

DR. HORVÁTH ERZSÉBET /Pannon Egyetem, Veszprém/

„Réteges szerkezetű anyagok és vegyes oxid bevonatok vizsgálata rezgési spektroszkópiai módszerekkel” című

MTA DOKTORI ÉRTEKEZÉSÉNEK

bírálata

Dr. Horváth Erzsébet 118 oldal (melyből a 104-118. oldal közötti rész a „tézisek”, „A tézisek alapjául szolgáló közlemények jegyzéke”, az „Irodalomjegyzék”, a „Fogalmak és magyarázatok” és a „Köszönetnyilvánítás”) terjedelmű, példásan szép kiállítású, értekezésének tudományos eredményei – melyeket világosan összefoglal tézisének 1-12.2 pontjaiban – kizárólag rangos nemzetközileg elismert folyóiratokban publikált közleményeken alapulnak.

Ezen a szinten különösen sajnálatosnak és egyértelműen figyelmetlenségre utalónak tartom, hogy mind a doktori értekezésben, mind az értekezés téziseiben a saját tudományos publikációk sorszámozásánál a 36. sorszám után az 57. következik és így jön ki a végső szám, a 65 publikáció. A tudományos eredmények alapjául szolgáló saját publikációk száma tehát 45.

A 45 publikáció összimpakt száma (a feltüntetett értékek alapján): 80.57 (egy publikációra vetítve: 1,79), a független idézetek összesített értéke (a feltüntetett értékek alapján): 330, (egy publikációra vetítve: 7).

A 45 feltüntetett saját publikációból Dr. Horváth Erzsébet 7-ben „első szerző”, az első ilyen közleménye 2003-ban jelent meg, Ezen 7 „első szerzős” közlemény összimpakt faktora: 10.017, összidézettsége: 44.

A 45 publikációból 27-ben külföldi az első szerző (ezen közlemények összimpakt faktora: 44.175, idézettségi szám: 201).

A 27 külföldi első szerzős közlemények közül 24-ben R. L. Frost professzor (Queensland University, School of Physical and Chemical Sciences) a Raman mikrospektroszkópia nemzetközi szaktekintélye az első szerző.

A 45 publikációban szereplő összes feltüntetett szerzők száma: 203, így az egy szerzőre eső összimpakt faktor: 0.397, az idézettségi szám: 1.6 (2). Ezen értékek alapján a formális számítás alapján Dr. Horváth Erzsébetre a 45 idézett közlemény 80.57 teljes impakt faktorból 17.865 (22.2 %), a 330 idézettségi számból 72 (21.8 %) esik.

A fentebbi formális „számelemzés” alapján gyakorlatilag lehetetlen objektíven eldönteni, – különösen, ha figyelembe vesszük a saját (7) illetve a méltán nagy hírű Frost professzor nevével fémjelzett elsőszerzős (24) közlemények számát – hogy a megadott $45-7=38$ feltüntetett publikációban szereplő új eredmények bizonyíthatóan mennyiben a jelölt tulajdonai. Ezt a kérdést a jelen értelmezés alapján nem tudtam (nem lehet) eldönteni.

Jelen disszertáció magas színvonalú tudományos eredményeket tartalmaz – mindenképp a rezgési spektroszkópiai módszerek (Raman mikrospektoszkópia, FT-IR (Driftires), röntgen pordiffrakciós (XRD), a termikus analízis (TG-DTA, TG-MS) alkalmazásairól – a rendezetlen, valamint réteges szerkezetű anyagok / rendezetlen valamint rendezett szerkezetű kaolinok, kaonilit intikhalációs komplexek és a vegyes oxid típusú bevonatok körében. Ezen eredmények színvonalára garanciák a R. L. Frost, Rédey Ákos, Kristóf János professzorok által vezetett kutatócsoportok.

A disszertációban szereplő eredmények gyakorlati felhasználhatósági vonzata megkérdőjelezhetetlen. A tervezhető felületi tulajdonságokkal rendelkező olcsó, környezetbarát abszorbensek / biofilm hordozók, polimer adalékok, nano-anyagok illetve bio nemesfém-tartalmú vegyes oxid bevonatok iránt fokozott a kereslet, alkalmazásaik rohamosan terjednek.

Dr. Horváth Erzsébet MTA doktori értekezésének tartalma színvonalas, gyakorlati jelentőségű. Különösen vonatkozik ez a megállapítás a jelölt első szerzős eredményeire, a katalitikus tulajdonságú vegyes oxid rendszerek előállításaira és tulajdonságaik vizsgálatára.

Az alkalmazott rezgési spektrofotometriás, XRD és termikus analízis módszerek korszerűek. Felmerül azonban a kérdés, hogy a házilag összeállított vizsgálati módszerek /TG-MS, SIMS/ megfelelnek-e a műszeres technikáktól ma elvárható követelményeknek /validálhatóság?/. Ma már hazánkban is hozzáférhető pl. a MS-MALDI-TOF technika, mellyel a disszertációban feltüntetett problémákra nézve további, értékesebb adatok nyerhetők.

Kérdés: történetek-e ilyen vizsgálatok?

Az értekezés tartalmával kapcsolatosan az alábbi kérdéseket / megállapításokat kívánom tenni:

- 30. oldal, 31. oldal 14. ábra, 32. oldal:
„acetát ionok két ponton, a metil és a karboxil csoporton keresztül is kölcsönhatásban vannak az expandált rétegekkel”

A 14. sz. ábrán a δ_s CH₃ sáv felhasadását / eltolódását értelmezi a CH₃ –csoport kötődésével.

Kérdés: hogyan / milyen kötéssel kötődik a metil-csoport?

Mai ismeretink szerint elvileg ez vagy van der Waals-vagy hiperkonjugációs effektusokkal történhet. Véleményem szerint ezek helyett inkább a „kötődés” helyett a CH₃ –csoport orientációs hatása nyilvánul meg.

Mi a helyzet a δ_s CH₃ sávval? Erről nincs említés. Ez a sáv mit mutat?

Hasonló kérdés merül fel a 32. oldalon a cézium-acetát esetében is.

- Vizsgálta-e a „szegi kaolin” esetében a K-acetát interkalációját?
- 36. oldal: 20. ábra: a piros jelzésű vonalnál az NH⁺ mit jelent? Nem NH₃⁺ ez? A H₂O⁺ helyett a H₂O⁺ alkalmazandó.

Kérdés: vizsgálta-e királyhelyi kaolinit hidrazinos interkalációját?

- 40. oldal és a 24. c. ábra:
„az 1670 cm⁻¹-nél megjelenő ν C = O sáv IR-ben erős...”
Ez a sáv a formamid esetében nem ν C = O, hanem „Amid-I” csoportrezgési sáv.
- 46. oldal: 29. ábra:
EI ionizációnál: helyesen H₂O⁺, CO⁺, CO₂⁺, CHONH₂⁺ mivel ezek gyök kationok.
- 59. oldal (illetve 66. oldal):
„a CH₃-csoport kölcsönhatásban van a sziloxán-réteggel és részt vesz a rétegkomplexumot összetartó erők kialakításában”

Itt ismét felmerül a 30-32. oldalon tett megállapítások kapcsán feltett kérdés:

Hogyan, milyen erők / kölcsönhatás révén?

A – C \equiv H₃ hiperkonjugáció nem zárható ki. Ez tisztázható lenne az Et₂SO alkalmazásával, ahol hiperkonjugáció nem lehet, de felléphet sokkal nagyobb szterikus hatás, ami gátolja a rétegkomplexum kialakulását. Véleményem szerint a hiperkonjugatív hatást támasztják alá a CD₃-SO-CD₃-al észlelt /60. oldal/ élesebb sávok, illetve sáveltolódások.

- 60. oldal:

A királyhegyi kaolinitre DMSO 11.13 A⁰

D₆DMSO: 11.15 A⁰


értéket ad meg.

Kérdés: mekkora a mérés hibája?

- 60., 62. oldal:
Az említett jelenségeknél nem játszik-e szerepet a víz klaszter jellege?
Ezek változó töltéstartalmúak, méretűek és szimmetriájúak lehetnek. Véleményem szerint ezek is szerepet játszhatnak.
- 64. oldal:
A CH₃ „rocking” rezgésének jelölése nem δ_sCH₃.
- 66-72. oldal:
A molekula-mechanikai (MM) számítások látványosak, de mint az várható is volt, magából a számítási módszerből, illetve az alkalmazott korlátozott peremfeltételekből adódóan limitált értékű információkat adtak az észlelt jelenségek értelmezéséhez. Fontos lenne az interkalációs komplexek energiáinak pontosabb ismerete. Ezen eredményekből még nehéz az MM módszer eredményes alkalmazhatóságát megjósolni a jövőbeli „többlépéses interkalációs folyamatok kísérlet tervezésében”.
- 76. oldal:
Miért csak a víz νOH sávjait vizsgálja? A karbamid Amid-I, Amid-II sávjai nem tükröznek változásokat?
- 85. oldal:
„...a 2086 cm⁻¹-nél lévő sáv terminális –C≡O csoportra utal.”
A –C≡O formában az oxigénnek pozitív töltéssel kell rendelkezni.
Felmerül a kérdés: ez a sáv nem egy –C=C=O formától vagy νC≡C rezgéstől ered?
(C≡C kötést tartalmazó vegyület elvileg az etilalkoholból képződhet).

Összefoglalóan megállapítom, hogy Dr. Horváth Erzsébet MTA doktori értekezésében összefoglalt tudományos eredmények – annak ellenére, hogy azok „tulajdonosi mértékét” nem tudom objektíven eldönteni – a felmerült kérdések megválaszolása esetén alkalmasak az MTA doktori cím megszerzéséhez és javaslom a nyilvános védés kitűzését.

Debrecen, 2011. 05. 20.


Dinya Zoltán
az MTA doktora