

Köszönöm szépen a „Karbon alapú nanostruktúrák morfológiai jellemzése képelemzés segítségével” c. akadémiai doktori értekezésem bírálatára fordított időt és energiát. Az alábbiakban igyekszem tételesen válaszolni a bírálatban feltett kérdésekre, ill. megjegyzésekre. A válasz készítéséhez felhasznált szakirodalmakat felső index jelzi, és a pontos irodalmi hivatkozások az adott oldalon, a lábjegyzetekben szerepelnek. A válaszokban dőlt betűs szöveg jelzi az értekezésből származó idézeteket.

KÉRDÉSEK

1. KÉRDÉS

Az 5. fejezet a korom-morfológiai vizsgálatok problematikájával foglalkozik, kitérve ennek előzményeire, a korábban szerzett saját megfigyelésekre, tapasztalatokra, különös tekintettel a lamináris lángból vett korom mintákra. A hőmérséklet hatásának jelentőségét a koromképződés kapcsán több ízben is hangsúlyozza a szerző, de erre vonatkozóan konkrét adatokat nem közöl.

Felvetődik a kérdés: milyen szerepet játszik a hőmérséklet a korom képződés folyamatában a három különböző méretű és fajtájú láng vizsgálatokor? Meglepőnek tűnik, hogy a korom-mintákra meghatározott átlagos rácssíktávolságok között (lásd. 2. táblázat adatait) szignifikánsnak nevezhető különbség nem tapasztalható.

VÁLASZ

A koromképződés kinetikája értelemszerűen nem lehet független a hőmérséklettől. Ezen túlmenően a hőmérséklet hatását a kialakuló korom szerkezetére számos kutatócsoport vizsgálta és publikálta:

„morphologies and **structure** of the soot **depend on** carrier gas **temperature**”¹, „Different properties and **nanostructures** were found to develop in the soot, **depending on the temperature** and on soot aging associated”², „**Temperature**–time history has a **profound impact upon the soot nanostructure** for all the fuels considered here”³ stb.

A konkrét adatok kapcsán valóban megállapítható az, hogy szignifikáns rácssík-távolság különbséget nem tudunk kimutatni.

¹ Sumio Iijima, Tomonari Wakabayashi, and Yohji Achiba: „Structures of Carbon Soot Prepared by Laser Ablation”. *J. Phys. Chem.*, 100 (14), pp 5839–5843 (1996)

² M. Alfè, B. Apicella, J.-N. Rouzaud, A. Tregrossi, A. Ciajolo: “The effect of temperature on soot properties in premixed methane flames”, *Combustion and Flame* 157 (2010) 1959–1965

³ R.L. Vander Wal, A.J. Tomasek: “Soot nanostructure: dependence upon synthesis conditions” *Combustion and Flame* 136 (2004) 129–140

2. KÉRDÉS

A dolgozat 43 oldalán a 10. és 11. ábra diagramjai a maximális Feret-átmérő valamint a „köryszerűség” néven ismert paraméterek eloszlását ábrázolják kétféle tüzelőanyag elégetése során származtatott mintákra vonatkozóan. Mindkét paramétert gyakran alkalmazzák mikroszkópos felvételek kvantitatív metallográfiai jellemzésekor. Ezek meghatározása illetve használata olyan esetekben szokásos, ha a képen található részecskék nem „vonalszerűek”, hanem véges területtel rendelkező foltszerű alakzatok. Visszatérve a 10. és 11. ábrákra, kérdésem: milyen következtetéseket lehet levonni a feltüntetett diagramokból?

VÁLASZ

A levonható (nem túl erős) következtetést az ábra utáni bekezdés tartalmazza a 44. oldal tetején:

„Bár a módszerrel kimutathatók kismértékű különbségek is a korom szerkezetében, megállapítások valójában csak kvalitatívan tehetők: az etilén szerkezete nagyobb mértékben változott az égő feletti magasság (a lángban eltöltött idő) függvényében, mint a helyettesítő tüzelőanyagé, de maximális égő feletti magasságnál a szerkezetük igen hasonló.”

3. KÉRDÉS

A 12. ábra egy koromrészecske HRTEM felvételét mutatja, és erre vonatkozóan utalás van arra, hogy ennek digitalizált kép mátrixa 2048x2048 pixel méretű. Kérdésem ez esetben a következő: mekkora a szűrkeségi fokozatok (diszkrét tónusok) maximális száma a digitalizált képen? A 47. oldalon található 14. ábra információ-tartalmának értelmezése számomra problematikus. Mit is tekinthetünk az ábrán legalább 50%-os megbízhatóságú területeknek? A 15. ábra elegáns, kár, hogy a rácstávolságok eloszlására nézve számszerű információt nem tartalmaz.

VÁLASZ

A 12. ábrán és a többi HRTEM felvételen is, 256 fokozatú szürkeárnyalatos képek.

A megbízhatóság értelmezése visszavezethető a köryszerűségre. Itt csak az irányultsági eloszlás megbízhatóságáról esik szó. Az egyes detektált élek irányultsága mellett annak az iránytengelyre számított tehetetlenségi nyomatékát ($I_{\min}$) és az erre merőleges irányú tengelyre számított tehetetlenségi nyomatékát ($I_{\max}$) is kiszámoljuk. A megbízhatóság a következő képlettel számítható:

$$\text{megbízhatóság} = 1 - I_{\min}/I_{\max}$$

A mögöttes gondolat az, hogy ha minimum és a maximum nyomaték hányadosa 1 körüli érték, akkor az objektum közel körszerű, és így nincs határozott irányultsága, bár az algoritmus minden pixelben ad számszerű eredményt. 50%-os megbízhatóságról tehát akkor beszélhetünk, ha a nyomatékok hányadosa 2.

4. KÉRDÉS

A 7.2 alfejezetben (50. oldalon), a következők olvashatók: „..az itt bemutatandó új megközelítés a mikroszkópos felvételeket úgy értelmezi, mint a mintáknak a folytonos (legalábbis a kép szintjén) kivetülését az elektromágneses térbe és megkísérli a vetületekké alakult minták elemzését. Ez a képmodell kvantumfizikai szempontból is jobban megfelel a valóságnak.” Kíváncsios lenné a fentebbi megállapítás értelmezését jobban megvilágítani.

VÁLASZ

A képelemzés „hagyományos” módszerei általában sík felületre vetített képként értelmezi az elektronmikroszkópos felvételeket is. A bemutatott módszer azonban hullámfüggvényként is értelmezhető szűrőket használ (16. ill. 17. ábra), ezért utaltam a kvantumfizikai megközelítés hasonlóságára.

5. KÉRDÉS

A szűrők paraméterezése négy független mennyiség célszerű megválasztásán alapul. A 61. oldalon e négy független paraméter: n_θ , n_λ , p_θ és p_λ . Ezek közül az utóbbi kettő értelmezése nem világos, van-e ezeknek valamilyen közérthető definíciója?

VÁLASZ

A szűrőkészlet összeállításakor meg kell adni a készlet méretét és a szűrők alakját (ld. 17. ábra). Az alakot a p_θ és p_λ paraméterekkel lehet állítani. A p_λ fekete-fehér sávokkal párhuzamos kiterjedést változtatja (nagyobb p_λ esetén kisebb a kiterjedés), a p_θ pedig a sávokra merőleges kiterjedést (nagyobb p_θ esetén kisebb a kiterjedés) befolyásolja. Amennyiben ellipszissel közelítjük az alakot, úgy p_λ az ellipszis kistengelyével, p_θ pedig a nagytengelyével arányos fordítottan.

MEGJEGYZÉSEK

1. MEGJEGYZÉS

Úgy vélem, hogy nem szerencsés a 6.1.1 alfejezet címében az algoritmus megnevezésében a „szkeletonizációs” jelző, ugyanis a hagyományos képelemzési terminológia szerint szkeletonizáción kimondottan vonalszerű alakzatok generálását szokás érteni.

VÁLASZ

A „skeletozation” kifejezést az alfejezetben is idézett [21]-es irodalmi hivatkozásban használták Sharma és társai⁴. Yang és társai ugyanezt kifejezést használták, munkájukra az értekezés [16]-os irodalmi hivatkozása utal.⁵ A fejezetben bemutatott algoritmus az említett publikációk eredményeire is épít, ezért maradtam a „szkeletonizáció” kifejezésnél. Bár az élből létszódó karbon síkok az esetek nagyobb részében valóban tekinthetők vonalszerű alakzatoknak, valószínűleg szerencsésebb fejezetcím lett volna a „Szegeztációs algoritmus” kifejezés, mert az algoritmusnak egyik alapvető eljárása a szegeztálás.

2. MEGJEGYZÉS

A 3. táblázatban saját mérési eredményeit (átlagértékeket) ismerteti a szerző, ezeket két külföldi kutató eredményeivel hasonlítja össze. Az rácssík-távolságok átlagértékei között szignifikáns eltérés nem tapasztalható.

VÁLASZ

Igen, erre a tényre, utaltam is az értekezés 68. oldalán („*A fluoranthene minták átlagos rácssík-távolság értéke megegyezik az általunk mért értékkel (...) az anthracene grafithez tartozó érték kisebb ugyan, de az eltérés elhanyagolható*”). Az egyezés tulajdonképpen megnyugtató, mert felfogható a módszer validálásaként is.

3. MEGJEGYZÉS

A 27. ábra diagramjai 5 különböző vegyületre vonatkozóan illusztrálják a rácssík távolság eloszlására jellemző hisztogramokat. Ezeken ugyan megfigyelhető kisebb csúcsok előfordulása, de véleményem szerint ez a szokásos mérési bizonytalanság, egyfajta zaj jelenlétével magyarázható, és e jelenségből nem lehet az eloszlások multimoduláris jellegére következtetni. A fenti megfontolásokból következően, nem tűnik bizonyítottnak azon állítás (lásd. 70. oldalon), hogy az előállított karbonszerkezet függ az alapanyag kémiai összetételétől.

⁴ A. Sharma, T. Kyotani and A. Tomita, “A new quantitative approach for microstructural analysis of coal char using HRTEM images,” *Fuel*, vol. 78, pp. 1203-1212, 1999

⁵ . Yang, S. Cheng, X. Wang, Z. Zhang, L. Xiao-rong and G. Tang, “Quantitative analysis of microstructure of carbon materials by HRTEM,” *Trans. Nonferrous Met. SOC China*, vol. 16, pp. 796-803, 2006.

VÁLASZ

Valóban meglehetősen zajosnak tűnnek a hisztogrammok. Kivételnek tekinthető a p-terphenyl, ahol meglehetősen határozott csúcs látható 3,38 Å, 3,48 Å és 3,55 Å körül is. Ezt erősíti meg a 2012-ben kifejlesztett „új” algoritmussal elvégzett elemzés, melyről a 7.2.2 fejezet számol be és az eredményeket – lényegesen robosztusabb adathalmaz alapján – a 28. ábra mutatja be. A multimodalitás is a p-terphenyl minta esetében a leghatározottabb.

A multimodalitás vitathatósága mellett mindkét módszer esetében egyértelmű, hogy a rácscsík-távolságok eloszlása szignifikáns eltéréseket mutat a különböző eredetű minták esetében. Azt gondolom, hogy ez utóbbi is elegendő a kérdéses állítás alátámasztására.

A szakirodalomban egyébként számosan publikáltak 1998 (az eredeti algoritmus és a kérdéses következtetés születése) óta a feltételezést megerősítő adatokat, például:

„This comparative observation indicates two major findings. First is that **the soot nanostructure depends upon initial fuel composition** – and by extension molecular structure.”⁶

„As the results show, the nanostructure of soot does indeed depend upon its formation conditions. **Fuel identity governs the soot nanostructure** under specific combinations of temperature and residence times as dictated by flow rates.”⁷

A DISSZERTÁCIÓ TÉZISEI

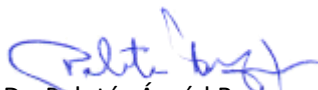
A 4. téziscsoportban foglalt következtetés, amely szerint az előállított karbonszerkezet függ az alapanyag kémiai összetételétől, nem tűnik kellően bizonyítottnak. Ezért a Bíráló azt új tudományos eredményként nem ismerte el.

VÁLASZ

A 3. Megjegyzésre adott válaszomban igyekeztem erre a témakörre választ adni.

Összegzésként ismételten köszönöm az összességében támogató és elismerő bírálatot, a jobbító szándékú kritikai megjegyzéseket és remélem, hogy a kérdéseket is meg tudtam válaszolni a fentiekben.

Miskolc, 2017. június 10.



Dr. Palotás Árpád Bence

⁶ Huang, Chung-hsuan: Soot nanostructure evolution from gas turbine engine, premixed and diffusion flame: Equivalence ratio, flame temperature, and fuel dependencies. PhD. Dissertation, Pennsylvania State University, USA, 2014

⁷ R. L. Vander Wal and J Tomasek: Soot nanostructure: dependence upon synthesis conditions. Combustion and Flame, 136 (1-2), pp. 129-140 (2004)