

Vélemény

Kalmár József

Nagy porozitású szilárd gélek (aerogélek) szerkezet, fizikai-kémiai tulajdonságai és alkalmazásai

című MTA doktori értekezéséről

A közel 100 éve felfedezett aerogélek az anyagtudomány előtérbe kerülésével, a technológiai igények és az azokra adott kutatási eredmények egymásra találásával napjaink legkreatívabb anyagai közé tartoznak. A szol-gél eljárások természetéből adódó variabilitás a hibrid anyagok iránti igényrel párosítva szinte kimeríthetetlen terület korunk anyagtudósai számára: a hibrid anyagok kutatása az anyagtudomány egyik legdinamikusabban fejlődő területe. A nanotechnológia, az energiatárolás, az orvostudomány és a fenntartható technológiák új és komplex tulajdonságokkal bíró anyagokat igényelnek. Ez kétségtelenül igazolja a disszertációban összefoglalt kutatómunka aktualitását: funkcionális szilárd gélek és hibrid gélek szintézise, jellemzése és a potenciális alkalmazásuk során fellépő fizikai-kémiai folyamatok mechanizmusainak molekuláris szintű feltárása, többszörösen hangsúlyozva a megközelítés mechanisztikus jellegét.

A dolgozat felépítése

A Szerző 17 - lektorált, magas tudományos értékű nemzetközi folyóiratokban megjelent - közleményére alapozta dolgozatát. Ezek tematikus illeszkedése, minősége és száma összhangban van az akadémia doktori értekezésekkel kapcsolatos elvárásaival.

A munka a klasszikus, hagyományos formában került összeállításra. A meglehetősen terjedelmes angol nyelvű dolgozat 149 számozott oldalát további több, mint 30 oldalnyi római számozású, a 398 tételes irodalomjegyzéket is tartalmazó anyag egészíti ki.

A kutatási terület jelen tudományos helyzetébe történő bevezetés után tárgyalja az alkalmazott szintézis- és anyagtudományi jellemzési módszereket, majd a legnagyobb súlyú, a 100 oldalt is meghaladó terjedelmű Eredmények és diszkusszió rész három nagy alfejezetében az eredmények ismertetése következik. A módszertani felépítés átgondolt és a bemutatott munkában következetesen érvényesül.

Mintái előállítására leggyakrabban a szol-gél eljárás szolgált, azok jellemzését a pórusos anyagok vizsgálatára elterjedten alkalmazott, a 21. század mérés technikájának megfelelő, korszerű módszerek szisztematikus alkalmazásával végezte. A morfológiai vizsgálatokra tipikusan pásztázó elektronmikroszkópiát,

alacsony hőmérsékletű nitrogéngőz adszorpciót és kisszögű neutronszórást, a kémiai tulajdonságok felderítésére Fourier transzformációs infravörös spektroszkópiát és többfajta NMR technikákat alkalmazott.

Vizsgálta többfajta (hibrid) aerogél hidratációs viselkedését, majd ilyen típusú anyagok hatóanyag gyógyszerhordozóként történő hasznosíthatóságát. Ez utóbbi területhez kapcsolódóan fluoreszcencia spektroszkópiás módszer segítségével *in vitro* és *in vivo* tanulmányozta hibrid szilikagélek alkalmazhatóságát daganatos betegségek terápiájában. Végül, mintegy összegzésként, szilika aerogélek felületén végbemenő szorpció és katalitikus folyamatokat vizsgált a határfelületi mechanizmusok molekuláris szintű felderítésére. A dolgozat angol ill. magyar nyelvű összefoglalás és kitekintés fejezettel zárul.

Új eredményeit három nagy témakörre csoportosítva a magyar nyelvű tézisfüzetben összesen 14 tézispontban foglalta össze.

Bírálóban a disszertáció olvasása és értékelése közben a következő kérdések, megjegyzések fogalmazódtak meg.

1. A célkitűzések és a motiváció megfogalmazásában többször találkozunk a mechanisztikus megközelítés fogalmával. Mennyire lehet ebben segítség a „tisza” komponensek viselkedésének ismerete, ill. történtek-e ezek megismerésére irányuló vizsgálatok.
2. A hibrid gélek szerves összetevője eredményez-e és ha igen, milyen mértékű duzzadást? Ez mennyiben befolyásol(hat)ta vizsgált fizikai-kémiai tulajdonságaikat ill. hatóanyagleadási viselkedésüket? Hol helyezkedik el a víz? Lokalizálhatók-e a vízmolekulák a Ca vagy a polimerláncok körül molekuláris szinten?
3. Nem pontosan értelmezhető, hogy az archetipikusnak megjelölt Ca-alginát és poliamid gélek mennyiben mások, mint a munkában vizsgált társaik. A többi vizsgált - akár Ca alginát - aerogél nem tekinthető ilyen „általános” képviselőnek?
4. A hibrid szilikagélek esetén a társító szerves partner/polimer kiválasztása milyen megfontolások alapján történt? Hasonlóan, miért esett a választás az alginátok esetén éppen a Ca-ra és a Fe(III)-ra?
5. Többfajta Ca-alginát aerogélt vizsgált, különböző alkalmazásokra. Ehhez minden esetben új anyagként jellemezte a gélek vizes közegű viselkedését. Miért volt erre szükség? Tapasztalatai, eredményei alapján lehetséges-e ezek után ezen hibrid aerogélek általános ill. specifikus tulajdonságainak az összefoglalása.
6. A Beaucage modell alkalmazása a szórásgörbék kiértékelésére feltehetően kényelmesebb, mint a Guinier és Porot tartomány külön-külön kiértékelése. Valóban azonos értékű és megbízhatóságú eredményt szolgáltat?

7. Mi magyarázza a száraz és nehézvízben mért szilika hibridgének eltérő méretének (2. táblázat)?
8. Az alacsony hőmérsékletű nitrogéngáz adszorpciós mérési eredmények értékelése több esetben is eltér az IUPAC nemzetközi irodalomban széles körben elfogadott és követett ajánlásától. A nomenklátúra, a mért adatok értelmezése és kiértékelése a dolgozaton belül sem egységes és több helyen sem felel meg a nemzetközi szakirodalomban elfogadottaknak: pl. az izotermák osztályozása, a méreteloszlások meghatározására kiválasztott adatsor, az átlagos pórusméret többféle definíciója. Ez több esetben túlegyszerűsíti a vizsgált rendszerek tulajdonságait és megnehezíti az eredmények értelmezését.

A Kelvin-egyenlet alapú BJH modell szabatosan a 2 - 50 nm pórusméret-tartományban ad korrekt eredményt. A relatív nyomás – pórusméret kapcsolat megfogalmazó egyenlet matematikai természete miatt tágabb makropórusokat is tartalmazó rendszerekben a különböző minták összehasonlítását az izoterma utolsó pontjainál ($p/p_0 \rightarrow 1$) egy többé-kevésbé önkényesen választott, de azonos p/p_0 értéknél (pl. 0,95) leolvasott mennyiségek alapján lehet korrekten megtenni.

9. Több helyen előfordul a szövegben a *vide infra* történő utalás (pl. a 15. ábra kapcsán). Milyen infra-eredményekre kell itt gondolnunk és milyen vonatkozásban?
10. Kérem, értelmezze a 6. táblázat adatait, mert a táblázat alatti magyarázat bíráló számára nehezen értelmezhető.
11. Eljárást dolgozott ki a kvarcküvetta falán megkötődő metilénkéék vizsgálatára. Kérem, ismertesse ennek részleteit. Mi a gyakorlati jelentősége ennek az eredménynek? Stimulálható-e a vizsgált jelenség, ha nagyobb felületű, de hasonló fényúttal rendelkező küvetta alkalmaz?

Mit jelent az $SMB \rightarrow SMB^I$ átalakulás és miben különbözik a két speciesz egymástól?

A kinetikai egyenletek közül miért lehet kizárni az $SMB + MB \rightarrow S(MB)_2$ folyamatot?

További megjegyzések

- A 3. ábra függőleges tengelyének nagyságrendje ellentmond az 1. táblázatban szereplő adatoknak
- Az 51. ábrán a metilénkéék koncentráció feltehetően μM
- Valóban, a 36b ábra esetén a 4 nm körüli csúcs valóban műtermék, amit az adszorpciós irodalom a kavitáció jelenségére vezet vissza (DOI: [10.1016/j.cis.2022.102831](https://doi.org/10.1016/j.cis.2022.102831)).
- Sem a N_2 -gáz adszorpciós izotermák, sem a munkában bemutatott SEM felvételek nem alkalmasak a pórusok számára vonatkozó következtetések levonására.

A fenti megjegyzések és kérdések nem kérdőjelezik meg Jelölt szakmai munkásságát és annak eredményességét, mindkettőt színvonalasnak tartom. Az értekezésben bemutatott új tudományos eredmények súlyuk és terjedelmük alapján megfelelően járulnak hozzá hibrid gélek szintézisével és alkalmazási lehetőségeivel kapcsolatos tudományterület fejlődéséhez.

Az téziseket elfogadom és javaslom a munka nyilvános vitára bocsátását.

Budapest, 2026. június 8.



László-Krisztina
az MTA doktora