

Válasz Dr. Buka Ágnesnek a „Stabilitás és fázisátmenetek kondenzált anyagokban” című doktori értekezésem bírálatára

Mindenekelőtt szeretném megköszönni Buka Ágnesnek, a fizikai tudományok doktorának a dolgozat figyelmes átolvasását és értékelését. Ugyancsak szeretném megköszönni a dolgozatban ismertetett eredményekkel kapcsolatos elismerő szavait. A Bíráló kritikai megjegyzéseire és kérdéseire a válaszaim – az eredeti számozást megtartva - az alábbiakban találhatók.

1. A Shan-Chen módszertől – a benne használt egyszerű kölcsönhatási potenciál, illetve az ebből származtatható egyszerű állapotegyenlet miatt - valódi fluidumok fázisegyensúlyainak pontos leírását nem várhatjuk el, kivéve az egyszerűbb anyagoknál, mint pl. az argon. A rendszer korlátozott használhatóságára vonatkozó megjegyzésem erre vonatkozott.

A Bíráló megjegyezte – teljesen jogosan – hogy egy kvázi-kétdimenziós folyadékfilmet egy majdnem egydimenziós, $512 \times 2 \times 2$ -es rácson szimuláltunk. Ennek oka az, hogy a korábbi vizsgálatok alapján az $n \times n \times n$ -es rácson szimulált film számunkra fontos tulajdonságai megegyeztek az $n \times 2 \times 2$ -es rácson kapott eredményekkel. Így a számítások felgyorsítása érdekében az $512 \times 512 \times 512$ -es rács helyett az $512 \times 2 \times 2$ -es rácsot használtuk.

2. A Bíráló szerint a 31. oldali ábrák alapján nem egyértelmű, hogy a szén-dioxid sűrűségprofilját a folyadék oldalon a tangens hiperbolikus, míg a gőzoldalon a hibafüggvény alakú profil írja le pontosabban. A különbség valóban nagyon kicsi és csak a határfelület szélén látható. Valószínűleg jobb lett volna az ábrákat jobban kinagyítani, vagy az illesztés pontosságát numerikusan jellemezni. Szerencsére az ismertetett eredményeket a függvényválasztás – éppen a kis különbség miatt – nem befolyásolja.

3. A Bíráló az üvegesedési hőmérséklet nem monoton változásának magyarázatára kíváncsi. Sajnos erre a kérdésre még nincs válaszunk, egyelőre még abban sem vagyunk biztosak, hogy a kapott nem-monoton viselkedés általános-e, vagy csak szerencsésen választottunk vizsgálandó anyagokat. Mindenesetre az a tény, hogy a vizsgált anyagok kémiaiilag nem hasonlóak és mégis hasonló jelenséget találtunk náluk, a jelenség általánosságára vall; ebben az irányban tovább szeretnénk folytatni a kutatásokat.

4. A két folyadékfázis közötti határ helyét több módszerrel becsülték, pl. ellenállás és sűrűség-mérésekkel; ekkor gyenge ellenállás-beli, illetve sűrűség-beli anomáliát találtak (ld. pl. Brazhkin és tsai, Physica B, 265(1999)64).

5. A Bíráló észrevétele jogos, valóban hibásan hivatkoztam a dolgozatban a 4.4b ábrára, a helyes hivatkozás a 4.8b ábra lenne.

6. A 4.10-es ábrával kapcsolatban a Bíráló hiányolja azt, hogy a két különböző módszerrel a két különböző nyomástartományban mért fázisátmeneti görbék közt nincs átfedés. A vezetőképesség-mérést mind a pozitív, mind a negatív nyomástartományban használtuk és a pozitív tartományban a mért értékek hibán belül megegyeztek az optikai módszerből kapott értékekkel, így ezeket külön nem tüntettük fel az ábrán és sajnos ezt a szövegben nem emeltük ki.

7. A Bírálónak igaza van, a vezetőképesség valóban érzékenyebb a szennyeződésekre, abban az értelemben, hogy a vezetőképesség főként az ionos szennyeződéseknek köszönhető. Ha ezektől mentes lenne a minta, akkor ezt a mennyiséget nem tudnánk mérni. Az érzékenységgel inkább arra akartam célozni, hogy a szennyezett mintáknál a dielektromos permittivitás pontos mérése nehezebb volt a mérés zaja miatt, míg a vezetőképesség értéke – amely érték ugyan nagyban függött a szennyezés mennyiségétől – pontosabban volt mérhető.

8. A Bíráló az „oldatszerminőségi integrál” pontos definícióját kéri; ez az integrál a parabola két szára közt levő terület nagyságával egyezik meg, a csúcstól a monomernek megfelelő X értékig. A zavart az okozza, hogy a 4.18-as ábrán helyenként a parabolát nem ábrázoltam a csúcsig, illetve a görbék sem mindig terjedtek ki a monomer által definiált határig, így az ábra alapján nem voltak világosak az integrálási határok.

9. A Bíráló észrevétele jogos, az 5.9 és 5.10-es ábrák érthetőbbek lettek volna színesen.

Végezetül újra szeretném megköszönni bírálómnak a dolgozat gondos átolvasását és a benne leírtakról adott pozitív véleményét.