

Bírálat

Boda Dezső az MTA doktori címéért beadott dolgozatáról

A dolgozat 215 számozott oldalból áll. Az előszó utáni 1. fejezet a modellek ismertetése, amely mind a kölcsönhatások leírását, mind a tanulmányozni kívánt geometriai elrendeződéseket ismerteti. A következő az energia számításával, a 3. pedig az alkalmazható szimulációs technikákkal foglalkozik. Mindhárom fejezetre érvényes, hogy a jelölt nemcsak irodalmi előzményeket ismertet, hanem általa levezetett vagy kidolgozott később felhasználandó elvi és módszertani ismereteket is közöl. Ezért ezek a részek is tartalmazzak eredményeket, amit az első hat tézispont mutat be.

A dolgozat a szerző 50 publikációjának az összefoglalása, ami rendkívül töményté teszi a szöveget. A töménységet fokozza, hogy a megoldandó problémák számos feltevést, megokolást, gondolati analízist tartalmazznak. Kicsit terjengős is amiatt, hogy a problémák megközelítési fázisainak fejlődését és az egész kutatási terület személyes kronológiáját is mutatja. Szerintem, bár szárazabb és szikárabb, de mindenképpen rövidebb lett volna a dolgozat, ha csak a végső, legjobbnak tartott modellt, számítást, levezetést közli. A fogalmazás ettől eltekintve olvasmányos, érdekessége, hogy személyes, egyéb szerzőkre történő hivatkozásokat, anekdotikus részleteket és megjegyzéseket is tartalmaz, ami egy konferencia előadás kevésbé formális szövegét idézi. (Két példa a sok közül: „Ellensúlyozandó a Chung-csoport véleményünk szerint káros tevékenységét ...” vagy „erre az egymás után hányt szavakból összetákolt angol kifejezésre...”.)

A következő 3 fejezet a számítási eredményeket ismerteti: tömbfázisú elektrolitokra; az elektromos kettősrétegre; és az ioncsatornákra. E három fejezet egyre nagyobb oldalszámra kiterjedően követi egymást, ami arra utalhat, hogy a végső cél a biokémiában fontos ioncsatornák vizsgálata. A korábbi fejezetek eredményei és módszertani megoldásai mintegy előkészítik ezt a fejezetet.

Az elméleti alapvetése a dolgozatnak az elektrosztatika alkalmazása a kölcsönhatási viszonyok leírására, amit a statisztikus mechanika Monte Carlo módszerével ötvöztet a szimulációs eljárással. A kölcsönhatási modell a hetvenes években bevezetett ún. Primitive Model (PM) megközelítést alkalmazza, azaz az ionok, falak merev entitások, amelyek töltést hordozhatnak és a közeg folytonos dielektrikum. A dielektromos állandók viszont változatos viszonyok között jelenhetnek meg a rendszer speciális, több közeget is magában foglaló geometriai felépítésének megfelelően. A jelölt láthatóan nagy rutinnal mozog ezen a területen. A Monte Carlo eljárások is speciálisak abból a szempontból, hogy az egyszerű tömbfázistól eltérő, elsődlegesen a kisméretű ioncsatornában elhelyezkedő ion kémiai potenciálját kívánja számítani, illetve egyensúlyba hozni a kapcsolódó tömbfázisbeli értékkel.

Egy a molekuláris részleteiben olyan finom jelenség, mint a kalcium, nátrium vagy az itt nem tárgyalt kálium ion sejtmembránon történő szelektív fluxusának a leírása – fontossága miatt – számos elméleti, modellezési kísérletet eredményezett. Nyilvánvaló, hogy amikor nyugvópontra jutnak az értelmezési kísérletek, a megelőző próbálkozások nagy része kidobódik. Mint olyan kutató, aki jelenleg éppen a molekuláris részletességgel is pontos modellek fejlesztésével foglalkozik, kerestem a motivációt a jelölt választásában a megközelítés PM jellegét illetően. Nyilván, a számítási igény csökkentett volta mellett, egyfajta „vegytisztá” válaszokat keres, ahogy ezt a 4. fejezet 3. bekezdésében mondja: a koncentráció és összetétel-függés valamint a geometria egyszerűsített volta által nyerhető trendek és viselkedések megértése.

Jó lett volna a disszertáció elején egy rövidítések, jelölések jegyzéke, mivel az olvasó nem képes egy menetben elolvasni a dolgozatot, így időnként vissza kell keresni az emlékezetből kiesett szimbólumokat.

További észrevételem, hogy a publikációkban közölt ábrákra nem szerencsés hivatkozni egy ilyen részletesen megírt dolgozat esetén. A bírálónak nem feladata, hogy az összes, jelen esetben mintegy 50 publikáció mindegyikét megszerezze, és elolvassa. (35. oldal)

A 2. tézispontban a jelölt azt javasolja, hogy elegánsabb az illesztett ionsugarak helyett koncentrációfüggő dielektromos állandót alkalmazni elektrolitok aktivitási koefficiensének becslésére. A kísérletek a koncentrációfüggő dielektromos állandóra, ahogy a szerző is utal rá, nagyon nehezen végrehajthatóak és bizonytalanságokkal terheltek. A kation sugarakhoz

hősszámolt hidrátburok azonban nem olyan erőltetett, mint ahogy a jelölt állítja. Ionok vízzel alkotott komplexei széles skálán mozgó stabilitással rendelkeznek. A kérdés az, hogy az alapvetően töltés-töltés kölcsönhatással kapcsolódó alkáli- alkáliföld-fémeknél, hogy aránylik egymáshoz az öndiffúzió időskálája és a hidrátburok fennmaradásának ideje. Kisebb ionok esetében van kísérleti evidenciája is ennek, pl. a Walden-szabályban, tehát ezek az elméletek nem feltétlenül irreálisak. Ami a granulált szimulációkat illeti kifinomult modellekkel ezek az eredmények bizonyosan reprodukálhatóak, csak a TIP3P-nél sokkal jobb, polarizálható vízmodell és polarizálható ionpotenciálok szükségesek. Ekkor az időskálákra vonatkozó feltevések is eldönthetőek lehetnek.

A dolgozat meghatározó eszköze a fázisonként eltérő dielektromos állandó alkalmazása. Igazából, egészen kicsi fázisdarabokra szokatlan dolog egy makroszkopikus eredetű tulajdonságot illeszteni. Ez vizes oldatok esetében jobban elfogadható, mivel a közvetlen szolvárburoktól távol a víz homogénnek tekinthető. Mit tudunk viszont a fehérje térszerkezetéről, amit a hidrogénhidak és egyéb kényszerek csak korlátozottan engednek mozogni, a különböző oldalláncok elhelyezkedéséről és a jelenlevő víz szerepéről? Ezek az óriás molekulák ráadásul lipid kettősrétegbe vannak beágyazva, ami rendkívüli inhomogenitást jelent. Kérdésem, hogy az ioncsatorna körüli fehérje dielektromos állandójának meghatározására el tud-e képzelni valamiféle kísérletet?

Az alapvető kérdés a Boda Dezső által követett modellt illetően az, hogy merev gömbi töltések beágyazva a különféle szemi-makroszkopikus dielektrikumokba mennyire tudják felülmúlni azokat a molekuláris részletességű számítógépes kísérleteket, amelyekből néhányat már én is láttam az irodalomban az ioncsatornákra. Azt hiszem, hogy ennek a modellnek az erénye, hogy szét tudja válogatni a különféle faktorokat, ezáltal tud következtetni arra, hogy egy bizonyos faktor (pl. méretváltás) milyen hatást fog okozni. Másrészt, ahogy, meglepő módon, a makroszkopikus rendszerekre megalkotott hidrodinamika is működik a mikroszkopikus tartományban, vagy a hidratációs szabadentalpiák is jól számíthatók a PM + dielektrikum modellben a jelölt megközelítése versenyképes lehet a jóval drágább, szemre szofisztikáltabbnak tűnő módszerekkel feltéve, hogy a meghatározó kölcsönhatás a töltés-töltés vonzás vagy taszítás. A dolognak számomra egyetlen gyengéje, hogy az így vizsgálható ionvándorlásokra nincs perdöntő kísérleti adat, ami viszonylag bizonytalanná teszi a következtetéseket.

A hibáktól és elírásoktól hemzsegő dolgozatok esetén, elkerülhetetlen, hogy a bíráló rosszálló észrevételeket tegyen, egy gondosan megszerkesztett dolgozat esetén azonban nem szoktam elírásokra vadászni, így ezzel kapcsolatban csak dicsérni tudom a szerzőt.

Őszintén bevallom, hogy bár elég sokszor bíráltam már akadémiai doktori vagy PhD dolgozatokat, de nem találkoztam még olyan dolgozattal, amely ennyire célzottan és részletesen járt volna körbe egy probléma területet. Emiatt nem nagyon vannak elvarratlan szálak, amelyekre rá lehetne kérdezni, vagy gondolati pontatlanságok, felületes vagy téves megközelítések. Ezért van az, hogy a bírálónak nincs sok kérdése, felvetése. Az biztos, hogy számomra az egész PM+dielektrikum megközelítés kicsit archaikusnak tűnt az olvasás elején, de a jelölt annyi innovációt vitt ebbe a 70-es években virágzó területbe, hogy a dolgozat minősége mindenképpen újszerű és értékes.

Boda Dezsőnek az MTA doktora cím odaítélését javaslom

Budapest, 2013-02-14



Baranyai András

a kémiai tudományok doktora