

Válasz Dr. Jedlovsky Pálnak a „Stabilitás és fázisátmenetek kondenzált anyagokban” című doktori értekezésem bírálatára

Mindenekelőtt szeretném megköszönni Jedlovsky Pálnak, az MTA doktorának a dolgozat gondos átolvasását és értékelését, valamint az eredményekkel kapcsolatos elismerő szavait. Az alábbiakban igyekszem a kérdéseire és megjegyzéseire kielégítő válaszokat adni.

Köszönöm a Bírálónak a dolgozat szerkesztésére vonatkozó pozitív megjegyzéseit és a formai hibákkal kapcsolatos megjegyzéseit is. A molfrakció kifejezés helyett valóban a móltört lett volna a megfelelő. Termohidraulikában és áramlástanban a „kód” kifejezés a magyar szaknyelvben is meghonosodott, bár bevallom, kezdetben nekem is szokatlan volt. A 76. oldalon valóban helytelenül hivatkoztam a 4.4.b ábrára, ez valójában a 4.8.b ábra. A 109. oldalon, az 5.13 ábrán a csúcsok helyeit és értékeit is feltüntettem, (csúcs, érték) formában. Az ábrafeliratok valóban helyenként túl rövidek; gyakran nem akartam megismételni a szövegben már megtalálható információt, bár így az ábrák nem lettek önmagukban is érthetők.

A Bírálónak a dolgozatban leírt eredményekkel kapcsolatban több kérdése és megjegyzése volt, ezekben az alábbiakban válaszolok, megtartva az eredeti sorrendet.

- A spinodális formájával kapcsolatban az újabb szimulációk alapján valóban egyre inkább kizárják a minimummal rendelkező változat létét, viszont a kisszámú kísérleti eredmény alapján kevésbé lehet állást foglalni. A dolgozat szerzőjének interpretációja szerint a legújabb, még nem publikált (de konferencián már bemutatott) hangsebesség-mérések jobban leírhatók a minimummal rendelkező változattal, mint a többivel.

- A 33. oldalon leírt egyik mondatból valóban úgy tűnik, mintha a szimulációból kapott határfelületi vastagság és határfelületi feszültség mért, vagy elméletekből kapott értékekkel való összehasonlítása a spinodális-számítási módszerünk jóságát ellenőrizte volna. A Bírálónak igaza van, ezzel nem a módszer jóságát ellenőriztük. A későbbiekben ki is fejtettük, hogy így csupán azt ellenőriztük, hogy a szimulációból kapott határfelület mennyire hasonlít egy valódi határfelületre, azaz – mint a Bíráló is rámutatott – a szimuláció jóságáról kaptunk így információt.

- A Bíráló szerint a szimulációs dobozhoz rögzített koordinációs rendszerben definiált határfelület a kapilláris hullámok miatt nem pontos, így egy belső – ú.n. „intrinsic” – határfelület használatával pontosabb eredményeket kaphatunk. Alacsony hőmérsékleteken – ahol a határfelület keskenyebb – valóban nem tudtuk a módszerünket jól használni, ehhez túl zajosak voltak a szimulációs eredmények. Ennek egyik lehetséges oka a kapilláris hullámok léte. A jövőben feltétlenül meg kell próbálni a spinodális határt a belső határfelületről meghatározni, hátha az így kapott eredmény pontosabb lesz, illetve a módszer alacsony hőmérsékleteken is használhatóvá válik.

- A Bíráló megjegyezte, hogy a jelenlegi elméletek és szimulációk már nem is két, hanem három folyékony vízfázist feltételeznek, míg a dolgozatban csak kettő szerepel. A dolgozat szerzője inkább kísérleti beállítottságú, ezért foglalkozott csak két folyadékfázissal, amelyek közül az elsővel a mindennapokban is találkozunk, míg a második létezésére viszonylag sok, bár csak indirekt kísérleti bizonyíték található (azaz tömbfázisban még nem állítottak elő ilyen vizet). További – legalább még egy - folyadékfázis létezésére is utalnak jelek, de ennek léte szélesebb körben még nem elfogadott. A tudománynak ezen a területén – mint manapság oly sokon – a kísérletek még jócskán a szimulációk mögött ballagnak.

- Az általunk vizsgált, kémiaiilag igen különböző anyagok többségénél sikerült a fagyáspontgörbének pozitív és negatív meredekségű szakaszát is találni, ezért úgy véljük, hogy a jelenség általános lehet és így – mint ahogy a Bíráló a kérdésében utal erre – a víz szokatlannak nevezett lefutású fagyáspont-görbéje igazából nem is annyira szokatlan. A jelenlegi elméletek ezt a szokatlanságot a víz sűrűséganomáliájához kötik; amennyiben valóban csak ez az anomália okozhat a hőmérséklet-nyomás diagramon negatív meredekségű fagyáspontgörbét, akkor valószínűleg a sűrűséganomália is sokkal elterjedtebb lehet, nemcsak a víznél és néhány egyéb folyadéknál léphet fel. Mivel a szilárd-folyadék fázisátmenetekhez tartozó egyensúlyi és stabilitási görbék metszhetik a folyadék-gőz stabilitási határt, így viszont gyakran előfordulhat, hogy a fagyáspont-görbének azon pontja, ahol a meredeksége előjelet vált, már abba a tartományba esne, ahol folyadék-fázis sem stabilan, sem metastabilan nem létezhet.

- A töréspont nélküli olvadáspont-görbénél a lefutást (pozitív-, illetve negatív meredekséget a hőmérséklet-nyomás diagramon) nyilván jelentősen befolyásolja a görbe folyadékfázis felőli oldalán a folyadék szerkezete, azaz amennyiben két folyadékfázis létezik, úgy valószínűleg az olvadáspont-görbe lefutása is megváltozna. A dolgozatunkban azt igyekeztünk bizonyítani,

hogy nem biztos, hogy minden olyan anyagnál van második fázis, ahol az olvadáspont-görbe kisebb-nagyobb görbülete miatt egy talán nem is létező töréspont sejlik fel. Az viszont nem tagadható, hogy ahol van második fázis, ott előfordulhat töréspont.

- A fajlagos vezetőképesség nyomásfüggését leíró 4.1-es egyenletnél a Bíráló szerint az egyenlet lezárható, nincs szükség a végén a „+...” jelzésre. Az egyenlet analógiájaként szolgáló, a hőmérséklet-függés kísérleti eredményeit leíró egyenletben szokás még egy olyan tagot is feltüntetni, amelyben a kitevő $1-\alpha+\Delta$ formájú, ahol a Δ az úgynevezett első korrekció exponense (értéke ≈ 0.5), amely csak a kritikus pont környékén számít (ld. pl. Malik és tsai., Z. Naturforsch. 58a(2003)541–545). Ezt – és az esetleges további korrekciókat - a mi esetünkben elhanyagolhattuk, de az egyenletben mégis jelezni akartam a létüket. A Bíráló második észrevétele, miszerint a dolgozatban a σ_0 értékének bevezetésénél - amely egy referencia-nyomáson vett fajlagos vezetőképesség – referencia-nyomásként helytelenül a nullát vagy az atmoszférikus nyomást jelöltem meg, teljesen jogos. Alapértékként valóban tetszőleges nyomáson mért vagy számított fajlagos vezetőképességet használhatunk és ez mérési eredmények kiértékelésénél praktikus okokból a 0 vagy 1 bar nyomáson mért érték, de ebben az egyenletben (mint ahogy pl. a 4.2-ben is) a referencia-érték a kritikus nyomáshoz tartozó vezetőképesség volt. Szerencsére a referencia-érték megválasztása nem befolyásolta az elvégzett kiértékeléseket és a belőlük levont következtetéseket.

Végezetül még egyszer szeretném megköszönni bírálómnak a dolgozat gondos átolvasását és a leírtakról adott elismerő véleményét.

Budapest, 2015. február. 20.

Imre Attila