

Opponensi vélemény

Molnár Zsombor

Kalcium-karbonát polimorfok heterogén nukleációja

című PhD értekezéséről

Németh Tibor

Bírálatomat a Pannon Egyetem doktori szabályzatának ajánlása alapján, azonban annak nem minden pontjára külön reagálva készítettem el.

Az értekezés műhelyvitáján is én voltam az egyik bíráló. A dolgozat már abban a fázisában is kiváló színvonalú volt. Akkor felhívtam a figyelmet néhány hiányosságra, kisebb hibára. Ezeket a Jelölt konkrétan vagy érezhetően megfontolta. Előre vetítem, hogy az értekezés nem veszített kiváló színvonalából.

Geológiai jelentőségüknek köszönhetően a karbonátok képződését régóta különös érdeklődés övezi. Molnár Zsombor és témavezetője remek érzékkel – tudással – ismerték fel a hiányt az ismeretekben. A Jelölt összetett rendszerekben vizsgálja a Ca-Mg-karbonátok képződési folyamatát és adja meg a létrejövő fázisok minden fontos részletre kiterjedő ásványtani jellemzését. A téma nagyon egyszerűnek tűnő, mégis teljesen újszerű megközelítése ad teret annak, hogy olyan kérdéseket érint, amelyek régóta vita tárgyát képezik a geológusok körében: Hogyan képződik a dolomit? Miért aragonit válik ki? Vagy a Mg-kalcit és az amorf CaCO_3 kérdésköre. A tudományos érdeklődés széleskörű, az eredményeket felhasználják többek között geológusok, paleontológusok, limnológusok, környezettudósok. A téma társadalmi jelentőségét sem kell ebben a körben magyarázni. Ha úgy van publikálva, hogy a feltárt folyamatok miképp befolyásolják a Balaton vízminőségét, akkor a fél ország felkapja rá a fejét.

A cím világosan körülírja, lefedi a témát, bár tágabb, mint amiről szó van. Javasoltam a szűkítését a Mg-, foszfát-, és szmektit szerepének megjelenítésével.

A három nyelven is elkészített absztrakt nagyon jól sikerült. Minden lényeges információt, eredményt tartalmaz. Az angol és a francia nyelvű kicsit máshova helyezi a hangsúlyt az eredmények közlésében, mint a magyar, ami mögött azt a szándékot érzem, hogy az idegen nyelvű kivonat inkább szakembereknek szól, míg a magyar kicsit a laikusoknak is.

A dolgozat egyértelműen épít a tudományos előzményekre, amely nagyrészt a Pannon Egyetem korábbi balatoni üledékképződéssel kapcsolatos kutatásait jelenti, egészen Fodor és mtsai (2020) szmektit delaminációra vonatkozó molekuladinamikai számításáig. Nemcsak ebbe, hanem a téma nemzetközi tudományos vonalába is jól illeszkedik a munka. A Jelölt világosan elhelyezi munkáját a tudományos palettán, és az eredmények jól illeszkednek a témában megjelent publikációk sorába. Valamiért a Jelölt ragaszkodik hozzá, hogy konkrét célkitűzéseit, tudományos kérdéseit és a Balatonra vonatkozó kutatási előzményeket a 6., kísérleteket és a módszereket tárgyaló fejezetében tárja elénk a 46. oldaltól kezdve.

Az irodalmi összefoglalás remek, a kristályosodásra, kalcit-dolomit, aragonit ásványtanára vonatkozó részeit az óráimon is szívesen használnám. A 150 hivatkozott irodalom szinte

mindegyike abszolút érdemi, kritikusan kezeli és használja is azokat a saját kutatásában. Az ábrák hasznosak és gyönyörűek. Egyedül a szmektitesszel voltak problémáim. Ezt az ismeretlen forrású megállapítást például szívesen megérteném (28. oldal): „A szmektit ásványokban a rétegtöltés kationok nem kompenzálják a rétegtöltést teljes mértékben, emiatt az egyes ásványszemcsék heterogén eloszlású (elsősorban a peremi részeken jelentkező) töltéstöbblettel rendelkeznek.” Apróság, de nem megszokott az „[IL] tér” kifejezést írni a magyarban bevett szakkifejezések: rétegtöltés vagy interlamináris helyett. Egyébként ez az [IL] nem szerepel a rövidítések listájában, csak egy ábraaláírásban fejt ki a szerző.

Számomra a dolgozat egyik leginkább tetsző aspektusa, hogy nagyon egyszerű kísérletek eredményeit mérte meg a legkorszerűbb elérhető technikával. Persze ezeknek az egyszerű kísérleteknek jól megtervezettnek és precízen kivitelezettnek kell lenniük, hogy belőlük helyesen értelmezhető eredmények szülessenek. Nagyon hasznosak a kísérleteket összefoglaló táblázatok, megkönnyítik a tájékozódást a 30(!) elvégzett kísérlet típus között. Kísérletei jól modellezik a természetes ásványkiválási folyamatokat, még hogyha lehetetlen is pont olyan körülményeket összeállítani. A nagyobb koncentrációk használatának például mérő technikai oka volt. A rendkívül szemléletes ábrák segítségével az olvasó szinte a laborban érzi magát, a közölt adatoknak köszönhetően pedig bármikor rekonstruálhatók a kísérletek. A Jelölt tudományos gondolkodását és érdeklődését jól mutatja, hogy amikor váratlan, kérdéses eredményt kap, akkor újabb kísérletekkel, módosított párhuzamos kísérlettel körbejárja a kérdést. Ugyanezt az érett kutatói hozzáállást tükrözi az is, hogy kísérleti eredményeit például stabilitás ill. adszorpció számítással támasztja alá.

A kísérletekben felhasznált szmektit TEM és XRD alapú részletes ásványtani vizsgálata nélkülözhetetlen az eredmények értelmezéséhez. Vizsgálatai alapján kiderült, hogy az általa használt szmektit nagyon hasonlít a sztenderd agyagásványként forgalomban lévő SWy-2 montmorillonit-hoz. Véleményem szerint egy TEM-EDS kémiai elemzéseken alapuló szerkezeti képlet hasznosabb lett volna, mint az elemarányok bemutatása. A szmektit töltésviszonyainak ismerete előrébb vinne az értelmezésben. Tudom, hogy a Jelölt szeretett volna kationcserélő képességet (CEC) mérni a szmektiten, de végül erre nem került sor. Az SWy-2 montmorillonit, kis rétegtöltésű, uralkodóan oktaéderes töltésű szmektit. Kationcserélő képességére és rétegtöltésére lehet adatot találni az irodalomban. Általam Ba-ioncserés módszerrel meghatározott CEC 76,5 cmol/kg, alkilaminos módszerrel meghatározott átlagos rétegtöltése 0,305 (minimum 0,25, max 0,36) Si_4O_{10} -re. A Green-Kelly teszt alapján a rétegtöltése kizárólag oktaéderes helyettesítésből származik. A rétegtöltés Na^+ dominanciája lényeges, mert az könnyen lecserélhető a kísérletekben jelen lévő kétértékű kationokkal.

A kapott eredmények értékelése minden esetben körültekintő, korrekt. Az értelmezés is példaértékű, logikusan szintetizálja saját megfigyeléseit, de az értelmezéshez érdemben és kritikusan használja mások publikált eredményeit is. Olyan szinten alapos és logikus a diszkusszió, hogy bírálóként nem tudok megkérdőjelezni semmit.

Nagyon sok igényesen kivitelezett, a megértést segítő ábra illusztrálja a nem kevésbé igényesen, szépen, világosan írt szöveget. Amellyel egyedüli baj, hogy sok munkát ad a bírálónak. Talán nem mindenhol indokolt a legapróbb részletekbe belemenni.

Mindössze **négy tézisben** fogalmazza meg eredményeit, ezek mindegyike kivétel nélkül nagyon átütő, és nem utolsó sorban választ ad a célkitűzésben feltett kérdésekre. A tézisek világosan megfogalmazottak, megalapozottak, egyértelműen kiemelkedő jelentőségű új tudományos eredmények, rangos lapokban publikálhatók, ahogy már meg is kezdte a publikálásukat.

Összességében ez egy nagyon sok munkával elért, kiváló dolgozat. Különösen imponáló az oldatkísérletek és a magas fokú TEM vizsgálatok ötvözése és a diszkusszió tudományos színvonala. Az értekezés elfogadását **summa cum laude** minősítéssel javaslom.

Csupán tudományos érdeklődésből felmerült bennem három kérdés, amelyről örülnék, ha a Jelölt elmondaná a véleményét (legalább kettő választottról).

Kérdések:

Laborban igen, de édesvízi tóban ritkán van Na-os szmektit. Vajon hogyan befolyásolhatja a karbonátkiválást, ha eleve Ca-szmektit van jelen?

Hogyan játszanak szerepet a Ca^{2+} kationhidak a P-adszorpció kapacitásában és ezt mivel látja alátámasztottnak?

Eredményei hogyan változtatják meg ismereteinket (ha van ilyen érdemben) a márga képződésének ásványtani aspektusairól?



Németh Tibor

Pécs, 2023. április 26.