

Szalóki Imre figyelemre méltó eredményeket ért el az anyagokban fotonokkal és elektronokkal létrehozott gerjesztéseket követő röntgenemisszió atomi jelenségeinek az Alapvető Paraméterek Módszerének alkalmazásával kvantitatív elemzés céljából történő matematikai modellezésében, a kidolgozott megoldási algoritmusok és számítástechnikai eljárások szoftveres megvalósítása és felhasználása területén. Eljárása alkalmas különböző anyagminták atomi összetételének emissziós röntgenspektroszkópiával történő mennyiségi meghatározására. A kidolgozott módszer egyidejűleg alkalmazható a minta eltérő kísérleti feltételekhez tartozó eredményeinek kiértékelésére. Az Alapvető Paraméterek Módszerével történt modellfejlesztések lefedik az emissziós röntgenspektroszkópia több különböző típusát és azok kísérleti alkalmazásait. Szalóki Imre módszerének alkalmazásaira példákat mutat be. Ilyenek: aeroszol részecskék mennyiségi analízise, elektródák felületén adszorbeálódott kémiai elemek elektrokémiai vizsgálata, tengeri üledékben lévő részecskék kémiai elemek szerinti összetétele térbeli eloszlásának meghatározása, gyémántokban lévő zárványok 3D kvantitatív elemterképezés, cserépedények mázában lévő ólom savas közegekbe való kioldódásának meghatározása, platina koncentráció biológiai anyagokat modellező (humán) fantomokban való meghatározása. A fenti tudományos eredmények jelentősen előreviszik a röntgenemissziós spektroszkópiai terület fejlődését a pontosabb kvantitatív leírás irányában.

A Bizottság a doktori mű, a bírálói vélemények és a jelölt kérdésekre való válaszai alapján a jelölt tézispontjait új tudományos eredményeknek fogadja el.

Az egyes tézispontokra tételesen a következő megállapításokat teszi:

1. tézis: Modellszámítások a fotongerjesztéssel végzett röntgenemissziós analitikában

A jelölt figyelemre méltó eredményeket ért el az anyagokban fotonokkal és elektronokkal létrehozott gerjesztéseket követő röntgenemisszió atomi jelenségeinek az Alapvető Paraméterek Módszerének alkalmazásával kvantitatív elemzés céljából történő matematikai modellezésében, a kidolgozott megoldási algoritmusok és számítástechnikai eljárások szoftveres megvalósítása és felhasználása területén. Eljárása alkalmas különböző anyagminták atomi összetételének emissziós röntgenspektroszkópiával történő mennyiségi meghatározására. A kidolgozott módszer egyidejűleg alkalmazható a minta eltérő kísérleti feltételekhez tartozó eredményeinek kiértékelésére. Az Alapvető Paraméterek Módszerével történt modellfejlesztések lefedik az emissziós röntgenspektroszkópia több különböző típusát és azok kísérleti alkalmazásait. Az elért eredmények hozzájárultak az egyes röntgenspektroszkópiai módszerek analitikai teljesítőképességének lényeges, érdemi javításához.

2. tézis: Fordított Monte-Carlo (RMC) és FPM modell aeroszol részecskék összetételének elektronsugaras mikroanalízissel (EPMA) végezhető meghatározására

A jelölt aeroszol részecskék mennyiségi analíziséhez kidolgozta és eredményesen alkalmazta a Fordított Monte-Carlo módszert. Megmutatta, hogy az energia-diszperzív röntgenspektroszkópiai mérések és a vékony ablak elektron mikroanalízis módszer együttes alkalmazásából származó röntgenemissziós adatokból meghatározható nagyszámú, zömmel főleg alacsony rendszámú összetevőket tartalmazó aeroszol részecske egyedi összetétele.

3. tézis: TW-EPMA és RMC-FPM elemzés mérési, számítási folyamatainak optimalizálása és alkalmazása aeroszol részecskék elemzésében

A jelölt kísérleti úton igazolta, hogy a teljes TW-EPMA analitikai folyamat optimalizálható a méréstechnikai paraméterek alkalmas megválasztásával: mintahordozó, gerjesztő elektronenergia, elektronáram, részecske hőmérséklete, részecske típusa, mérési idő és a mintavételi módszer technikája. Ezen túl bizonyította, hogy az optimalizált TW-EPMA eljárás eredményesen alkalmazható az aeroszokok vizsgálatával foglalkozó analitikai projekteknél.

4. tézis: Röntgenspektrometriai modellszámítások az elektrokémiában

Matematikai módszert dolgozott ki radioaktív nyomjelzést és „fólia-módszer” méréstechnikai eljárást alkalmazó elektrokémiai vizsgálatokhoz az elektródák felületén adszorbeálódott kémiai elemek mennyiségének meghatározására. A kifejlesztett eljárással meghatározta egy vékony, polikristályos

arany-elektrod felületére adszorbeálódott ^{65}Zn és ^{51}Cu radioizotópok felületi sűrűségét. A modell-számításokkal kapott eredményeket empirikusan hitelesített, adszorpciós mérésekkel tesztelte.

5. tézis: Specializált FPM modellszámítások biológiai és geológiai anyagok analízisére

Új eljárást dolgozott ki tengeri üledékben lévő részecskék kémiai elemek szerinti összetétele térbeli eloszlásának vizsgálatára.

Kísérletileg kimutatta, hogy a vizsgált esetekben a nehézfémek és a szerves alapú szennyezések jelentős része az üledékes részecskék felületére ültek ki. – Szinkrotron sugárzás segítségével meghatározta gyémántokban lévő zárványok 3D kantitativ elem térképét. – Kidolgozta cserépedények mázában lévő ólom savas közegekbe való kioldódása meghatározásának módszerét az idő, a hőmérséklet függvényében. – Módszert javasolt a platina koncentráció biológiai anyagokat modellező (humán) fantomokban való meghatározására röntgenemissziós mérések segítségével.

6. tézis: Szinkrotronsugárzással végzett 2D/3D mikroanalitikai és in-vivo XANES vizsgálatok mérés technikai és modellszámítási módszereinek fejlesztése

Új számítási modelleket és mérés technikai eljárásokat dolgozott ki a szinkrotronsugárzással végzett, különleges feltételeknek megfelelő alkalmazások megvalósítására. Ezeknél a kísérleteknél elsődleges fontosságú a nagy detektálási sebesség, mivel mikroméretű, nagy fluxussűrűséggel rendelkező röntgenyalábokat állítanak elő kicsiny minták kvantitativ elemzésére.

7. tézis: FPM modellek kifejlesztése μXRF -CI elemzés rekonstrukciós számításaihoz és saját fejlesztésű laboratóriumi MAXRF spektrométerekhez

Kidolgozta és megvalósította két új típusú, széles röntgenanalitikai lehetőségeket biztosító hordozható berendezés terveit és megépítette azok laboratóriumi változatait, melyek alkalmasak radioaktív anyagok közvetlen elemzésére. Egyedi fejlesztési megoldással berendezést hozott létre a röntgenemissziós- és Raman-spektroszkópia kombinált alkalmazására. Megmutatta, hogy az ilyen berendezéssel az analizálható koncentráció-tartomány jelentősen kiterjeszhető.