

Opponensi bírálat

Nagy Gábor

„Szilárd/folyadék határfelületek elméleti leírása, kísérleti vizsgálata és gyakorlati szerepe”

című értekezéséről, melyet az MTA Doktora cím elnyeréséért nyújtott be

Amint az értekezés hosszú címéből sejthető a jelölt érdeklődési területe igen tág. Munkája az elektrokémiai alapkutatásból indul, figyelme később az atomerőművi korróziós problémák elektrokémiai és más módszerekkel való vizsgálata felé fordul, majd e korróziós folyamatok vegyészmérnöki vonatkozásaival, a korróziós termékeknek az erőművi berendezésekben való szétterjedésének modellezésével és a korrózió mérésére szolgáló elektródok kísérleti vizsgálatával zárul. Ez a tág érdeklődési spektrum, az elmélyülés ennyiféle témában a jelölt kutatói alkalmasságának feltétlen bizonyítéka. Ugyanakkor az értekezés olvasóját nehéz feladat elé állítja. A szabatos fogalmazás ellenére is a munka értékeléséhez az eredeti közlemények jelentős részét tanulmányozni kell, mivel az azokban foglalt részletekre, melyek a tudományos értékeléshez szükségesek, gyakran csak rövid utalások találhatók az értekezésben. Általában elmondható, hogy ha az olvasó előbb a cikkeket olvassa és utána az értekezést, akkor az értekezés egy jól megírt összefoglalónak tűnik. Fordított olvasási sorrend esetén viszont az olvasónak nagyon gyakran az az érzése, hogy a kapott információ kevés a megértéshez.

Az általam nagyra értékelt munkához az alábbiakban számos apró kérdést, megjegyzést teszek, melyekre a jelölt választ várom.

11. old.

2.1.2.2. képlethez: vákuumban mekkora az alagútáram? A képlet nem egyenlőség, csak arányosságokat jelez.

12. old.

2.1.3.1.1. ábra jelölései a szöveges magyarázattól eltérőek.

14-15. old.

2.1.3.2.1 és 2. ábrák nem elég jól láthatóak, a szövegbeli magyarázat nem követhető rajtuk. A potenciálskála hiányzik.

13. old. utolsó bek.

Azt írja, hogy a tömbfázisok közti potenciálkülönbség „gyakorlatilag nem függ a hibahelyek jelenlététől”. Nem kell ennek elméletileg is így lennie?

A 2.1.3. fejezethez kapcsolódó JEAC 433-153 közlemény szerint a Pt és O atomok közti kölcsönhatás az O atomot a Pt tetejére nyomja (pushes on top of the Pt atom). A vízmolekulák a platinán „on-top” pozíciókban vannak. Ez az állítás feltehetően sík platina felületre vonatkozik. Érvényes marad ez a hibahelyek vizsgálatánál is?

17. old.

Itt a szerző azt írja, hogy „találhatók olyan molekulapárok is, melyeknek pozitív az összehengeriájuk. ...ezt a stabil de kedvezőtlen energiájú konfigurációt, ...” Mit értett ezen (pozitív de stabil)? És mit ért egy vízmolekula-pár összehengeriáján?

18. old.

A víz oxigénatomjainak sűrűségprofilja a felület közelében maximumot mutat. Ezért adszorbeált vírzétegről beszél a szerző. Hogyan definiálja a vizsgált rendszerekben az adszorpció fogalmát?

2.1.4.1.1. ábra: A sűrűség dimenzójában a kitevő helyenként hiányzik (feltehetően nyomtatási vagy másolási hiba).

19. old. A vízmolekulák orientációjának leírása illetve annak indoklása nem elég világos. Talán egy ábra segítené a megértésben. A χ potenciál a szén felületen nulla. Miért? A szénnel való kölcsönhatások elektromos részével nem foglalkozott? A Pt-víz rendszerben a Pt atomrácsához képest is nézte a víz elhelyezkedését. A C-víz rendszerben miért nem foglalkozott ezzel a kérdéssel?

A 2.1.4.2.1. ábra (valamint a 2.1.4.3.1. és 2.1.4.3.4.) léptéke Angströmben lenne helyes nm helyett.

20. old.

A vízmolekulák dipólus illetve OH vektorának a felület normálisához viszonyított állását az egyes bezárt szögek cosinusának eloszlásával jellemzi. A külön-külön jellemzés elvileg nem helyes, mert az eloszlások általában nem függetlenek és ezért belőlük az együttes eloszlásra nem lehet következtetni.

Megjegyzendő azonban, hogy ez a probléma a jelölt cikkeinek megírása idején még nem volt tisztázva a szakirodalomban.

21. old.

Hogyan számította a relatív permittivitást a szimulációs eredményekből?

22. old.

A szobahőfok feletti számításoknál a nyomás mekkora volt?

25-26. old.

A Pt felület különböző típusú részein számított alagutazási valószínűségek átlagolása hogy történt? A kísérlet mi volt és mennyire jogos a számítások átlagával vetni össze? Miért nem csökken az alagutazás valószínűsége 0,2 és 0,4 nm között? (A valószínűség a távolság növelésével vákuumban nem csökken?)

31. old.

A 2.2.3.1. (és a 2.2.3.2.) ábrán az STM ábrák (A,B, stb.) beazonosítása hiányzik, emiatt a leírás nem igazán követhető. Az egyes STM ábrák léptékeinek jelentős különbségére sem hívta fel a figyelmet.

A 2.1 és 2.2 fejezetben a vezető szilárd anyag feletti folyadékrétegben a felületre merőlegesen, egy dimenzióban számítja az elektromos potenciált, majd az alagutazás valószínűségét az így kapott potenciálgátból számítja. Bár a 34. oldalon megjegyzi, hogy ez az egydimenziós eljárás nagyon közelítő jellegű, felvetődik, hogy nem túl nagy elhanyagolásokról van-e itt szó?

33. old. közepén

„2.1.2.1. egyenlet alapján” – itt 2.1.2.2. lenne helyes

„A potenciálgát konstans értéket vesz fel”. Mit jelent ez? Az ábra szerint Φ konstans. Akkor mit ért gáton?

35. old. ábrái

Az STM tű a rézzel borított arany felületen (ld. Ábra) miért tud az arany felszínig ($\Delta s=0$) eljutni?

37. old. közepe

„sötétebb” és „világosabb” – a színskála jelentése hiányzik.

38. old. A 2.2 fejezet összefoglalása

A „kettősréteg” kifejezés sokadszor fordul elő, az elektrokémiában használatostól eltérő értelemben (és magyarázat nélkül).

A 2.4.3.1. ábrán bemutatott rétegvastagság-idő függés adatai erősen szórnak. Így a rájuk illesztett köbgyökös időfüggvény nem tekinthető precíznek. Ezért felvetődik a kérdés, hogy a gyakorlatban szükség van-e a kapott összefüggés extrapolálására az ábrán bemutatott 250 napos időtartamon túl is. (A Zr-Nb ötvözetet hosszabb ideig használják?)

A 2.4.3.2.1. ábrán nincs feltüntetve, hogy melyik jelölés vonatkozik az impedanciára illetve a fázisszögre.

A 2.4.3.2.1. ábrán bemutatott Bode diagramok helyettesítő áramkörének helyességét mi bizonyítja?

A 2.4.3.2.2. ábrán bizonyos időpontoknál jelentős eltérések vannak az adatsorok fő trendjétől (pl. a bal oldalon 35 nap körül illetve a jobb oldalon 23, 43 és 83 nap táján), és ezek nem tűnnek zajnak. Mi okozhatta ezeket?

Mi lehet az 54-55 oldalon említett kétféle töltéshordozó az oxidrétegben?

A 2.4.3.3.1. ábrán honnan lehet tudni, hogy a bejelölt szakaszon tényleg ZrO_2 az összetétel? Az ábrán egyébként az $\alpha-ZrO_x$ helyett $\alpha-ZrO$ szerepel.

A 2.4.4.1.1. ábrán a görbék színezése nem felel meg a jelölésnek (pl. nincs piros görbe).

A 63. oldalon levő 2.4.2.2. táblázatra a szöveg 2.4.4.1.2. táblázatként hivatkozik (utóbbi tűnik helyesnek).

A 2.4.4.2.1. táblázat első oszlopában helyes lett volna feltüntetni, hogy itt oxidált mintáról van szó.

68. old.

A 2.4.5. fejezet bevezetésében a szerző nem magyarázza el, hogy az acélok levegőn kialakuló oxid bevonatát miért csiszolt mintákon (az oxidréteggel a csiszolásnál mi történt?), illetve miért kénsavban (mi köze ennek a közegnek a reaktorhoz?) vizsgálta.

72. old. alulról második bekezdés

Hivatkozás a 6.5.2.1. ábrára a 2.4.5.2.1. helyett téves.

A 3.1. fejezet (felületi akkumulációs számítások) nehezen követhető az atomreaktor működését közelről nem ismerő olvasónak. A vizsgált rendszert bemutató 3.1.2.1. blokkdiagram sem elég informatív. A fejezet tudományos szempontból nehezen értékelhető, bár a gyakorlat számára bizonyára fontos. Önmagában az anyagmérlegek felállítása és a megoszlási hányadosok kiszámítása nem tűnik tudományos újdonságnak. Az adatok nem is győznek meg arról, hogy ebben a bonyolult rendszerben a megoszlási hányados jogosan alkalmazható. A 83. oldalon található megjegyzés, miszerint „K értéke függ a vizes fázis térfogatának, valamint a szerkezeti anyagok és fűtőelem kazetták felületének nagyságától is”, véleményem szerint vagy félreértés, vagy épp azt jelzi, hogy a megoszlási hányados ebben a rendszerben nem alkalmazható.

A 3.1.3.3.1. és a 3.1.3.3.2. táblázatok fejlécében több mértékegység is feltehetően hibás, így K dimenziója a 3.1.3.3.6. képlet alapján nem lehet M, m_s dimenziójának G jelölése pedig valószínűleg elírás.

A 3.2. fejezet (korróziótermékek primer körüli transzportja) nehezen követhető az atomerőművi berendezések pontos ismerete nélkül. A jelölt itt a korróziótermékek keletkezési és lerakódási anyagmérlegeinek leírása céljából felállította az erőmű primer körének egyszerűsített modelljét, majd az erőműből kapott adatokat statisztikailag elemezte e modell segítségével. Úgy tűnik, hogy maguk a statisztikai számítások nem jelentettek újdonságot a statisztika tudományában, inkább a modellalkotás, az ésszerű szakmai egyszerűsítések voltak fontosak. A kapott eredmények a várakozásoknak meg is feleltek.

A 3.2.1.1. táblázat nem világos. Például az első és a harmadik adatsor körülményei közti különbség bővebb magyarázatot kíván. Nem világos továbbá, hogy Pakson hogyan kaphattak BWR-re vonatkozó eredményeket (ötödik adatsor).

A 3.2.2.1. ábrán a szaggatott vonalak mit jelentenek? Mi ugyanitt a TV75 jelölés feletti nyíl jelentése? A később c_g illetve c_m jellel megadott koncentrációkat a TV20 illetve a TV61 helyeken mérték?

A 3.2.3.2. fejezet elején a modell leírása nem elég világos. Mi indokolta azt a feltételezést, hogy a szűrési hatások időtől és koncentrációtól független állandók? Ha a mellékáramkörben van lerakódás, akkor miért csak a zónában halmozódnak fel a korróziós termékek hosszú idő után? Ha a gőzfejlesztő a forrás, akkor miért csökken idővel c_g nulla felé?

Ha figyelembe vesszük az összes egyszerűsítő feltételt mire eljutott a 3.2.3.2.1. ábrán látható konkrét eredményekig (vagyis hogy a korróziós termékek a gőzfejlesztőben keletkeznek és az onnan kijövő, mért mennyiségük teljes egészében lerakódik a zónában), akkor miért volt szükség a 92. oldali differenciálegyenletek felállítására és megoldására? Az egyszerűsítő feltételek alkalmazásával az eredmény enélkül is kijött volna.

A 3.3. fejezet (referencia elektródok vizsgálata) irodalmi áttekintése nehezen követhető megfelelő vezérfonal és ábrák hiányában. A termikus stabilitás tekintetében érdemes lett volna külön foglalkozni az elektródok szilárd részének illetve elektrolitjának stabilitási problémáival. A 98. oldal közepére jutva az olvasó nagyon meglepődik, amikor kiderül, hogy az addig részletesen tárgyalt elektródok a bevezetőben jelzett atomerőművi alkalmazásra eleve nem alkalmasak. A szerzőnek itt meg kellett volna jegyeznie, hogy ő nem az atomerőműben való közvetlen alkalmazás miatt foglalkozik velük, hanem a laboratóriumban végzendő vizsgálatokhoz veszi számításba őket összehasonlító eszközként. A 3.3. fejezetben leírt eredmények egyébként érdekesek. A jelölt helyhiány miatt sok esetben csak hivatkozik a közleményeire, melyek azonban magas színvonalú kutatásokról tanúskodnak.

Összefoglalva:

Az értekezés döntő többségében magas színvonalú, elmélyült kutatómunka eredményeit mutatja be. Az elvégzett kutatások volumene akkora, hogy számos érdekes témáról csak nagyon röviden, a megjelent közleményekre való hivatkozással olvashatunk az értekezésben. Ez az olvasót természetesen nehéz feladat elé állítja, de végül is kiváló, hogy a pályázó tudományos munkája, annak eredményei megfelelnek a az MTA doktora cím odaítélése kapcsán támasztott követelményeknek.

Az értekezést nyilvános védésre javaslom.

Horvai György