

## Bírálati vélemény

Dr. Imre Attila „*Stabilitás és fázisátmenetek kondenzált anyagokban*” című  
MTA doktori értekezéséről

Dr. Imre Attila 27 megjelent közleménye alapján írta meg az MTA doktora cím elnyerésére beadott dolgozatát, amelyekből 25 rangos nemzetközi folyóiratban jelent meg, egy könyv-fejezetként, egy pedig egy pályázat zárójelentéseként. A dolgozatban magyar nyelven összefoglalja mintegy 15 év kutatómunkáját, ami kondenzált fázisok metastabilitásával, illetve instabilitásával foglalkozik. Az elvégzett munka túlnyomórészt úttörő kísérletekből és számításokból áll, amelyek felderítették az eddig viszonylag kevésbé vizsgált jelenségkör új és érdekes tulajdonságait. A szerző mindig törekedett arra, hogy – elsősorban numerikus vizsgálatokkal történő összehasonlítás alapján – a kísérletek során az elméleti leírás szempontjából is fontos paramétereket határozzon meg, és vizsgálja azok szerepét fázisok instabilitásában, illetve a metastabilis tartomány határainak felderítésében. Ez gyakran csak empirikus összefüggések megfogalmazását jelentette, de ez természetes velejárója annak, hogy a tudományos megközelítések első lépése általában empirikus összefüggések megfogalmazása. Fontos része a munkának a kapott összefüggések gyakorlati célú felhasználására tett több érdemi javaslat.

A bíráló feladata a benyújtott mű tudományos eredményeinek, azok újdonságának, érdemeinek és hiányosságainak részletes értékelése, valamint annak megállapítása, hogy a mű vajon hiteles adatokat tartalmaz-e.

Ez utóbbi feladat a publikációs adatokat tartalmazó weboldalak, köztük az MTMT segítségével szerencsére könnyedén elvégezhető. Ezirányú vizsgálataim eredményéről a következőket mondhatom el. A 25 közlemény jelentős része a témakör vezető folyóirataiban jelent meg. Imre Attila ezekből húsz közleményben első szerző. A 25 nemzetközi folyóiratban megjelent közleményre közel 500 független hivatkozást kapott. Ennyi talán elegendő a dolgozatban szereplő adatok hitelességének vizsgálatáról.

A hivatkozásokkal és függelékkel együtt 148 oldalas dolgozat az eredeti közlemények tartalmát nagyon jól visszatükrözi. Bevezetés helyett egy 12 oldal terjedelmű áttekintést tartalmaz folyadékok negatív nyomású állapotairól, amely ezen állapotok tanulmányozásának történetét is áttekinti. Ez a rész tartalmazza továbbá a dolgozatban leírt saját kutatások rövid áttekintését is, valamint a végén a köszönetnyilvánítást. Ezt követi a bemutatott munka négy nagyobb fejezetre osztott részletes leírása, mindegyik fejezet elején egy külön bevezetéssel, a végén összefoglalással, összesen 105 oldal terjedelemben. Az ezeket követő „Összefoglalás” című fejezet – ami az egész dolgozat összefoglalása – 4 oldal, az irodalomjegyzék 16 oldal. A dolgozatot két függelék zárja; az egyik a negatív nyomású állapotok kísérleti tanulmányozásának módszereivel foglalkozik, a másik a dolgozatban felhasznált állapotegyenletek és más rövidítések jegyzéke.

Dr. Imre Attila a benyújtott dolgozatban, az azok alapját képező közleményekben (és az azokat összefoglaló tézisekben) jelentős tudományos eredményekről számol be. A 16 tézisben összefoglalt eredmények tézisenként egy vagy két cikkben leközölt anyagot tartalmaznak. Ez a felosztás ugyan vitatható lehet, de megfelel a kutatómunka és az azt összegző publikációk ütemezésének, így akár természetesnek is mondható. A felsorolt 16 tézist önálló tudományos eredményként ismerem el. (Felsorolásukat feleslegesnek tartom; azok a téziszüzetben megtalálhatók.)

Mi lehet még az MTA doktora cím elnyerésére benyújtott dolgozat bírálójának feladata a dolgozatban leírt eredmények, újdonságok, érdemek vizsgálatában, miután az egyes cikkek legalább két bíráló véleményének figyelembe vétele után megjelent javított változatok? A szűkebb témakör szakértői – akik e bírálat írójánál jobban értenek a dolgozat témaköréhez – véleményezték őket, megjelenésükhöz hozzájárultak, a bennük foglalt eredményeket is elfogadták. A szerző kiemelkedő szaktudományos teljesítményét ez már messzemenően igazolja.

A pályázat benyújtásához szükséges dolgozatot azonban még nem lektorálták, így az a cikkek első, kéziratossá változatához hasonlít. Ha már a pályázó a jelenlegi helyzetben nem térhet ki ennek

megírása alól annak érdekében, hogy ezen jelentős teher letudása után ismét zavartalanul foglalkozhasson tudománnyal és eredményeinek nemzetközi hozzáférhetőségű publikációjával, akkor a bíráló sem térhet ki ennek a magyar nyelvű szövegnek az alapos „lektorálása” és kritikája alól. A magyar nyelvű dolgozat megírását amúgy az MTA létrehozásának céljai alátámasztják. Az Akadémia első alapszabálya (A Magyar Tudós Társaság alaprajza és rendszabásai, Pest, 1831) ugyanis „a M. T. Társaság” egyedüli céljaként azt jelölte meg, „hogy munkálkodása által hazánkban a tudományok és szépművészségek honi nyelven műveltsenek.” Ennek értelmében a „Társaság” tagjainak feladata a magyar szaknyelv alkotó művelése. A bíráló ehhez csak annyit tesz hozzá, hogy ezt a célt a dolgozat akkor érheti el, ha nyilvánosan, korlátozás nélkül hozzáférhető, és megfelelő katalógusokban megtalálható. (A hozzáférés talán már biztosított; a figyelemfelkeltő katalógusok viszont még nincsenek kialakítva.)

Imre Attila magyar nyelvű dolgozata alapvetően áttekinthető, lényegre törő és érthető. Azok közé a dolgozatok közé tartozik, amelyeket a bíráló szívesen, érdeklődéssel olvas. A „gépelési hibák” száma sem haladja meg az oldalankénti átlagosan egyet, ami meglehetősen gondos munkára vall – bár eloszlásuk eléggé egyenetlen. Ez különösen fontos mostanában, amikor már neves tudományos folyóiratokban is előfordul, hogy nem javítja ki olvasószerkesztő a benne maradt hibákat. A dolgozat ugyan lehetne másként strukturált is, de annak olvasása közben az alkalmazott szerkezet nem zavaró. A meglehetősen cizellált idézési szerkezet ugyan feladja a leckét az olvasónak, de meg lehet vele küzdeni. Amit kifogásolnom kell benne, az a gyakran előforduló nem teljesen korrekt tudományos jelölésmód, amely többnyire csak zavaró, de néha megtévesztő is lehet. Ennek oka elsősorban a közkeletű tipográfiai szabványok figyelmen kívül hagyása, valamint helyenként az, hogy a rövid, ám általában felületes laboratóriumi zsargon benne maradt az írott szövegben is. Szorgalmas lektorként a dolgozatban előforduló (általam megtalált) hibákat összegezve, csoportosítva megemlítem, illetve némelyekre konkrét hely megadásával mutatok rá. Megjegyzem, hogy egyszerűbb lenne a bíráló dolga ebben a tekintetben, ha nem kinyomtatva-bekötve, hanem elektronikus formában kapná meg a dolgozatot. (Ennek környezetvédelmi és könyvtári polckímélő hozadékát most nem is említem.)

A következőkben először a jelölésbeli és stiláris hibák közül a fontosabbakat sorolom fel.

Az egész dolgozaton – majdnem következetesen – végigvonulnak a megértést egy kis külön odafigyelés után ugyan nem igazán akadályozó, de meglehetősen zavaró jelölésbeli problémák. Az egyszerűbbekkel kezdve: a legtöbb helyen a gondolatjel és a mínuszjel helytelenül van jelölve; a gondolatjel illetve mínuszjel (–, ANSI 0150) helyett kötőjel (-, ANSI 0173) szerepel a dolgozatban. Ezzel kapcsolatban – a magyar szabványokon túlmenően – ajánlom a szerző figyelmébe Hargitai Henrik „Írás számítógéppel” című elektronikus jegyzetét, amit alapszakos bölcsészhallgatóknak írt.

A másik nagyon zavaró írásmód a mennyiségek és a köztük lévő műveleti jelek betűköz nélküli egybeírása. (Pl.  $m = 1$  helyett  $m=1$ , vagy  $p_N - p_T$  helyett  $p_N p_T$ , vagy a még jobban zavaró  $g=-0.13303$ , ami a korrekt  $g = - 0,13303$  helyett olvasható a 24. oldalon.) Felhívom a szerző figyelmét arra, hogy a betűközt (szóközt) a műveleti jelek és az általuk összekapcsolt mennyiségek között már eleve alátámasztja az a tény, hogy az  $m = 1$  betűkkel leírva is három szó:  $m$  egyenlő 1.

Az egyik példa kapcsán azt is meg kell említeni, hogy a dolgozatban tizedespont és tizedesvessző egyaránt előfordul, nagyjából véletlenszerűen alkalmazva. (Kivételt képez ez alól az ábrák tengelyfelirata, ahol többnyire konzekvensen tizedespont van.) Mivel a magyar szabvány a tizedesvessző, ezért (ellentétben a néhai Commonwealth országok és Kína szabványaival, de összhangban Eurázsia, Dél-Amerika és a nem-angol gyarmat afrikai országok szabványaival) *mindenhol* tizedesvesszőt kell használni magyar szövegben – különösen a Magyar Tudományos Akadémián, ami a bírálat elején idézett alapszabály-részlet szerint a magyar tudományos nyelv művelésének kiemelt helye. Általában minden dokumentumszerkesztő, táblázatkezelő és grafikus alkalmazás átállítható egyik jelölésmódról a másikra.

Egyes szavak írásmódja nem következetes a dolgozatban. A robbanásszerű pl. előfordul egybeírva, de kötőjellel írva is. A régió-beli, illetve szakirodalom-beli (kötőjellel írott) szavakat is egybe kellene írni – bár lehetséges, hogy ezek is a rossz (nem a feltételes, hanem a mindig megjelenítendő) elválasztójelek következményei – amint az máshol több hasonlóan írt szóban is

tetten érhető. A rövidítésekhez kapcsolt ragok sem mindig felelnek meg a magyar nyelvi szokásoknak. A 13. oldalon pl. előfordul a °C-n írásmód a helyes °C-on helyett, a 10. oldalon pedig a „300 Celsiusig” kifejezés a „300 Celsius fokig” helyett.

Ezeknél érdemibb probléma, ha nem az írásmód, hanem maga a szó helytelen. A 67. oldalon szerepel a „moltömeg” és a „móltömeg” szó is, a korrekt kémiai használatnak megfelelő *moláris tömeg* helyett. A 81. oldalon a szokásos *móltört* szó helyett „molfrakció” szerepel. Ehhez hasonló probléma a glicerin helyett a(z angolból vett) glicerol előfordulása több helyen is.

A „laborzsargonban” használatos rövid kifejezések természetesen minden szakmában előfordulnak, de nagyon nem illenek az „akadémiai stílusban” írott tudományos szövegbe. Ilyen pl. a szilárd anyagok helyett a „szilárdak” szó többszöri előfordulása, illetve a „spinodális” több különböző szerepben főnévként történő használata is. Néhány (ritka) esetben a szerző is említi spinodális pontot vagy spinodális görbét, de leggyakrabban elhagyja az útbaigazító és jelentéspontosító főnevet. Érdemes itt felidézni a szó eredetét is, ami a latin *spina* (tövis) és *nodus* (csomó) szavakból származik, és „hegyes csomópontot”, azaz extrémumot jelent, pl. az állapot-egyenletek gráján. Az ebből képzett melléknév a „spinodális”, ami így „hegyes csomóponttal kapcsolatos”, azaz „extrémummal kapcsolatos” értelmű. (A szónak ez az értelme valószínűleg a stabilis egyensúlyi állapotokat megjelenítő „csomópontokat” összekötő *binodális* egyenes, illetve annak végpontjaiból előállítható görbe mintájára alakult ki.) A szerző egyik cikkében (J. Chem. Phys. **128**, 114708 (2008)) is előfordul pl. a spinodális *pont*, spinodális *görbe*, spinodális *állapot*, spinodális *nyomás*, spinodális *hőmérséklet*, spinodális *számítás*, spinodális *becslés* és spinodális *adatok* kifejezés mindegyike, és ott általában megjelenik a „spinodal” jelző mögött a jelzett főnév is. Röviden összefoglalva; a legbiztosabb, ha a spinodális szó önmagában nem, csak a jelzett főnévvel együtt fordul elő, így egyértelmű a jelentése.

A tudományos szövegeknek van egy nemzetközileg egységes szabályrendszere, amibe a jelölésekkel kapcsolatos konvenció is beletartozik. Eszerint a *fizikai mennyiségek jelölésére használatos betűk vagy rövidítések dőlt betűvel írandók*. Ezt persze a képletszerkesztők egész jól tudják, és jelen dolgozatban is automatikusan megteszik. A baj csak az, hogy a szerző ezt figyelmen kívül hagyva *ugyanazokat* a jeleket a szöveg közben és a diagramok tengelyfeliratain mégsem dőlt, hanem legtöbbször álló betűkkel írja. (Ebben nem egészen következetes; némely helyeken a szöveg közben is dőlt betűsek a megfelelő jelek, illetve van olyan, vélhetően képletszerkesztővel készült képlet is, amelyikben a szerző feltehetően szándékosan álló betűre változtatta a dölteket. Ilyen pl. a 23. oldalon szereplő  $p = [(1 - d_0)\rho + \frac{b}{2}\psi^2]$ , a képletszerkesztő által feltehetően helyesen írt  $p = [(1 - d_0)\rho + \frac{b}{2}\psi^2]$  meghagyása helyett.) Arra is van példa a dolgozatban, hogy egy soron belül keveredik a *dőlt és álló, illetve kis és NAGYBETŰS jelölés ugyanarra a mennyiségre*. (76. oldal 2. bekezdés közepén: „... a kapilláris megtelési hőmérsékletéből ( $T_f$ ) és a mért  $dP/dT$  értékből kiszámíthattuk a fázisátmenet nyomását ( $p_{cp}$ ).”)

Problémaként megemlítem az ábrák méretét is. Általában az A4 méretű oldal félszélességéhez méretezettek, de ez több ábra esetén alig olvashatóan kis betűket és a láthatóságot is zavaró vékony vonalakat eredményez. Véleményem szerint a legtöbb ábrát teljes oldalnyi szélességűre kellett volna méretezni, vagy megnövelni bennük a betűméretet és a vonalvastagságot.

Kevésbé általános előfordulású formai megjegyzéseimet az előfordulások oldalszámához rendelve még az alábbi hibákra hívom fel a figyelmet.

8. *oldal*: Magyarul a „két extrémá” rosszul hangzik, mivel az *extrema* a latin többes szám, de magyarul az egynél nagyobb számok után egyes számnak kell szerepelni.
16. *oldal*: A 2.1. (a) ábra szemre teljesen azonosnak látszik az 1.3. ábrával, noha előbbi a Peng-Robinson, utóbbi a van der Waals állapotegyenletet mutatja.
26. *oldal*: A 2.7. ábrán hiányzik az (a) és (b) azonosító.
27. és 39. *oldal*: Itt mind a „tangens hiperbolikus”, mind a „tangens hiperbolikus” írásmód előfordul.
50. *oldal*: A 2. bekezdés végén szerepel a „folyadékot egy *szilárdabb* vagy *rendezettebb* fázisba viszi” szöveg. A *szilárd fázis* kifejezés szerintem nem fokozható. Van ugyan több szilárd

fázis is sok fázisdiagramban, de nem szokás egyeseket szilárdabbaknak, másokat kevésbé szilárdnak hívni. A rendezettebb szónak grammatikai értelme ugyan van, de a rendezettebb fázis értelme nem világos számomra.

55. *oldal*: Itt szerepel az „illesztőegyenletek” kifejezés, ami nem hangzik jól. A hivatkozott egyenletek *függvényeket* írnak le, és ezeket a függvényeket lehet a mérési adatokhoz illeszteni.
57. *oldal*: A 3.8. és 3.9. ábrán a  $-\pi = -0.55$  GPa,  $-\pi = -0.28$  GPa,  $-\pi = -7 \pm 1$  GPa feliratok szerepelnek. A 3.11. ábra b paneljében  $\pi = -10.9$  GPa, c paneljében pedig  $-\pi = 16$  GPa van megadva. (Az 56. oldal szövege szerint „ $-\pi$  a  $T \rightarrow 0$ -hoz tartozó negatív nyomású aszimptota”.) Eltekintve attól, hogy az írásmódban álló és dőlt betűk, kötőjel és mínuszjel, betűközzel és anélkül egymás mellé írott  $\pi$  és műveleti jel jobbra véletlenszerűen váltakoznak ugyanabban a szerepben, miért a  $-\pi$  van megadva legtöbbször, és néha miért csak  $\pi$ ?
58. *oldal*: A második bekezdés végén keverékek koncentrációváltozásáról van szó. Magyar szóhasználatban a keverék nem egy homogén fázist jelent, erre az *elegy* szó használatos. Ugyanez a helytelenül használt „keverék” szó a 83. oldalon is előfordul. (Angolul az elegy megfelelője a *mixture*, a keveréké a *mechanical dispersion*. Nem kémiai szövegekben az angol *mixture*-t néha valóban szokás keveréknek fordítani.)
63. *oldal*: A 3.14. ábrán az ábraalírás szerint a (c) diagram pontjaihoz is törésponttal rendelkező két egyenesnek kellene tartozni, de ott egy görbe látszik.
64. *oldal*: Az összefoglalás első bekezdésében szerepel „a rendezetlen normál folyadékokat rendezettebbé és/vagy szilárdabbá tevő átmenetek” szöveg. Ezzel kapcsolatban ld. az 50. oldalhoz írt megjegyzést.
68. *oldal*: Itt az olvasható, hogy „amennyiben az y tengely a hőmérséklet”, illetve „ha az y tengely a nyomás”. Valójában pedig a dolgozatban ezek nem y-nal, hanem P-vel és T-vel vannak jelölve, így a szövegek helyesen így hangoznának: „amennyiben a függőleges tengely a hőmérséklet”, illetve „ha a függőleges tengely a nyomás”. (Továbbá a koordináta-tengelyeken mindig számok vagy fizikai mennyiségek szerepelnek, így azok jelölésének *dőlt betűnek* (y, P, T) kellene lenniük.)
71. *oldal*: Ezen az oldalon *kétkomponensű* elegyekről van szó, így az oldal közepén szereplő szöveg („A mérést mindig a homogén, *egykomponensű* régióból indítottuk, ...”) helytelen. Ugyanitt: a 4.4. ábrán szerepel az aláírásban az „a (bal)”, illetve a „b (jobb)” szöveg. Az a és b betűk feleslegesek, mivel nincsenek feltüntetve a diagramokban sem, és nélkülük is egyértelmű az azonosítás.
72. *oldal*: A „hőmérséklet-nyomás tér” és az „összetétel-hőmérséklet tér” nem igazán jó kifejezések, mivel nem igazán a fizikai térre vonatkoznak. Helyettük szerencsésebb a „hőmérséklet-nyomás diagram” és az „összetétel-hőmérséklet diagram” használata. (A fázisdiagram mintájára, amit nem hívunk fázistérnek, mert az mást jelent. Amúgy az említett diagramok a háromdimenziós fázisdiagram megfelelő *vetületei*.)
78. *oldal*: Itt (és később) előfordul a „vezetőképesség” és a „fajlagos vezetőképesség”. Ezeket elég régóta „vezetés” és „fajlagos vezetés” alakban kell írni (az ellenállás mintájára) a fizikai és kémiai szóhasználat, valamint a szabványok szerint is.
90. *oldal*: „Ezek az értékek 15 oldószernél gyengén korrelálhatók voltak ... oldhatósági paraméterekkel”. Helyesen: gyengén korreláltak.
98. *oldal*: Itt előfordul a „pöttyözött vonal” arra, ami máshol pontozott vonal, és egyébként is igen apró pontokból áll. Érdemes lenne egyféleképpen hívni ezt a dolgozatban.
100. *oldal*: Az „izokor” nagyon szokatlan átírása a görög *ισοχωρος* szónak. Magyarul *izokhor* vagy *izochor* átírást kell használni.
137. *oldal*: A „8. Első függelék: Negatív nyomású állapotok előállítása és mérése” fejezetcím egyik problémája az, hogy a függelékeket nem szokás folytatólagosan fejezetcímeként számozni,

hanem pl. F1. fejezetként. A másik probléma az, hogy „állapotokat mérni” nem lehet, csak mérhető *mennyiségeket*. A fentieknek megfelelő lehetséges fejezetcím pl. lehetne:  
„F1. Negatív nyomású állapotok előállítása és kísérleti tanulmányozása”

146-147. oldal: A függelékben a zárt alakban megadható állapotegyenleteket érdemes lett volna megadni. Nem informatív (és pontatlan) pl. a GERG esetén a „komplex formájú referencia állapotegyenlet, amely a földgázban előforduló anyagok tulajdonságait írja le” szöveg.

A bíráló feladata nemcsak a magyar szöveg lektorálása. Ha figyelmesen végigolvasta a dolgozatot, okvetlenül van néhány érdemi megjegyzése, kérdése is, amelyek túlmutatnak a magyar szöveg formai problémáin. Az alábbiakban leírom ezek közül a szerintem legfontosabbakat.

1. A dolgozaton végigvonul a 9. oldalon, az 1.3.–1.4. ábrán is látható jelölésmód és szóhasználat. Az állapotegyenleteken elhelyezkedő egyensúlyi pontok előtti és utáni intervallumot stabilnak, a folyadékoldali egyensúlyi pont és a minimum, illetve a gőzoldali egyensúlyi pont és a maximum közöttit metastabilnak nevezi a szerző – ahogy ez szokás. Ám a minimum és a maximum közötti negatív kompresszibilitású intervallumot „tiltott állapotok”, illetve „senki földje” névvel illeti. A 8. oldalon lévő szövegben még az is szerepel, hogy „Ezekkel az egyensúlyi termodinamika nem foglalkozik, nemlétezőnek tekinti őket.”

A termodinamikai tankönyvek és ezek nyomán a legtöbb közlemény is kétféle elnevezést használ a fázisdiagramok hasonló területére. A fent említett stabil/metastabil elnevezés mellett az *instabil* a megfelelő elnevezés a „tiltott állapotokra”. A(z egyensúlyi) termodinamika ezekkel is foglalkozik; kimondja róluk, hogy itt nem teljesül a fázisstabilitásra vonatkozó egyenlőtlenség, mert a kompresszibilitás negatív.

A másik használatos elnevezés szerint a folyadékoldali egyensúlyi pontnak megfelelő folyadék és a gőzoldali egyensúlyi pontnak megfelelő gőz *globális egyensúlyban* van, míg az ezen pontok közötti, de még pozitív kompresszibilitású állapotok *lokális* egyensúlyban lehetnek, de a globális egyensúly feltételei nem teljesülnek rájuk. (Itt a lokális szó egyetlen térfogathoz tartozó tulajdonságra utal, a globális pedig azt jelenti, hogy az adott lokális egyensúlyban lévő fázis két – az adott metastabil fázistól eltérő állapotú – fázisra szétválva stabilis egyensúlyba juthat.)

Mivel a szerző az első változat elnevezéseit használja, ezért „tiltott állapotok”, illetve „senki földje” helyett egyszerűen instabil állapotról kellene írnia. Ezt egyszer-egyszer megteszi, de éppen a témakör exponálásánál alapvetően nem ezt az elnevezést használja.

2. A 38–39. oldalon a 2.16. ábrára vonatkoztatva olvasható: „... a folytonos vonal egy ezekre illesztett *korrelációs függvény*, a szaggatott vonal által reprezentált eredményeket pedig a 2.18. egyenlet egy tangens hiperbolikus sűrűségprofilra vett alkalmazásával kaptuk”. Ugyanitt olvasható: „... az adatok *korrelációs függvény*nel való illesztéssel ... , illetve a Fuchs egyenlettel becsülve ...” Mit jelent itt a „korrelációs függvény”? A szövegből az sejthető, hogy a Fuchs-egyenletben szereplő függvényt is illesztették.
3. A 44. oldal a túlhevített folyékony víz gőzzé alakulásának leírását tartalmazza. A szerző a 2.20. egyenlet alapján úgy számítja ki a víz gőzzé váló hányadát, hogy a metastabil állapotból a stabil állapotba alakulással kapcsolatos *szabadentalpiát* elosztja a víz párolgási *entalpiájával*. Nem értem, miért nem szabadentalpiát oszt szabadentalpiával, illetve entalpiát entalpiával. A számítás alapját képező izobár változásoknál a  $\Delta G$  és a  $\Delta H$  értékei nem azonosak; egy  $\Delta(TS)$  tagban különböznek, ami nem zérus, így az alkalmazott számítások véleményem szerint hibás eredményre vezetnek.
4. Az 53–55. oldalon az üvegesedési hőmérséklet kísérleti meghatározásáról van szó. Ezzel kapcsolatban a szerző és munkatársai által kifejlesztett 3.3. egyenlet paramétereit határozták meg. Az 53. oldal szerint „A kísérleti adatok elemzésére és a paraméterek meghatározására (hasonlóan ahhoz, ahogy ezt a VFT és PVFT egyenleteknél is teszik) az egyenlet deriváltját használjuk”. Az 54. oldalon is szerepel „az illesztőparamétereket mindkét esetben a deriváltanalízisből vettük” szöveg. Az 55. oldalon pedig azt olvashatjuk, hogy „Az illesztést itt is *elősegíti*, ha a derivált értékeket illesztjük, majd az ott kapott értékeket használjuk a további leírásnál.”

A 3.3. egyenlet az üvegesedési hőmérsékletet egyszerű exponenciális függvénnyel írja le, a 3.4. pedig az üvegesedési hőmérséklet logaritmusának deriváltja, ami így egyszerű lineáris függvény. Ha grafikus módszerrel, vonalzóval határozzuk meg az egyenes meredekségét és tengelymetszetét, akkor valóban elősegíti a linearizálás az „illesztést”. Feltételezem azonban, hogy a szerzők nem vonalzót használtak, hanem numerikus eljárást és számítógépet, amelynek során a szokványos legkisebb négyzetes becslést végezték el. Ebben az esetben igen könnyű a rengeteg hozzáférhető programcsomag között olyanokat találni, (mostanában szinte mind ilyen), amely nemlineáris paraméterbecslést is el tud végezni. Akkor viszont ugyanolyan könnyű az eredeti, exponenciális függvény paramétereit is megbecsülni, mint a kiegyenesített változatét. A becsült paraméterek szempontjából azonban nagyon nem mindegy, milyen adatokból, milyen módszerrel becsüljük azokat. Egyrészt a deriválás mindig megnöveli a kísérleti hibákat, ezzel növelve a becsült paraméterek hibáját is. Másrészt a logaritmusfüggvény eltorzítja a hibákat, így a kapott becslés sem minimum variancia, sem torzítatlan nem lesz. Ráadásul ezekért a torzításokért extra számításokat (logaritmusképzés és deriválás) kellett végezni, teljesen feleslegesen.

Javaslom a szerzőnek, hogy mindig kerülje el a hibanövekedéssel és torzítással járó adattranszformációkat. Ebben az esetben is ezt kellett volna tennie.

Megjegyzem még, hogy a legkisebb négyzetes (vagy bármely más) becslésből nem „illesztőparamétereket”, hanem *illesztett* paramétereket kapunk.

5. A 3.8. alfejezet a hipotetikus folyadék-folyadék fázisátmenet nagyon ötletes kritikája. A 68. oldalon a szerző megállapítja, hogy „[a mi modellünk illesztésekor] a töréspontoknak nyoma sincs, az illesztés viszont hibahatáron belül leírja a mért adatokat”. Ez egy nagyon „érzékeny” megállapítás; érdemes lett volna illeszkedés jósága statisztikai hipotézisvizsgálattal is igazolni. Az illeszkedés vizuális vizsgálata alapján azt látom, hogy a teszt kvantitatív alapon is igazolhatná az állítást, még akkor is, ha egyes esetekben a két egyenes illeszkedése valamivel jobbnak tűnik.
6. A 70–71. és a 85. oldalon a hiperkritikus pontot a szerző extrémumnak nevezi. A szöveg tanúsága szerint „Ebben az esetben a görbének egy extrémuma van, kezdetben negatív meredekségű, majd egy minimum hőmérsékletet elérve pozitív meredekségűvé válik.” A kapcsolódó  $P-T$  diagramokról is kitűnik, hogy ez valóban így van. Viszont a folytonos görbék vízszintes tengely menti legalacsonyabb értékét nem nevezzük extrémumnak, lévén az a *független változó* lehetséges legkisebb értéke, azaz a függvény *tartójának* alsó határa. Ezzel szemben a 77. oldalon, a 4.9. ábrán is látható  $T-P$  diagram esetén már korrekt a minimum elnevezés. Megjegyzem még, hogy a minimum főnév, így *minimális* hőmérsékletet kellene írni.
7. A dolgozatban több helyen előfordul a becsült paraméterek  $X \pm \varepsilon$  alakban történő megadása. Az olvasó gyaníthatja, hogy a  $\pm$  jel után valamilyen bizonytalanságot kifejező értékek állnak, de a szerző sehol nem írja le, hogy azok pontosan mit jelentenek. A statisztikai analízis szokásai szerint itt *konfidencia-intervallumokat* kellene szerepeltetni (mivel azok a becslés alapját szolgáltató adatok számától is, a becslő függvényben szereplő többi paraméter számától is függetlenül jellemzik a bizonytalanságot), de ahhoz meg kellene adni a szignifikanciaszintet. Ha viszont az adott adatkészlet és becslő függvény alapján kapott varianciák négyzetgyökei („standard deviációk”), akkor azt is le kellene írni róluk.

A szerző néhány esetben ezeket a mennyiségeket „hiba” néven említi (pl. 100–101. oldal). Ez az elnevezés viszont egyrészt nem egyértelmű, másrészt ugyanezzel a „hiba” névvel említi a szerző a 103–111. oldalon azt az *eltérést* is, ami egy pontosabb és egy közelítő számítás között adódik. Ez utóbbi meghatározása legalább pontosan le van írva, bár ugyanúgy  $\pm$  jellel kerül kapcsolatba a közelítő képlettel számolt értékkel, mint a statisztikai becslésekhez  $\pm$  jellel kapcsolt bizonytalanságot kifejező mennyiségek (pl. 111. oldal).

8. A 83. oldalon olvashatjuk: „korábban már foglalkoztunk a mechanikai vagy más néven termodinamikai spinodálissal. ... Ez a fajta mind egy-, mind kétkomponensű folyadékknál megtalálható; jellemzője lehet pl.:  $\left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_T = 0$ ” Ezzel a megállapítással két probléma is van. Egyrészt a „spinodális” (értsd: lokális stabilitási határ) is „termodinamikai”, ahol a következő bekezdésben szereplő  $\left(\frac{\partial^2 G}{\partial x^2}\right)_{p, T} = 0$  stabilitási feltétel-határ (azaz extrémum-feltétel) éppen teljesül. Másrészt a  $\left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_T = 0$  feltétel nem jellemzője *lehet*, hanem *pontosan ez a jellemzője* a stabilitási határnak, azaz a spinodális pontnak.
9. Az 5.3 alfejezetben arról van szó, hogy a lineáris interpoláció az adott függvény igen gyors változásai miatt nem használható kellő pontosságú számításokra. Miért nem próbálkoztak interpolációs polinomokkal az ilyen tartományokon? Viszonylag kis fokszám esetén is sokkal jobb eredményt lehetne kapni. (Sok termodinamikai „táblázat” készül mostanában interpolációs polinomok segítségével. Ezeknek külön haszna a „sima” függvénylefutás, amely jobban biztosítja a mechanikai és termikus adatok termodinamikai koherenciáját is.)
10. A 138. oldalon szerepel, hogy „Ugyancsak lehetséges – bár nem elterjedt –, hogy már eleve *háromtengelyű* rezgést, húzást vagy lökéshullámot alkalmaznak, ekkor a nyomástenzor izotróp lenne.” Ez így nem teljesen pontos; a nyomástenzor csak akkor lenne izotróp, ha a három tengely irányában *azonos* húzó/nyomó erő lépne fel.

Végezetül fontosnak tartom leszögezni, hogy Dr. Imre Attila tudományos eredményeit a dolgozat magyar nyelvi és tipográfiai vonatkozásainak gyengéi sem, és a kérdéseimben felvetett problémák sem kisebbítik; azok ezzel együtt messzemenően megfelelnek az MTA doktora cím odaítéléséhez elvártaknak. Formai észrevételeim leginkább arra figyelmeztetik a szerzőt, hogy magyarul írt (és mondott) szövegeiben gondosabban ügyeljen a helyes szóhasználatra és megfogalmazásra, tudományos kézírataiban pedig alkalmazza a nemzetközileg egységes tipográfiai előírásokat.

Összefoglalva megállapítom, hogy a Dr. Imre Attila által benyújtott doktori munka jelentős eredeti tudományos eredményekkel gyarapította a napjainkban egyre inkább gyakorlati fontosságú fázisstabilitás témakör kutatási irányát. A tézisekben összefoglalt eredményeket új tudományos eredményeknek tartom. Mindezek alapján elfogadásra javaslom Imre Attilának az MTA doktora cím elnyerésére benyújtott kérelmét.

Budapest, 2015. február 3.

Dr. Keszei Ernő  
egyetemi tanár  
az MTA doktora