

Válasz Dr. Baranyai András bírálataira

Először is nagyon köszönöm bírálóm alapos és gyors munkáját.

A szöveg valóban nagyon tömény, ezért is igyekeztem személyes megjegyzésekkel feldobni. Az a pár ember, aki elolvassa, legalább szórakozzon egy kicsit.

Valóban lehetett volna rövidebbé tenni a dolgozatot, ha a végső modellekre koncentrálok és az előzményeket kihagyom. Úgy éreztem viszont, hogy az MTA-doktori valamiféleképpen arról szól, hogy a jelölt számot ad tudományos tevékenységéről illetve tudományos gondolkodásmódjáról. Ehhez viszont hozzátartozik a modellalkotás folyamatának és logikájának bemutatása.

Ez átvezet minket az általam alkalmazott „primitív” avagy redukált modellek használatához, ahol a rendszer különböző, kevésbé fontosnak ítélt szabadsági fokait implicit formában, egy dielektromos kontinuumként vesszük figyelembe. Motivációnk valóban az volt, hogy olyan, kevés paraméterrel rendelkező modelleket alkossunk meg, amelyek a vizsgált jelenséget legalább kvalitatív módon reprodukálni tudják, majd a modellparaméterek változtatásával válaszokat kapjunk olyan kérdésekre, mint hogy milyen hatással vannak ezek a paraméterek a szelektivitási és egyéb jelenségekre.

Az én olvasatomban a dielektromos együtttható is csak egy ilyen illeszthető modellparaméter, aminek csak annyi köze van a makroszkopikus dielektromos állandóhoz, hogy ugyanazok a fizikai törvények (elektrosztatika anyagban) állnak mögötte, de egyébként inkább egy lokális, a rendszer polarizálhatóságára az adott helyen jellemző paraméter. Valóban szokatlan dolog ez, ha a fejünkben a makroszkopikus dielektromos állandó jár. Az elektrosztatika azonban mikroszkopikus szinten is érvényes, és joggal feltételezhető, hogy ha a rendszer egy résztérfogatát a külső elektromos térre adott polarizációs válasza alapján helyettesítjük egy kontinuummal, akkor ez a lokális paraméter értelmes fizikai jelentéssel bír.

Közvetlen kísérletet a lokális dielektromos együttthatók meghatározására éppen ezért nem tudok elképzelni: ezek a paraméterek ugyanis a modell részei, így leginkább csak a fejünkben léteznek. Közvetett kísérletet ugyanakkor el tudok képzelni, pontosan azt, amiről a dolgozatban szó van: meghatározzuk, hogy ezen paraméterek mely értéke mellett egyeznek meg a modell alapján számolt eredmények a kísérleti eredményekkel, pl. az ionsatornán át folyó árammal. Az egyezés persze még csak arról árulkodik, hogy az alapfelvetéseink nem teljesen légből kapottak; a modell egyszerűsítéseinek megalapozottsága atomi molekuláris dinamikai (MD) szimulációkkal való összevetésekből deríthető inkább ki.

Az a kérdés, hogy a hidratált ion körüli hidratburoknak az ionsugárhoz való hozzászámolása megállja-e helyét, attól függ, hogy milyen kontextusban beszélünk róla. Amikor az IW tagról van szó, tehát az ionnak a vízzel való kölcsönhatásáról, a Pauling-sugárnál nagyobb sugár használata megfelelő; ez a Born-sugár, és a dolgozatban ezen tag számolására éppen ezt a sugarat használtam. Kifogásom a hidratált ionsugár használata ellen abban az esetben van, amikor az II tag számításáról beszélünk. Itt ugyanis az ionok közötti kölcsönhatásoknak a többlet kémiai potenciálhoz hozzáadott járulékaról van szó; az abszolút értékben legnagyobb járulékot márpedig a kation-anion párok által adott energiák adják, amikor ezek az ionok közel vannak egymáshoz. Az alapkérdés éppen az, hogy milyen közel mehetnek ezek egymáshoz. Több, egymástól független MD szimuláció is azt sugallja (igaz, általában régi, nem-polarizálható erőterek alapján), hogy a kation és az anion igenis megközelítheti egymást a Pauling-sugaraknak megfelelő kontakt-távolságra. Hogy mekkora valószínűséggel teszik ezt, azaz mekkora az ionpár fennmaradásának (és ezzel összefüggésben a hidratburok fennmaradásának) ideje, az valóban további vizsgálatokat igényel; jómagam csak annyit állítok, hogy egy mesterséges, hidratált merevgömb-átmérő használatával ezt a lehetőséget nem szabad kizárnunk.

Modellezési filozófiánk lényege valóban az volna, hogy könnyű legyen szétválogatni a jelenségre döntő hatással lévő faktorokat éppen azért, hogy ezen faktorok száma kicsi. Amennyiben a túlegyszerűsített modell nem elégséges a vizsgált jelenség kvalitatív magyarázatára, akkor újabb faktorokat kell figyelembe venni, és komplexebbé tenni a modellt.

A rövidítések és jelölések jegyzéke valóban hiányzik, ezt sajnos elfelejtettem.

A publikációkban közölt ábrákra való hivatkozás azoknak szól, akik esetleg jobban el akarnak mélyedni az anyagban. Nem tagadhatom, ott bujkált a fejemben a gondolat, hogy úgy kellene megírni a dolgozatot, hogy egy TDK- vagy PhD-hallgatónak a kezébe lehessen nyomni. Ez sajnos a bírálóknak extra munkát eredményezett.

Végezetül még egyszer szeretném megköszönni a lényeglátó hozzászólásokat. Jövőbeli kutatási irányaim minden bizonnyal nagyobb mértékben fognak támaszkodni atomi szintű modellekre, amikre alapozva a redukált modellek is biztosabb lábakon fognak állni.

Veszprém, 2013.02.18.

Boda Dezső