

Válasz Dr. Bakó Imre bírálataira

Először is nagyon köszönöm bírálóm gyors munkáját és észrevételeit.

A logikai ugrások valószínűleg elkerülhetetlenek, legfeljebb másik szerző egy másfajta logikai ív mentén írta volna meg a dolgozatot, és így máshol lettek volna a logikai ugrások.

A könyv alakban való megjelentetés jó móka lenne, de attól félek, nem sok vevőt vonzana, és így ráfizetéses üzlet lenne a kiadónak.

Bírálóm megemlíti Liszi János professzor nevét, mint aki ezt a munkát úgymond „elkezdte”. Ha már neveket említünk, hadd ragadjam meg az alkalmat, hogy további három tanítómesterem nevét közkinccsé tegyem: Szegeden Papp György, Veszprémében Szalai István, míg külföldön Douglas Henderson voltak nagy hatással szakmai fejlődéseimre.

Bírálóm kérdéseire a következő válaszokat adom.

- Milyen esetekben okozhat problémát a víz implicit módon való figyelembe vétele?
Alapvetően minden olyan esetben, amikor a vízmolekulákkal való közvetlen kölcsönhatás figyelembe vétele szükséges a jelenség reprodukálása szempontjából. Akkor okozhat pl. problémát, ha az ioncsatornába az ionokat bevonzó elektrosztatikus potenciálvölgy nem olyan mély, mint pl. a kalciumcsatorna esetében. Tipikus példa a káliumcsatorna, ahol a szelektív szűrőben lévő kationok a polipeptid lánc poláros karbonil oxigénjeivel lépnek kölcsönhatásba, ami gyengébb, mint a töltött csoportokkal való kölcsönhatás. A K^+ vs. Na^+ szelektivitást ekkor a dehidratációs energiaveszteség és a fehérjével valamint a szűrőben lévő vízmolekulákkal való kölcsönhatási energia közötti érzékeny egyensúly szabályozza. Világos, hogy ebben az esetben finomabb felbontású modellel kell dolgozni, és az általunk használt redukált modellek bevallottan nem elégségesek.
- A 60-80 relatív dielektromos állandót a csatornában bírálóm, ha jól értem, sokallja, mivel a szűk térfogat és más perturbáló tényezők megzavarják a víz hidrogénhidas szerkezetét. Másik bírálóm keveselli, én a magam részéről egy modellparaméternek tartom, aminek a hatását a konkrét eredmények alapján vizsgálhatjuk. Számításaim mindamellett azt mutatták, hogy 40-es érték alatt a szimulációk nehezen konvergáltak, mivel a szűrőben lévő ionok hajlamosak voltak a befagyásra.
- A Coulomb-kölcsönhatások kis hőmérsékleten relatíve erősödnek a hőmozgáshoz képest, tehát ki kellett volna hangsúlyozni, hogy a U/kT arány lesz nagyobb.

- Magunk is értetlenül állunk az előtt, hogy a nagy kationokra (K^+ , Cs^+) az II+IW modell ilyen rosszul működik. Magyarázatot nem találtunk, jómagam arra gondolok, hogy az II és az IW tagban megjelenő hibák egymás hatását erősítik ebben az esetben. A nagyobb ion hidrogénhidas szerkezetre gyakorolt hatása bizonyára szerepet játszik, de ez egyértelműen túl van a modell határain.
- A Na^+ és a Ca^{2+} rendszerek között a lényeges szerkezeti különbség az, hogy a Ca^{2+} ionhoz kettő Cl^- ion járul, ami változatosabb ion-korrelációkra ad lehetőséget. Ha egy Cl^- ion pl. már a Ca^{2+} ion közelében tartózkodik, egy másik már kisebb valószínűséggel megy a közelébe. Az sem mindegy, hogy milyen irányból közelít. Ezeknek a konfigurációknak a feltérképezéséhez a szimuláció az ideális eszköz; nem csoda, hogy az átlagtér (*mean field*) elméletek rossz eredményeket adnak 2:1 elektrolitokra.
- Ugyanerre az okra vezethető vissza az, hogy az átlagtér elméletek nem működnek a kettősréteg PZC potenciáljára (az elektródpotenciál zérus elektródtöltés mellett) 2:1 elektrolitok esetén. Fontos megjegyezni, hogy az ion-korrelációkat figyelembe vevő statisztikus mechanikai elméletek (Gillespie sűrűségfüggvény elmélete, vagy diCaprio térelméleti megközelítése) viszont jól működnek.
- A módszer (gondolom a CSC mechanizmusra gondol a bíráló) korlátai ott vannak, ahol már nem az ionok és a töltött csoportok közötti elektrosztatikus vonzásnak és a merevgömbi taszításnak a versengése határozza meg a szelektivitást. A fent említett káliumcsatorna már egyértelműen túl van ezen a határon. Az is egy egyértelmű határ, hogy – egyensúlyi szimulációkról lévén szó – csak az egyensúlytól nem túl távol lehet belőle a transzportra következtetéseket levonni. Emiatt is fordult érdeklődésünk mostanában a nem-egyensúlyi rendszerek szimulációs vizsgálatának irányába.

Végezetül még egyszer szeretném megköszönni a bírálatot és a kérdéseket.

Veszprém, 2013.02.18.

Boda Dezső