

VÁLASZ Dr. Tombácz Etelka, az MTA doktora bírálatára

Hálásan köszönöm a dolgozatom alapos átnézését, és az elismerő szavakat. Elfogadom és nagyon köszönöm az értékes megjegyzéseket, észrevételeket.

Válaszaim a bírálatban feltett kérdésekre a következők.

1. kérdés

A 6. táblázat eredményeinek értékelése során olvashatjuk „A Kivonat 1 és Kivonat 2 minták között előjelpróba és Wilcoxon-féle előjeles rangpróba alapján is szignifikáns a különbség.” mondatot. Dicséretes, hogy statisztikai módszereket alkalmaz, de rövid magyarázatot, hivatkozást meg kellett volna adni. Röviden mutassa be ezeket a módszereket!

A statisztikai módszereket azért alkalmaztam, hogy a lehető legobjektívabb módon eldönthető legyen az, hogy a kísérletek során két rendszer között van-e szignifikáns különbség, illetve történik-e szignifikáns változás az egyes folyamatokban. Mindig olyan statisztikai módszert választottam, amelynek a feltételei teljesültek az adott kísérletre, és a kapott adatokra.

A Wilcoxon-féle előjeles rangpróba, valamint az előjelpróba azt vizsgálja, hogy különbözik-e a vizsgált változó átlaga két csoport között, ha a mintavételi egységek párosítottak. A Wilcoxon-féle előjeles rangpróba egy folytonos és szimmetrikus eloszlás szimmetria-középpontját (ami egyben az eloszlás mediánja és átlaga is) hasonlítja össze egy hipotetikus értékkel. Feltétele: a párokon belül mért különbség eloszlása folytonos és szimmetrikus. Az előjelpróba egymintás mediánteszt, amely azt teszteli, hogy a vizsgált populáció mediánja eltér-e egy feltételezett értéktől. Ha páros mintákra alkalmazzuk, akkor azt vizsgáljuk, hogy a párok különbségének mediánja eltér-e nullától. Az előjelpróba feltétele a folytonos eloszlású változó.

A Mann-Whitney-teszt során két populációt hasonlítunk össze egymással két független minta alapján, a mért értékek helyett rangszámokkal számolva. Rang-transzformáció során egy megfigyelt érték rangja (rangszáma) a sorszáma a nagyság szerint sorba rendezett értékek sorában. Feltétele: a folytonos változó eloszlása a két csoportban azonos alakú, azaz egymásba eltolással átvihető. Nem engedi meg a szórások különbözőségét.

A Mood-féle mediánteszt azt teszteli, hogy a folytonos változó mediánja eltér-e a csoportok között. Feltétele: folytonos eloszlású változót hasonlítottunk össze csoportok között független minták alapján.

Az eddig ismertetett nemparaméteres eljárások a vizsgált változók eloszlásától függetlenül alkalmazhatók.

A korreláció két változó közötti kapcsolat szorosságának mérésére alkalmas módszer, azt vizsgáljuk, van-e összefüggés két folytonos változó között. A lineáris kapcsolat erősségét a Pearson-féle korrelációs együtthatóval mérhetjük, a módszer hipotézis vizsgálatra alkalmas.

Az alkalmazott statisztikai próbákat az Origin programmal végeztem el, és a próbák feltételeinek teljesülését is ebben vizsgáltam meg¹.

2. kérdés

Miért foszfát puffert használt a fulvosav és nátrium-humát granulált aktív szénen való adszorpciójának, a humuszanyagok EM-mel történő lebonthatóságának, valamint eltávolíthatóságuk érdekében kombinált alkalmazásuk, továbbá a diklofenák adszorpciójának, lebonthatóságának és a szerves anyagok klórozhatóságának vizsgálatakor?

A talajkivonatok pH beállításához a foszfát-puffert választottuk, mert nincs elnyelése a vizsgált UV-vis tartományban, a TOC méréseket sem zavarja (pl. az acetát-puffer mindkét módszer eredményeit befolyásolja), továbbá széles tartományban használható. Az általam használt meglehetősen bonyolult modell rendszerekben így legalább a puffer alkotóit azonosnak tekinthettük. Mindezek indokolták, hogy a foszfát-puffert használjam minden esetben a pH beállításához.

3. kérdés

Minek alapján állítja, hogy „A fulvosav ... az aktív szénen nagy hatékonysággal adszorbeálódik. (13. ábra)” (73. o.)?

A kísérletek során a kiindulási koncentrációértékekhez képest jelentősen lecsökkent a fulvosav oldatban mért egyensúlyi koncentrációja, a fulvosav jelentős hányada adszorbeálódott, 90% körüli az eltávolítás hatékonysága ezekben a kísérletekben.

Az aktív szénen a kisméretű szerves molekulák, mint a fulvosav jól adszorbeálódnak, amit számos irodalom támaszt alá, és a természetes eredetű szerves anyagok eltávolítására a ma ismert

¹ Reiczig J., Harnos A., Solymosi N. (2010): Biostatisztika nem statisztikusoknak, Pars Kft., Budapest

leghatékonyabb eljárás, melyet különböző kiegészítő technológiákkal kombinálva még eredményesebbé tehetnek²

4. kérdés

A zéta potenciál meghatározásnál milyen volt az egyes mérések minősége (NanoZS opció)?

A 25 °C-os hőmérsékleten végzett zéta-potenciál mérések szórása 0,5-3 mV között volt 3-3 párhuzamos minta esetén. A vizsgálat minőségét elméletileg nagy vezetőképesség, vagy buborék, lebegőanyag jelenléte befolyásolhatta volna, azonban a mérési körülményeknek megfelelték a minták, amit a készülék is ellenőriz a mérés során. A zéta-potenciál mérés tartománya 3,8 nm – 100 µm részecske átmérő.³ A mérés előtt a vizsgált oldatokat 0,45 µm pórusméretű membránon szűrtem.

5. kérdés

Szép kinetikai eredményeket mutat be a diklofenák klórozás hatására bekövetkező bomlásáról (14., 15., 16. táblázatok és 21., 22. ábrák). Az ábrákkal kapcsolatban felmerült, hogy elegendő volt-e jelenlévő klór mennyisége a 10-szeres diklofenák koncentrációnál (22. ábra 250 mg/L, 21. ábra 25mg/L)?

A 250 mg/L diclofenac koncentráció mellett a klór kis feleslegben ($n_{\text{Dicl}}:n_{\text{Cl}_2}=1:1,3$) volt jelen, ami 2 óra elteltével elfogyott. Azért használtunk ilyen molarányt, hogy leálljon a reakció és érzékelhetővé váljon a folyamat. Ezáltal jobban összehasonlíthatóvá válhattak a különböző modell rendszerek abból a szempontból, hogy a diclofenac átalakulását mely humuszanyagok milyen mértékben befolyásolják. Azonban a diclofenac hirtelen koncentráció csökkenése után a klór még nem fogyott el teljesen, ami különösen a tiszta diclofenac oldatban látszik, mert itt a kísérlet teljes időtartama során enyhén csökkent a vegyület koncentrációja, tehát a folyamat eleinte csupán lelassult. A humuszanyagok jelenlétében azonban érzékelhetően korábban elfogyott a klór, mint amikor azok nem voltak jelen az oldatban.

² Menendez-Diaz J.A., Martin-Gullon I. (2006): Types of carbon adsorbents and their production. in: Activated carbon surfaces in environmental remediation. Elsevier Ltd., New York, Amerikai Egyesült Államok. 8-11; 43-45.

³ malvernpanalytical.com/en/products/product-range/zetasizer-range/zetasizer-nano-range/zetasizer-nano-zs

6. kérdés

A kolloid stabilitás megváltozását általában szabad szemmel (pl. aggregálódó rendszerek ülepedése, éles határfelület az ülepedő frontnál, töményebb diszperzióknál az edény falán tapadó film idővel „töredezetté” válik) is észre lehet venni. Tapasztalt-e ilyen változásokat a vizsgált rendszerekben, pl. az adszorpciós sorozatoknál, különösen a felületaktív anyagok esetén?

Igen, az instabil kolloid rendszerek esetén zavarosság több minta esetén is látható volt, időnként kis mennyiségű üledék képződését tapasztaltam.

7. kérdés

A 29. ábrán látható lokális minimumok nem meggyőzőek. Milyen volt az egyes sorozatok reprodukálhatósága?

A mérés 3-3 párhuzamos mintával történt, a szórások igen kicsik illetve elfogadható mértékűek voltak, az átlagos szórás 3,7 mV, ami megfelel a zéta-potenciál mérés hibájának. Az üvegeket zárva tartottam, a porszennyezés elméletileg minimális lehetett.

TÉZISEK

Az 1. tézis b) mondata a flokkuláció szót koagulációra cserélve a következő módon hangzik: *“Szerves anyagok hiányában a vizsgált tenzidek só jelenlétében az aggregátumok képződését, a koagulációt segítik elő.”*

2. tézisben a „rendszer több paramétere is lényegesen megváltozik” kifejezés a következő mondat konkretizálja, de átvezetésként beírtam „a következő módon” kifejezést.

„A homoktalajon a NaDS adszorpciójára három lépcső jellemző, a függvény kezdeti szakasza alapján L-típusú (Langmuir) izotermát eredményezve. Igazoltam, hogy a NaDS 100 mg/L kiindulási koncentrációja felett a 0,01 mól/L kalcium-iont tartalmazó rendszer a következő módon változik: a homoktalajon fajlagosan adszorbeálódott NaDS mennyisége és a talajkivonatban a részecskeméret lényegesen növekszik, ha az egyensúlyi koncentráció meghaladja a 32,7 mg/L-t, amelynél a zéta potenciál értéke instabil rendszerre utal (-22,7 mV). A 750 mg/L NaDS kiindulási koncentráció felett ($c_e = 349$ mg/L) az adszorbeált mennyiség és a részecskék mérete is hirtelen megnövekszik, miközben a zéta potenciál nagymértékű csökkenése stabil kolloid rendszer kialakulását jelzi, igazolva a micellák kialakulását és adszorpcióját. A NaDS homoktalajon történő

adszorpcióját elsősorban a hidrofób kölcsönhatás irányítja, de a kalcium-ionok jelenléte befolyásolja a folyamatot. ”

A 4. tézispontban a nátrium-humát rezisztenciáját a “nehezen hozzáférhető” kifejezésben fogalmaztam meg, mivel a házivédésen többen felhívták a figyelmem a rövid és tömör megfogalmazás fontosságára a téziseknél, ezért azokon tovább rövidítettem, bár való igaz, hogy a humátok rezisztenciáját bővebben ki lehetett volna fejteni a 4. tézispontban is. A kémiai és biológiai bomlásnak való ellenállásról esik szó az összefoglalásban és az irodalmi összefoglalóban (19. o.). A 4. tézispont 2. mondata a kért magyarázattal kibővítve a következő módon változik:

„Mivel a humátok rezisztens molekulák, a természetben ellenállnak a kémiai és biológiai lebontásnak, ezért a mikroorganizmusok számára nehezen hozzáférhető nátrium-humát esetén a kisebb hatékonysághoz a csökkenő tápanyagmennyiség is hozzájárult a mért C/N arányok alapján. ”

A bírálóat “Értelmezési kérdések” részéhez kapcsolódóan

A többlépcsős izotermák paramétereinek számításához az illesztő algoritmus a 8 paraméteres izotermafüggvény esetén egy a 9 dimenziós függvény minimumhelyét egy pontból kiindulva keresi meg valamilyen illesztő algoritmussal. Ha nem megfelelő a kiindulási pont, akkor a legközelebbi lokális minimumhelyet találja csak meg, amely kis hibát eredményez, ugyanakkor nem biztos, hogy az a globális minimumhely. Ez okozhatja a paraméterek bírálatban említett eltérését.

A 29. ábrán a kolloid stabilitást valóban a humuszanyagok határozhatják meg elsősorban, amit a diclofenac kismértékben befolyásolhat egyrészt a karboxil-csoportok között fellépő taszítás miatt, másrészt fizikai kölcsönhatás révén a humuszanyagokhoz történő kapcsolódás miatt.

Elfogadom és nagyon köszönöm az értékes megjegyzéseket, észrevételeket.

Bízom abban, hogy válaszem és a módosítások Bírálóm megalégedésére szolgálnak.

Még egyszer nagyon szépen köszönöm Dr. Tombácz Etelkának a dolgozatom alapos átnézését és jobbító szándékú javaslatait.

Budapest, 2018. október 27.

Benkőné Joó Szilvia