Bírálat

Sápi András

„Modern stratégiai szemlélet a katalízisben: Atomi szintű tervezésen és megértésen alapuló heterogén katalizátorok"

című MTA doktori értekezéséről

Sápi András MTA doktori értekezésében négy nagy kutatási témát felölelő 13 éves kutatómunka eredményeit foglalja össze. A dolgozat címe jól fogalmazza meg, hogy a jelölt 2012-2014 közötti posztdoktorális tanulmányai során elsajátította a kontrollált méretű fém katalizátor nanorészecskék előállítását, azok reakció közbeni in-situ jellemzését a legmodernebb módszerekkel (NAP-XPS, DRIFTS, SFG), így lehetővé vált a katalizátorok atomi szintű tervezése és megértése, amit később jól kamatoztatott környezetvédelmi problémák megoldására: szén-dioxid átalakítására, szintézisgáz előállítására, majd szintetikus kőolajtermelésre félüzemi méretekig. A jelölt kutatási pályája és a dolgozat felépítése szerencsésen kapcsolódik egymáshoz: a nanotechnológiától a környezeti reakciótervezésen át eljutunk az ipari félüzemi alkalmazásokig. A disszertáció bemutatja a kutatómunka teljes spektrumát: az atomi méretektől kiindulva a reakciótervezésen át eljutunk az ipari alkalmazásokig.

Sápi András kutatása három fő pillérre épül: a katalizátorok szintézisére, jellemzésére és katalitikus tesztelésére. Az új tudományos eredmények három fő tézispontba sorolhatók: alkohol átalakítási (1) és egyéb (2) reakciók platina nanorészecskéken, valamint szén-dioxid aktiválási (3) reakciók vizsgálatára. Az elért eredmények nagyon impozánsak: a fizikai kémia szakterület szerinti tudománymetriai minimumkövetelményeket többszörösen meghaladják: a közlemények számát több mint háromszorosan, azok összesített hatását több mint nyolcsorosan, a független idézetek számát pedig szintén nyolcsorosan múlják felül. A jelölt kiemelkedő érdeme, hogy törekedett az alapkutatási eredményeket ipari, gazdasági megvalósításig fejleszteni, többek között mobil szintetikus üzemanyagokat előállító egységeket sikeresen félüzemi méretre skálázott fel és ezzel TRL-5-ös szintet ért el.

Az értekezés érdemi leíró részének terjedelme csak 72 oldal, ami éppen csak túllépi a minimális követelményt, a hivatkozások száma pedig csak 100. A tömörség

ugyanakkor nem megy az érthetőség rovására. A Bevezetés 2 oldalon foglalja össze a heterogén katalizátorok jelentőségét és a környezetvédelemben betöltött szerepét, valamint a jelölt kutatói pályáját. Az Irodalmi Áttekintésben a katalizátorok méret- és alakkontrolljának lehetőségeit, a felületük atomi szintű vizsgálatának modern módszereit (TEM, NAP-XPS, DRIFTS, SFG, Raman) ismerteti tömören, de érthetően a dolgozat. Hiányolom, hogy a SERS (Surface-Enhanced Raman Spectroscopy), magyarul Felület-erősített Raman-szórás módszert nem tárgyalja legalább egy bekezdés terjedelemben az értekezés. Először a 10. oldalon szerepel a „promóter" szó, ez a bíráló szerint „promotor" helyesen, ha katalizátorra alkalmazzuk. Néhány furcsa megfogalmazás az Irodalmi áttekintésben: „az iparba történő átültésre való remény egyre közelebbi sikereivel" (14. oldal) és „nagy kihívást nyújt egyelőre" (15. oldal). Az elírások száma viszonylag kevés a dolgozatban, ezért a gépelési hibák felsorolását mellőzöm. A 2.3 fejezetben a „CO_2 probléma" megoldásának lehetőségeiről van szó, itt hiányolom, hogy reakcióegyenletek a szövegben nem, csak ábrákban (itt a 7a. és 8. ábrában) szerepelnek. Az egész értekezés szövegében egyetlen reakcióegyenlet sincs. Különösen fontos lett volna legalább a WGS, RWGS, FT és metán reformálás egyenleteit beleírni az értekezés szövegébe. A Célkitűzések tömören és érthetően vannak megfogalmazva 2 bekezdésben a 16. oldalon. A katalízis tudománya két alapvető, egymással szorosan összefüggő kutatási területre épül: a katalizátorok fejlesztésére és jellemzésére, valamint a katalitikus reakciók mechanizmusának feltárására. Ezért hiányolom, hogy reakciómechanizmusokat részletesen nem tárgyal a dolgozat (ábrákban ugyan szerepelnek, de a szövegben erről alig van szó).

A Kísérleti Módszerek fejezet tömören, 12 oldalon írja le az alkalmazott technikákat. Ebben több rövidítést (pl. CTAB, HAADF, stb.) nem fejt ki a szövegben a szerző, ezeket és több csak a szövegben megadott rövidítés (pl. TOF) jelentését be kellett volna írni a Rövidítések jegyzékébe az értekezés elején. A 26. oldalon egy bekezdésben szerepel az spICP-MS módszer és mivel az ezt leíró közleményben (51-es hivatkozás) első szerző a jelölt, kérdésem, hogy ezt miért nem vette be az értekezés alapjául szolgáló közlemények közé?

A leghosszabb, Eredmények és Következtetések fejezethez kapcsolódó megjegyzéseim a következők. Van-e magyarázat arra, hogy az 1 nm-es Pt nanorészecskék túlnyomórészt oxidált, a nagyobbak pedig nagyrészt fémes

állapotban voltak a metanol oxidációs reakciók során (28. oldal)? Ha az izopropanol oxidációja folyadékfázisban és gázfázisban különböző mechanizmus szerint megy végbe, akkor mik lehetnek ezek a mechanizmusok (29. oldal)? Az eltérő molekuláris orientációnak van-e szerepe más reakciókban is az izopropanol (29. oldal) és az etanol (31. oldal) oxidációs reakcióján kívül? A 6,5 nm-es Pt/WO_3NW és Pt/MCF-17 katalizátorokon (37. oldal) SFG-vel kimutatott felszíni intermedierek (6. ábra) milyen reakciómechanizmusra utalhatnak? (A 6. ábra nem etanol bontási reakciót mutat be, a 6c ábra felirata hiányzik). A SAXS vizsgálatok alapján hogyan rekonstruálták a 21. ábrán bemutatott felületi struktúrákat? Az 5.3 fejezetben különösen zavaró a reakcióegyenletek, pl. Sabatier és RWGS reakció (44.oldal), az etanol száraz- és gőzreformálásának, RWGS+FT reakció (58. oldal), CO képződés formiát mechanizmuson (59. oldal) hiánya. Az ígéretes PtG technológia (44. oldal) megérdemelt volna egy bekezdésnél részletesebb ismertetést. Mit ért szén-dioxid hasznosítására irányuló hagyományos rendszerek alatt (46. oldal)? A Pt/CoO_x katalizátorok (47-49. oldal) vizsgálatánál a 27c ábrán nem kobalt oxidációs állapotok láthatók, sajnálatos, hogy az eredeti közleményekben (78, 47) tárgyalt reakcióutakból semmi sem került be a dolgozatba. A direkt CO_2 átalakítás C_{5+} üzemanyagokká (5.3.4. fejezet) rendkívül fontos célkitűzés. Nagyra értékelem, hogy 80 katalizátor hozamát és konverzióját hasonlították össze az üzemanyagfejlesztési projektben (65. oldal). A felskálázásból miért adódik koncentrációnövekedés (69. oldal)? (A 40. ábrán ez nem látszik egyértelműen: a CO_2 konverzió és a C_{5+} hozam nem lineárisan változik.)

Az „Összefoglalás" (6. fejezet) és a „gyakorlati hasznosítás lehetőségei" (7. fejezet) kiválóan megfogalmazott tömör leírása az elért eredményeknek és az ipari fejlesztési lehetőségeknek. Utóbbit különösen nagyra értékelem.

A disszertációban bemutatott 41 ábra kiváló minőségű és nagyon szemléletes, az egyik kivétel a 37. ábra, aminek (a) és (b) részét fél-fél oldalasra kellett volna nagyítani, hogy a feliratok jól láthatók legyenek.

A túl sok (34) tézispont miatt a Tézisek terjedelme (13 oldal és több mint 40.000 karakter) jócskán túllépi a maximális 10 oldalt és 20.000 karaktert. Az 1.1-1.7 tézispontok jól, tömören és összegezve foglalják össze az alkohol átalakítási reakciók kutatása során kapott eredményeket. A 2.1-2.8 tézispontok viszont 8 közlemény (Irodalomjegyzék 60, 67, 57, 62, 11, 49, 85, alapközlemények 7-14) eredményeinek tömörített felsorolása összegző tézispont(ok) nélkül (hacsak a 2. tézispont

bevezetésében leírt 2 mondatot nem vesszük annak). A 3-as tézispont összesen 19 alpontból áll és a 2-eshez hasonlóan 1-1 alpont a 15-34 számú alapközlemények eredményeinek felsorolása. Néhány eredmény és tézispont az eredeti közlemények Absztraktjának (szándékosan nem a magyar Összefoglaló vagy Kivonat szavakat használom, mert véleményem szerint egyik sem felel meg az angol Abstract szó pontos jelentésének) szó szerinti fordítása. Például a 37. oldal 3. és 4. bekezdése a 11-es hivatkozás Absztraktjának szó szerinti fordítása. Ezt az eredményt írja le a 2.5. és 2.6. tézispont. A 80-as hivatkozás Absztraktjának szó szerinti fordítása az 57. oldal hosszú bekezdése. Ezt az eredményt írja le a 3.2.6. tézispont. Ezzel kapcsolatban kérdésem, hogy miért szol-gél módszerrel preparálták a NiO-xP-Al_2O_3 katalizátorokat a hagyományos impregnálás helyett? Véleményem szerint XPS vizsgálatokkal nem meggyőző többféle nikkel-foszfid fázis jelenlétét igazolni a katalizátorok felületén, más bizonyítékot találtak-e Ni_2P/Ni_5P_{12} képződésére? A téziseket azért fogadom el új tudományos eredményekként, mert magas impakt faktorú referált (peer-reviewed) folyóiratokban publikált eredményeket sorolnak fel.

Véleményem szerint a túl sok tézispont miatt szerencsésebb lett volna kevesebb eredményt bemutatni (pl. a csak egy bekezdésben tárgyalt szó szerinti Absztrakt fordításokat kihagyni) és a legfontosabb eredményeket részletesebben tárgyalni, vagy a platina nanorészecskék, vagy a szén-dioxid aktiválási reakciók témájában egy rövid (tézisszerű) értekezést benyújtani. Bármelyik három változat meghaladta volna a tudománymetriai minimumkövetelményeket. Mindez nem befolyásolja a dolgozat kimagasló színvonalát méltató véleményemet.

Összefoglalva megállapítom, hogy Sápi András egy rendkívül értékes, kimagasló színvonalú, változatos területek széles körét felölelő, logikusan felépített MTA doktori értekezést nyújtott be, ami messzemenően megfelel a szakmai követelményeknek. Javaslom az értekezés nyilvános vitára bocsátását, a mű elfogadását és sikeres védés esetén az MTA doktora cím odaítélését.

Budapest, 2026. augusztus 15.

Dr. Korányi Tamás
az MTA doktora