

Bírálat

Sarkadi Zsófia Judit „Nanopórusok szelektivitásának és egyenirányításának vizsgálata a skálázhatóság jelenségén keresztül” című PhD értekezéséről

Zsófia dolgozata számomra nem ismeretlen, mivel az elővédésre készített munkájának is bírálója lehettem. Ez egyrészt megkönnyítette a munkámat, mivel mint minden bírálónak, nekem is bizonyos dolgokra jobban rááll a szemem, így az általam könnyebben észrevehető tartalmi és formai hibákat már a múltkor megtaláltam. Most megpróbáltam új szemmel átolvasni az értekezést. Vagy azért, mert nem sikerült kibújni a saját értékelési stílusomból, vagy azért, mert Zsófia az előbírálati véleményeket, a társbírálóét is figyelembe vette a végső verzióban, kifejezetten kevés formai és nagyon kevés szakmai kérdés merült fel most bennem.

A doktori iskola előírásokat tartalmaz a bírálatra, bizonyos témákat kötelező érinteni:

Az első ilyen témakör a dolgozatban leírt kutatás elhelyezése a területen folyó munkákkal összehasonlítva. Zsófia munkája teljesen kielégíti mind témaválasztásában, mind a kutatáshoz használt módszerek tekintetében az elvárásokat. Mi sem mutathatja ezt jobban, mint a dolgozat alapjául szolgáló közlemények, amelyek közül 4 a szakterület kiemelkedően jó újságjaiban jelent meg, és háromnál a jelölt első szerző. Ez a szakterületi kontrol messze objektívabb és nagyobb szakmai konszenzuson alapul, mint bármilyen személyes véleményem lehetne.

Az értekezésben bemutatott kutatás szorosan kapcsolódik a kutatócsoportban évek óta folyó munkához. Érdekesége, hogy a kutatócsoport ebben a témában az összetettebb rendszerekkel kezdte és az átláthatóbb, egyszerűbb modellek vizsgálatára később került sor, Zsófia munkája ez utóbbiak voltak. A dolgozat felépítése viszont fordított irányú, a kutatások, eredmények és azok diszkussziója az egyszerűbbtől az összetettebb felé halad, esetlegesen ellentétesen azok időrendjével.

A dolgozat tagolása, szerkesztése, a fogalmazás, a szöveg követhetősége és a tudományos kommunikáció szabályainak követése szinte 100%-ban megfelel az elvárásoknak. A dolgozat hossza optimális. Némi átfedés van a függelék és a fő rész között, de így a függelék könnyebben érthető. A biztonság kedvéért, most elkértem a bekötött példányt a nyomtatáshoz, nehogy úgy járjak, mint az előbírálatkor, amikor egy fonthiányos nyomtatás miatt az ábrák egy része hibás lett. Az előbírálatban az ezekre vonatkozó téves megjegyzéseimért még egyszer elnézést kérek.

A dolgozat felosztása jó, a kötelezően elvárt részek mindegyike tartalmilag szerepel. Sajátosság, hogy klasszikus önálló irodalmi áttekintés nincs benne. A kutatás aktualitásának tárgyalása illetve a lehetséges ipari nanopórusok bemutatása a bevezetésben található, a módszerekkel kapcsolatos irodalmi rövid áttekintés a megfelelő referenciákkal pedig a 2-4. fejezetekbe került. Mivel az elmúlt években nem követtem minden részletében a csoport munkáját, emiatt örültem volna egy az ioncsatornák kutatására vonatkozó részletesebb irodalmi áttekintésnek, ahol ez a munka részletesebben lett volna elhelyezve a nemzetközi és a csoportban végzett kutatások alapján. Mindezek ellenére a nagy számú hivatkozás alapján semmiképpen se állíthatom, hogy hiányozna az irodalmi összefoglalás, csak valamennyire összekeveredik a modellek és módszerek leírásával.

A dolgozattal kapcsolatban két olyan kérdésem, pontosabban kérdéskör merült fel bennem, amelyek több helyen is kapcsolódnak a dolgozathoz.

- 1) A diffúziós állandók kérdése. Először a 39. oldalon szerepel, hogy az anion és a kation állandója egyformának van tekintve, de szerintem ez itt még nincs figyelembevéve a levezetésekénél, csak a 6.21. egyenletnél két oldallal később. Az általam megtalált adatok szerint a leggyakoribb alkáli-halogenid ionpároknál is elnagyolt ez a közelítés. Az egyenlő diffúziós állandót feltételező

skálaparaméterek validálása megfelelően történik a dolgozatban az ott levő számolások függvényében, ugyanakkor a gyakorlati alkalmazások esetében ez a közelítés gondot okozhat. Tudom, még két paraméter vagy az arányuk megjelenne ebben a sokváltozós keresgélésben, de jó lett volna ezt részletesebben tárgyalni. Mi erről a véleménye a jelöltnek? Ugyanígy több részletre is kíváncsi lettem volna a D/10-es közelítéssel kapcsolatban, pl. befolyásolja-e ezt a felületi és a térfogati vezetés aránya. Esetleg olyan mértékben, hogy az egyik vezetésből a másik vezetésbe átmenő, akár egy ábrán szereplő példasorozatoknál ezt is figyelembe kellett volna venni?

- 2) A másik kérdésem is részben a modell és a valóság kapcsolatára vonatkozik. Az NP+LEMC modellek esetében multivalens ionoknál megjelenik a töltésinverzió, míg a PNP modelleknél ez elmarad a korrelációkat nem tartalmazó átlagtér jelleg miatt. Az LEMC szimulációk azonban szintén nagyon egyszerűek, implicit „vízmodellt” tartalmaznak, azt is távolságfüggetlen dielektromos állandóval. Felmerül, hogy egy a polarizációt jól leíró explicit vízmodell esetén milyen méretű lenne ez a töltésinverzió. Nem lehet, hogy egy explicit modellel jóval kisebb lenne az inverzió, akár úgy, hogy a skálaparaméterek valamelyike még itt is monoton függést mutatna a válaszfüggvényre? Explicit modellek talán pontosabban tudják leírni a töltések vízmolekulákkal történő árnyékolását. Nincsenek erre számolások az irodalomban? Itt nem csak ioncsatornákkal, hanem akár tetszőleges határfelületi kettős rétegekkel kapcsolatos eredményekre gondolok. A fentiek alapján lehet, hogy árnyaltam volna több állítást, pl. a 45. oldal 2. bekezdésében a PB elmélet alkalmazhatóságát.

Van három kisebb kérdésem/megjegyzésem a dolgozattal kapcsolatban, ezek néha csak formaiak:

10. oldal 2. bekezdés: Sose értem, hogy a kálium miért marad ki a fontos ionok felsorolásából. A talán legfontosabb ioncsatorna a nátrium/kálium pumpa, ahol mindkét ion részt vesz a csatorna által mediált átvitelben.

11. oldal 1.2(a) ábra diszkussziója: A 10^3 kW/m^2 teljesítmény nem elírás?

21-22. oldal: A 2.4-es és a 2.5-ös egyenletekből nem hiányzik az abszolútérték jelölés? A korábbi definíciók alapján nekem ez gyanús, de nem tudtam teljes egészében visszafejteni az egyenleteket és a feltételezéseket.

Sarkadi Zsófia az elért eredményeit tézispontszerűen az értekezés végén foglalta össze. Mind az öt tézispontot teljes terjedelmében elfogadom, az azokban leírtakat új tudományos eredménynek tekintem. A pontok tartalma teljes összhangban van a dolgozatban kifejtett és a nemzetközi publikációkban megjelenített eredményekkel. A bírálendő dolgozathoz csatolt téziszfüzet kb. három és fél oldalas bevezetőt tartalmaz, ami jó összefoglalása a kutatás céljainak és eszközeinek. Ezt követik a dolgozat végén található tézispontok. Az angol téziszfüzet jól fogalmazott fordítása a magyar változatnak.

Összefoglalva: Véleményem szerint Sarkadi Zsófia dolgozata nívós, nemzetközi szintű kutatásokon alapul. Az értekezés az elért eredményeket pontosan, jól értelmezve mutatja be szerkesztési és nyelvtani szempontból szinte hibátlan formában. Az elért eredmények tézispontszerű összefoglalása megfelelő. A dolgozatot elfogadásra javaslom.

Budapest, 2024. január 15.



Tóth Gergely

PhD, egyetemi docens

ELTE Kémiai Intézet