens poligonhálózatok modellezése és mechanikai szimulációi

című doktori munkájáról

A szén nanoszerkezetek kutatása az anyagtudomány egyik legjelentősebb területe, amit két Nobel díj is igazol. Nagyszámú kísérletet végeztek ezeken az anyagokon, nem mindig egzakt körülmények között, olyan modellek születtek, amelyek csak a fellépő jelenségek meghatározott körét írják le. Csak üdvözölni lehet Zsoldos Ibolya merészségét, aki egy nagy ívű, koherens modellt dolgozott ki új alapokon; a jövő fogja megmutatni, hogy ezt az elképzelést mennyire fogja elfogadni és alkalmazni a kutató világ. Mindenesetre nekünk most azt kell mérlegelnünk, hogy mennyit érnek azok az eredmények, amelyeket a doktori mű tartalmaz.

Az értekezés gondolatmenete egy szuggesztív logikát követ, ez a logika szabta meg az egyes fejezetek és alfejezetek sorrendjét, a tézisek is könnyen hozzárendelhetők az igazolásukat tartalmazó alfejezetekhez. Ugyanakkor az értekezés szerkezete jelentősen eltér a tudományos munkák szokásos vonalvezetésétől. Az előzmények téma szerint szétválasztva, az egyes fejezetek elején szerepelnek, ez önmagában nem lenne baj; viszont a használt jelölések és fogalmak definícióit nehéz megtalálni, jó lett volna táblázatszerűen is felsorolni az alkalmazott jelöléseket és fogalmakat. A relaxáció fogalma a 27. oldaltól kezdve szerepel, de csak az 55. oldalon derül ki, hogy a szerkezetek relaxációja a Brenner potenciál segítségével lett modellezve, a számolt energiák pedig a 2.3 táblázatban (64. oldal) tűnnek fel. Ne legyen félreértés: ha valaki az elejétől a végéig gondosan elolvassa a szöveget, minden fogalmat és összefüggést megtalál előbb vagy utóbb. Az elért eredményeket ismertető, matematikai jellegű részekben nincs sem elírás, sem pontatlanság, sem logikai ugrás. A szöveges részekben előfordulnak félreérthető szókapcsolatok (például rendkívüli rugalmasság, legérdekesebb elektromos viselkedés).

A benyújtott értekezés egy rövid, alig több, mint egy oldalas bevezetéssel kezdődik. A bevezetésben indokolni kellett volna, hogy miért választotta a Jelölt rendszerező és szimuláló munkája alapjának a poligonhálózatok topológiai tudásanyagát (1. kérdés). Szerencsésebb lett volna, ha az ezen a helyen a doktori munka témájának részletesebb ismertetése szerepelt volna azon olvasók számára is jól érthető módon, akik szakterülete csak érintkezik a Jelöltével (2. kérdés).

A bevezetés után következik az elvégzett munka eredményeit ismertető három fejezet, amelyek tárgya

- síkbeli sejtrendszerek egyes topológiai tulajdonságainak elemzése (1. fejezet),
- szén nanocső elágazások rendszerének kidolgozása, szén nanocsövekből álló nanoszerkezetek származtatása (2. fejezet),
- a származtatott nanoszerkezetek kötési energiájának kiszámítása, a húzófeszültség hatására végbemenő alakváltozás szimulációja (2.4.3. és 3. fejezet).

Az 1. fejezetben síkbeli trivalens poligonhálózatok tulajdonságait elemzi, bebizonyítja, hogy az Aboav paraméterrel jól lehet a sejtrendszerek kapcsolódását jellemezni. A tárgyalás még azok számára is jól érthető, akik soha sem hallottak a topológiáról. A 2. tézist

elfogadom, az 1. tézist nem, úgy vélem, hogy az 1. tézisben megadott számok fizikai értelmet csak a 2. tézissel együtt nyernek.

A 2. fejezet az értekezés legjobb része, a Jelölt által kiválasztott öt cikkből háromnak ez a témája. A fejezet elején bőséges irodalmi összefoglalót találunk a szén nanocsövekből álló szerkezetekről és elektromos tulajdonságaikról. Ezután következik a szén nanocső elágazások származtatása síkbeli trivalens sejtrendszerekből. A Szerző definiál két „csempét”, amelyeket A1-el és B1-el jelöl. Bizonyítja, hogy ezek a csempék és módosulataik alkalmasak nanocső elágazások modelljeinek szerkesztésére. Ezek a modellek megfelelő csempék alkalmas illesztésével, a mintázat relaxáltatása után kaphatók meg. A Szerző ezt a csempés szerkesztési módszert az egyszerűbbtől a bonyolultabb felé haladva először T, X, Y elágazások, majd tetraéderes és oktaéderes elágazások, végül nanokörök modellezésére alkalmazza. Az értekezés idevágó alfejezeteiben leírt gondolatmenet logikája, a leírás pontossága, az ábraanyag részletessége annyira meggyőző, hogy a Bíráló sem kérdezni, sem kifogásolni valót nem tudott találni. A 3., 5. és 7. téziseket elfogadom, a 4. és 6. téziseket nem, mert az utóbbiak a csempés szerkesztési mód alkalmazásainak részleteit ismertetik.

A 2. fejezet végén a 2.4.3. alfejezet a nanokörök kötési energiájának számításával foglalkozik, a munka leírása nem annyira pontos, mint az előző részek esetében (3. kérdés). Egyetértek azzal a felismeréssel, hogy az elemek beépítésével járó torzulás (geometriai kényszer) csökkenti a kötési energiát, elfogadom, hogy az elvégzett számítás szerint a csökkenés nagyságrendje 0,03 – 0,05 eV, viszont nem értek egyet a Jelölt stabilitás fogalmával. A termodinamika álláspontját erősen egyszerűsítve azt mondhatjuk, hogy a reális anyagok valamilyen stabil egyensúlyi állapotban léteznek, azonban ez az állapot metastabil, az anyag átalakulhat egy alacsonyabb energiájú állapotba feltéve, hogy a rendelkezésre álló energia nagyobb, mint amennyi az átalakuláshoz szükséges. Ismeretes, hogy a termikus energia szobahőmérsékleten 0,04 eV. A 8. tézist lényegében elfogadom, a 9.-et nem.

A 3. fejezet tárgya a szén nanoszerkezetek húzási deformációjának szimulációjával foglalkozik. Az első alfejezetben szépszámu számítás és kisszámu mérés (nincs sok) által meghatározott húzószilárdság értékeket ismereteket és értékel. Ezután a Brenner potenciál módosítása következik a potenciálfüggvény fizikai tartalom nélküli viselkedésének kijavítására. A kidolgozott módszer a 0,145 nm – 0,2 nm tartományt két részre bontja, a két résztartományt polinomokkal, összesen kilenc simító paraméterrel írja le. Két további paraméter, a függvény inflexió pontjához tartozó atomtávolság és energia értékei szabadok, ezekkel lehet a számítást a méréshez illeszteni. Nem látom, hogy ez az átalakítás lényegesen hozzájárulna a szén nanocsövek viselkedésének megértéséhez (4. kérdés).

A 3.3 alfejezet ismerteti egy „szupergyémánt” szerkezet modelljének elkészítését, majd a modell segítségével kiszámolt húzási deformáció – húzófeszültség görbéket. A húzószilárdság értéke 24,7 GPa, ha a húzás tengelye merőleges az elemi cella lapjára, és 20,8 GPa, ha párhuzamos a csőtengelyekkel. Ezek az értékek kevésbé bizonyultak érzékenynek a Brenner potenciál szabad paramétereinek változtatására. Meggyőződésem szerint húzás szimuláció eredményei azt ígéri, hogy a doktori műben leírt gondolatok, számítások egyik lényeges összetevői lesznek a szén nanocső szerkezetek mechanikai tulajdonságainak megértésének és szabályozásának. Ami a jelen helyzetet illeti, nem tudok jó szívvel javasolni olyan mérést, amelyet össze lehetne vetni az elmélettel. A 11. tézist elfogadom és nagyra tartom, a 10. tézist elvetem.

Az értekezés 4. fejezetként tartalmazza a téziszfüzetet Összefoglalás címmel. Örültem volna, az összefoglalás kitért volna arra, hogy a Jelölt mit remél a munka folytatásától (5. kérdés)

Véleményem szerint a doktori mű az alábbi új, eredeti és jelentős megállapításokkal gazdagította a tudományt.

Síkbeli trivalens poligonhálózatok esetében az Aboav paraméter alkalmas a rendszer jellemzésére a domináló sejtkapcsolódások fajtái szerint, negatív értékei esetében az átlagosnál kisebb és az átlagosnál nagyobb oldalszámú poligonok elkülönült csoportokban jelennek meg, míg pozitív értékei esetében egymás mellett, váltakozva.

A szerző síkbeli trivalens sejtrendszerekből definiált két „csempét”, bizonyítja, hogy ezek a csempék vagy módosulataik alkalmasak homogén és heterogén elágazások modelljeinek szerkesztésére. Ezek a modellek megfelelő csempék alkalmas illesztésével, a mintázat relaxáltatása után kaphatók meg.

A csempés szerkesztés módszere első ízben tette lehetővé különböző térbeli elágazás szerkezetek definiálását.

Tetszőleges típusú nanokör modellje megszerkeszthető alkalmasan megválasztott szén nanocső Y-elágazások és szén nanocső könyökök elemeiből

Szén nanocső Y-elágazások és könyökök számára a nanokörökbe való beépítés geometriai kényszerrel jelent, amelynek következtében a nanokörökbe épített elemek kohéziós energiája csökken a magára hagyott elemek energiájához viszonyítva, A csökkenés nagyságrendje 0,03 – 0,05 eV.

A húzás szimulációs vizsgálatok arra engednek következtetni, hogy az egyenes szén nanocsövek tengelyirányban mutatott kimagasló szilárdsági tulajdonságai a nanocső hálózatok esetében több orientációs irányban is tapasztalhatók.

Elfogadom a 2., 3., 5., 7., 8. és 11. téziseket.

Az ismertetett eredmények alapján a doktori munka tudományos eredményeit elegendőnek tartom az MTA doktora cím megszerzéséhez, a nyilvános védés kitűzését javaslom.

Kérdéseim a jelöltnek:

1. Modellező munkája során miért a szén nanoszerkezetek – trivalens poligonhálózatok megfeleltetéséből indult ki és nem valamilyen más létező elképzelésből?

2. Milyen összefüggés áll fenn az Aboav paraméter értéke és a szén nanoszerkezetek tulajdonságai között?

3. A 2.4.3. pontban elvégzett energiaszámításnál a Brenner potenciál eredeti alakját, vagy a 3.2. pontban ismertetett módosított alakját használták? A fullerén -7,29 eV és a grafén -7,44 eV kohéziós energiája saját számolás eredménye, vagy irodalmi adat? Végeztek-e összehasonlítást két vagy több modell között?

4. Véleménye szerint mi az a_4 , a_3 , ..., b_0 paraméter sor fizikai tartalma?

5. Milyen további munka szükséges ahhoz, hogy a doktori mű gondolatai közvetlen segítséget nyújtsanak az anyagfejlesztőknek?

Budapest 2011.10.25.

Arató Péter
Az MTA doktora