

# B í r á l a t

Szalai István

*Kémiai mintázatok szisztematikus előállítása nyitott reakció-diffúzió rendszerekben*

című MTA Doktori értekezéséről

Szalai István, az ELTE TTK Kémia Intézet, Analitikai Kémiai Tanszék habilitált docense, harmadik generációs tagja annak a nemzetközileg elismert tudományos iskolának, amelyet a néhai Kőrös Endre akadémikus alapított a múlt század hatvanas éveiben a nemlineáris kémiai dinamikai jelenségek kutatására. A később Orbán Miklós akadémikus által vezetett kutatócsoport a századfordulóig elsősorban a homogén oszcillációs kémiai reakciókat tanulmányozta, melynek eredményeként számos új oszcilláló kémiai rendszert (családot) hoztak létre tudatos tervezéssel. A kutatások kiterjesztése a kémiai mintázatok szisztematikus előállítására és vizsgálatára az elmúlt tizenöt évben Szalai István és munkatársai nevéhez fűződik. A szerző a benyújtott MTA Doktori értekezésében a 2002–2015 között elért, a témakör nemzetközi fejlődését alapvetően meghatározó, s talán nem túlzás azt állítani, hogy szeminális (korszakalkotó) eredményeit foglalta össze.

Szalai István aktív tagja a nemlineáris kémiai dinamikai kutatásokat végző, kis létszámú, hazai tudományos közösségnek. Rendszeresen tart előadásokat MTA munkabizottsági üléseken és nemzetközi konferenciákon, s így számos alkalmunk volt konzultációra, közös gondolkodásra. Társszerzője a hazai tudományos iskolák együttműködésében 2013-ban készült „Nemlineáris dinamika: Önszerveződés kémiai és biológiai rendszerekben” című egyetemi jegyzetnek. Amikor ilyen szoros szakmai kapcsolatban van valaki egy kollégával, akkor óhatatlanul felmerül a kérdés, hogy nem áll-e fenn összeférhetetlenség? Mivel az előbb említett egyetemi jegyzet kivételével közös munkánk, közös közleményünk nem volt, azt gondolom, hogy az összeférhetetlenség kizárható. Ugyanakkor nem kívánom eltitkolni, hogy Szalai István munkásságával kapcsolatban a szó legnemesebb értelemben *elfogult* vagyok. Meggyőződésem, hogy a Turing-mintázatok tervezhető előállításával kapcsolatos eredményeik örök időkre bekerültek a „Tudomány Nagy Könyvébe”.

Szalai István az értekezés első lapján Andrew Hodges könyvéből (Kódjátzsma – Alan Turing élete, Gabo Kiadó, 2015) idézi a múlt század egyik legnagyobb zsenijének leírását a csodálatos Landolt-reakcióról, amely a benyújtott doktori értekezésben is központi szerepet tölt be. Nekem erről, valamint Szalai István munkásságáról és annak jelentőségéről Thomas Mann: Doktor Faustus című műve jut az eszembe. A III. fejezetben Jonathan Leverkühn így elmélkedik egy új-kaledóniai kagyló mintázataról:

*„Lehetetlennek bizonyult ..., hogy e jelek értelmét megfejtsük. ... Makacsul elzárkóznak megértésünk elől, és fájdalmas, de valószínű, hogy ez így marad. Mikor azonban azt mondom, „makacsul elzárkóznak”, akkor ez csupán ellentéte annak, hogy „megnyílnak”, mert azt senki sem fogja elhítenni velem, hogy a Természet pusztán csak díszítésül rajzolta oda teremtménye méshéjára e rejtjeleket, amelyeknek kulcsa nincs birtokunkban.”* (Szöllősy Klára fordítása, Európa Kiadó, Budapest, 1967).

Szalai István kutatásainak eredményei is pont ezt a kulcsot segítenek megtalálni, illetve adják meg különböző kémiai mintázatok szisztematikus előállításának kísérleti módszerét. Ebben a rövid mondatban foglalható össze tömören a doktori mű tudományos újdonsága és eredménye.

Ezen sommás mondattal akár le is zárhatnám a doktori értekezés bírálatát, de tisztában vagyok azzal, hogy a tisztelt bizottság az eljárás szabályai szerint joggal várja el tőlem az elfogultságot sem nélkülöző állítás alátámasztását tényekkel és érvekkel. Ennek tesztek eleget az alábbiakban.

A doktori értekezés alapja 18 tudományos közlemény, amelyek a fizikai kémia legnagyobb határfokú, referált folyóirataiban (*J. Phys. Chem. A, Phys. Chem. Chem, Phys., Chaos stb.*), valamint a szélesebb tudományos közvélemény figyelmét is felkeltő *Science*-ben jelentek meg. Figyelemre méltó, hogy ezek közül a jelölt nyolcban első, hatban utolsó (feltehetően levelező) szerző, 2014-ben pedig a Landolt-reakciókkal kapcsolatban egyszerezős cikket jelentetett meg a *J. Phys. Chem. A*-ban. A tézisekben közölt tudományometriai adatok is egyértelműen jelzik, hogy ezekkel és a PhD fokozat megszerzése óta közölt további 19 közleménnyel együtt Szalai István munkássága jelentős nemzetközi visszhangot váltott ki: a közleményeire történt független hivatkozások száma közel 400.

A kiválóan megírt, jól olvasható doktori értekezés 139 számozott oldalt tartalmaz. Az értekezés szerkezete arányos: a bevezetés és irodalmi összefoglaló közel 40 oldalas, amelyet a kísérleti eszközök és módszerek, valamint a numerikus eljárások tömör, kb. 10 oldalas leírása követ. Az elért eredményeket a szerző mintegy 70 oldalon keresztül ismerteti, melyhez több, mint 100, színvonalasan elkészített, jól szerkesztett ábrát használ fel. Az ábraalírások informatívak, kifogástalan színvonalúak. Az összefoglalás és a kitekintés tömör és korrekt, s egyben új utakat jelöl ki a jövő kutatói számára. A dolgozatban csak elvétve találni gépelési hibát, de ezek nem okoznak nehézséget az olvasásban. Kivéve egyetlen esetet: a [94] hivatkozásban lemaradtak a szerzők.

Ismert lehet, hogy nagy szigorral szoktam bírálni az írott művek nyelvhelyességét, a magyar és a szakmai nyelv szabályainak betartását. Örömmel tapasztaltam, hogy Szalai István az értekezés megírásakor igen nagy figyelmet fordított ezekre a szabályokra, s az értekezés szinte hibátlan ebből a szempontból is. Kifogást tulajdonképpen csak a „paramétertartomány” szó következtelen írásmódjával szemben tudok megfogalmazni (olykor, helyesen, egybeírva, míg más esetben, helytelenül, kötőjellel szerepel a dolgozatban). Megjegyzem, hogy nagyon megkönnyíti az értekezés olvasását az is, hogy a szerző a dolgozat elején közli az alkalmazott jelölések jegyzékét. Dicséretes, hogy az IUPAC Gold Book-ban megtalálható előírásnak megfelelően a szerző görög  $\theta$  betűt alkalmaz a Celsius-fokban megadott hőmérsékletre, amely szabályt sajnos csak kevés kémikus követ. Tudom, hogy a kémiai reakciók előrehaladása mértékének jellemzésére az ELTE-n újabban bevezették a *reakcióextenzitás* elnevezést. Ezzel ellentétben én úgy gondolom, hogy a  $\xi$ -vel jelzett mennyiség fizikai-kémiai tartalmát sokkal jobban kifejezi a tankönyveinkben általánosan elterjedt régebbi, *reakciókoordináta* elnevezés, hisz így a mol mértékegység, ha nem is egyszerűen, de könnyebben értelmezhető lehet.

A kísérletek során kétféle reaktortípust alkalmaztak, melyekre az angol elnevezésekből származó CFUR és a CSTR mozaikszavakkal történik utalás a dolgozatban. Úgy gondolom, hogy a jelölések jegyzékében megadott „fordítás” mindkét esetben hiányos és félrevezető, mert nem érthető mire vonatkozik a „folyamatos” jelző. Talán szakmailag helyesebb lenne az „átáramlásos, nem kevert gélreaktor” (CFUR), valamint az „átáramlásos, folyamatosan kevert tankreaktor” (CSTR) elnevezések alkalmazása.

Szalai István az eredményeit nyolc tézispontban foglalta össze. A tézisfüzet, az értekezéshez hasonlóan, jól szerkesztett és könnyen olvasható. A dőlt betűkkel szedett, hosszabb-rövidebb tézispontok tipográfiaiilag is jól elkülönülnek a szövegtesttől. Minthogy a kutatás a mintázatképződésről szól, talán érdemes lett volna egy-két olyan ábrával is gazdagítani a tézisfüzetet, amely különböző kísérletesen előállított vagy éppenséggel számított mintázatot mutat be. Az előbbire adott volna alkalmat például az 5. tézispont, az utóbbira pedig a 8. tézispont, melynek kapcsán fontos lett volna az első olvasásra nehezen értelmezhető térbeli biritmitás és káosz illusztrálása.

A tézispontokat nem kívánom egyenként ismertetni. Sokan előre megkapták a tézisfüzetet, és olvashatták, a védésen résztvevők pedig előszóban hallhatják az eredmények összefoglalását. Természetesen, a tézispontok között vannak kisebb és vannak nagyobb jelentőségűek, de kijelenthető, hogy mind a nyolc tézispont új tudományos eredményeket tartalmaz. Minthogy a tézispontok szorosan egymáshoz kapcsolódnak, és tulajdonképpen egy logikusan építkező kutatás részeredményeit tartalmazzák, azokat egyenként és összességében is elfogadom.

Végül néhány, konzultációra és vitára alkalmas kérdést szeretnék megfogalmazni:

- 1) Kérem, hogy a 3. tézispont kapcsán fejtse ki, mit kell pontosan értenünk a „térbeli oszcilláció” fogalmán! Milyen feltételek esetén lehet ennek oka diffúzióvezérelt, illetve kinetikailag vezérelt instabilitás!
- 2) Az értekezés 32. oldalán olvasható az a megállapítás, hogy a reakció-diffúzió rendszerekben kialakuló mintázatokra nem jellemző a négyzetes szimmetria. Mi ennek az oka? Miért a csíkos vagy a hexagonális Turing-mintázat a domináns?
- 3) A 119. oldalon az ún. Rábai-moddellel végzett számítások eredményei alapján magyarázza a Swinney-csoport korábbi kísérleteinek nehézségeit. Mennyire releváns a pH-oszcillátorok egyszerű modelljével végzett számítás a kinetikailag jóval összetettebb FIS-rendszerre? Mennyire alkalmas az egydimenziós (vonal menti) diffúziót feltételező modellel végzett számítás a kétdimenziós gélben kialakuló (síkbéli) mintázatok tulajdonságainak jellemzésére?
- 4) Az értekezés alapjául felsorolt utolsó, 18. közlemény a dolgozat benyújtásakor még csak megjelenés alatt állt. Az 5. tézispontban ugyan van hivatkozás erre a közleményre, de mintha az ebben szereplő eredmények nem kaptak volna megfelelő hangsúlyt a dolgozatban. Kérem, oszlassa el ezt a véleményemet, vagy ha jól érzekelem a dolgot, akkor adjon kicsit részletesebb betekintést ebbe a munkába is.

**Összefoglalás:** Szalai István színvonalas doktori dolgozatában a kémiai mintázatképződéssel kapcsolatos, korszakalkotó kutatásainak eredményeiről számolt be. A nyolc tézispontban megfogalmazott új eredmények jelentősen hozzájárultak a tudományterület fejlődéséhez, és örökérvényű, széleskörűen alkalmazható ismerettel járulnak hozzá a nemlineáris kémiai dinamika XXI. századi történetéhez. A doktori művet a nyilvános vitára alkalmasnak tartom, s melegen javaslom annak vitára tűzését. Megtiszteltetés volt e példaértékű doktori értekezés bírálójaként részt venni a doktori eljárásban.

Debrecen, 2016. július 12.



Gáspár Vilmos