

Bírálat

Ható Zoltán okleveles informatikai vegyész

"Pórusos rendszerek adszorpció és diffúzió tulajdonságainak vizsgálata klasszikus molekuláris dinamikai szimulációkkal"

című PhD dolgozatáról

A dolgozat 144 oldalt, 137 hivatkozást tartalmaz. A dolgozat nyelvezete, az ábrák kivitelezése megfelel. A dolgozata alapvetően 11 rangos nemzetközi folyóiratban közölt cikkekre alapszik, amelyek közül 6-ban a jelölt első szerző. Ezek alapján a jelölt teljesíti(jelentősen túlteljesíti) a Pannon Egyetem doktori iskola követelményeit. Ezekben az esetekben ahogy már a kiváló munkát végző témavezetőjének a bírálatakor is leírtam a PhD címet gyakorlatilag minden procedúra nélkül oda lehetne adni. A jelölt a dolgozatban minden esetben az elvártnál lényegesen részletesebben elemzi az általa alkalmazott módszerek technikai problémáit is. Mint a dolgozat előbírálója kijelenthetem, hogy a korábbi kéréseimet a jelölt maradéktalanul kielégítette.

Kérdéseim:

1. Biztos, abban a jelölt, hogy az (m,n) típusú potenciálokat Lennard-Jones típusú potenciáloknak hívják? (9 oldal).
2. Mit gondol a jelölt a dipólusmomentum megváltozásában mekkora szerepet játszik a geometria változása (pl. víz esetén) ? (11 oldal)
3. Milyen gondolt okozhat a DMC és DCV módszerek csatlódása esetén, ha a rendszer nem ergodikus? (35 oldal).
4. A 41. egyenletbe mi a 2. tényező?
5. Mekkora volt, és hogy határozta meg a jelölt az X irányú áramlási sebességet (51 oldal) ?.
6. Mi alapján nevezhetünk egy szerkezetet kristályszerűnek? (70 oldal)
7. Milyen okokkal lehet megmagyarázni, hogy pl. a 27 D ábrán a két szélső csúcs nem egyenlő intenzitású?
8. 36. ábrán pontosabban kellene leírni mi látható az x-tengelyen.
9. Biztos bene a jelölt, hogy az 1 és a 2-es réteg között a víz illetve acetát ionok számát egyensúlyi értéknek lehet venni (95 oldal)?

A dolgozatot PhD dolgozatként való elfogadásra javaslom. A dolgozatban leírt tézispontokat elfogadom. A dolgozat véleményem szerint megérdemli sikeres védés után a kiválóan megfelelet minősítést.

Bakó Imre

Budapest 2019. október 31.