



Bírálat Ható Zoltán doktori disszertációjához

Ható Zoltán dolgozata, melyet a Pannon Egyetem Kémiai és Környezettudományi Doktori Iskolájába nyújtott be fokozatszerzés céljából, egy rendkívül impozáns munka, elsősorban a benne bemutatott eredmények mennyisége tekintetében, melyek akár két doktori dolgozathoz is elegendőek lennének. A témák és az alkalmazott módszerek sokszínűsége a jelölt szerteágazó szakmai felkészültségéről és különböző szimulációs technikák széles spektrumának mélyreható ismeretéről tesz tanúbizonyságot.

Az értekezés témája újszerű, a témaválasztás mind kísérleti, mind szimulációs szempontból megalapozott. Az irodalom feldolgozása és a tudományos előzmények bemutatása szakszerű, bár a hossza és a mélysége az kívánatostól valamivel elmarad, különösen ami a vizsgált rendszerek gyakorlati jelentőségének kellően alapos bemutatását illeti. Például a szilikalit kapcsán többet írhatott volna a „metal organic framework”-nek nevezett rendszerek egyre növekvő fontosságáról. A kaolinit kapcsán, mely nem csak az egyetlen fontos agyagásvány, szívesen olvastam volna további agyag- és csillámásványokról, valamint azok közet- illetve talajalkotó szerepéről. Az ioncsatornák bevezetése kicsit elnagyolt, pl. az ioncsatornákon keresztül történő transzport mellett egy sor további mechanizmus is szerepet játszik a sejtmembránon (és a sejtszervecskék membránján) keresztül történő anyagáramlásban.

A kutatási célokat mindemellett a jelölt a tudományos előzményekre támaszkodva, azoknak tükrében fogalmazta meg. A választott szimulációs módszerek korszerűek, bemutatásuk és alkalmazásuk szakszerű. Az eredmények tárgyalása az irodalomban publikált korábbi eredményekre alapozva adekvát módon történt, az azokból levont következtetések helytállóak és érdekesek. Az eredmények matematikai-statisztikai értékelése megfelelő, bár a több helyen hiányzó hibahatárok megnehezítik az eredmények fizikai relevanciájának megállapítását. A jelölt dolgozathoz kapcsolódó publikációs tevékenysége maximálisan kielégítő, az elvárt szintet sokszorosan meghaladja. A dolgozat jól szerkesztett, olvasmányos stílusú, ábrái és táblázatai világosak, hivatkozásai szabályosak.

A jelölt dolgozatában bemutatott alábbi eredményeket tekintem új eredményeknek:

- A DMC-LEMC módszer kifejlesztését;
- A PBD-MD módszer kifejlesztését;
- E két módszer sikeres alkalmazását membránon keresztül történő anyagáramlások szimulációjában;
- A kaolinit különböző vendégmolekulákkal létrehozott interkalált rendszereinek feltárt szerkezetét,
- különös tekintettel a kaolinit ammónium-acetát/víz elegyekkel létrehozott komplexeire;
- A valós méretű kaolinitlapok feltekeredésének megfigyelt mechanizmusait, illetve azok nagyfokú érzékenységét az elektrosztatikus kölcsönhatás leírásának apró részleteire;
- Az OmpF ioncsatorna szimulációban megfigyelt rektifikációs tulajdonságainak függését az alkalmazott modell felbonátástól és összetettségétől.

A doktori dolgozat nyilvános megvitatásához kérem a jelöltet az alábbi kérdések és észrevételek megválaszolására.

- A DMC-LEMC módszer alkalmazásánál a kémiai potenciálok iterációs képletében (41-es képlet) szerepel egy A factor. Ennek az értékét hogyan határozta meg?
- A munkája során fejlesztett és tesztelt DMC-LEMC módszer alkalmazása során hogy oszlott meg a gépidő a DMC és az LEMC között?
- DMC-LEMC módszer teljesítményének jobb megítéléséhez meg tudna nevezni egy referenciamódszert az összehasonlításban vizsgált másik két módszer közül? Mennyire releváns, hogy a módszere egyszer az egyik, míg máskor a másik módszerrel adott egyezőbb eredményt?
- A módszer alkalmazásakor egy adott cellában az anyagáram számításánál csak a balról belépő részecskék számát vette figyelembe. Tapasztalta esetleg, hogy másik irányból, az anyagárammal ellentétes irányból is beléptek volna részecskék?
- A 7-es ábrán bemutatott diffúziós állandó helyfüggése (a b komponensre) nem csak a membránon belül, de az előtt is (-2 és -1 között), a hozzáférési tartományban is erős fluktuációt mutat. Ennek mi az oka?
- A DMC-LEMC módszert csak egy egyszerű membránra tesztelte. Vannak elvi/technikai akadályai realisztikusabb rendszerek vizsgálatának is? Milyen esetekben, vagy mely rendszertípusoknál nyújthat ez a módszer alternatívát a korábbi DCV-alapú módszerekkel szemben?
- A PBD-MD módszerben a részecskeszám változtatását csak a nyomások beállítása befolyásolja. Ugyanakkor az adott elérni kívánt nyomás megfeleltethető egy tömbfázisbeli kémiai potenciállal, tehát végsősoron a nagykanonikus lépéseket ezen (nem feltétlenül ismert) kémiai potenciál alapján végzi. Levonhatjuk a következtetést, hogy a módszer mégiscsak egy nagykanonikus-szerű sokaságon dolgozik?
- Mit gondol, összekombinálható a PBD módszer a DMC-vel? Hol tudná elképzelni ezen módszer alkalmazását?
- Miért mennek telítésbe a 12.a ábrán mutatott átlagos transzporttávolságok? Ezeknek nem lineáris görbéknek kéne lenniük?
- Úgy gondolom, hogy célszerűbb lett volna elvégezni először a PBD-MD módszer validálását más bejáratott módszerrel (pl. DMC-LEMC-vel), és csak utána alkalmazni. Így nem tudhatja, hogy a kísérletektől való eltérés a módszer vagy a modell tökéletlenségének számlájára írható-e. Vagy ezt meg tudja ítélni valamilyen más módon?
- A 60. oldal tetején azt írja, hogy a membránvastagság megkétszerezése nem okozta a CO_2 áramának feléltre esését, és azt a CO_2 domináns, membránon való megkötődésével magyarázta. Ezt hogy érti?
- A vizes K^+ és ammónium-acetát oldatok kaolinitben történő interkalációjánál a kialakuló két réteg sűrűségprofilja észrevehetően és konzisztensen különböző: a vizek profilja magasabb csúcsot mutat a tetraéderes, míg az acetát ionok profilja fordítva, az oktaéderes rétegek mellett. Ez arra utalhat, hogy az egyes komponensek ezekkel a rétegekkel kedvezőbb kölcsönhatásokat alakíthatnak ki. Vizsgálta, hogy a két réteg összetételében mutatkoznak-e szisztematikus eltérések?
- A valós méretű kaolinit szemcsék szimulációjánál tapasztalta, hogy az egyes kaolinitlapok oldalirányba elmozdultak volna egymáshoz képest?



universität
wien

György Hantal, PhD
Computational Physics Group
University of Vienna
Sensengasse 8/9, 1090 Austria

-Hogyan győződött meg arról, hogy 2 ns elteltével ezen szimulációk már egyensúlyiak voltak? A hexil-amin exfoliációhoz vezetett a 2.5 ns-os szimuláció során, de honnan lehetünk abban biztosak, hogy ha tovább várnánk, nem tapasztalnánk a K-acetátban is egy réteg leválását?

-Elképzeltető, hogy azok az egyedi kaolinitlapok, amiknek a feltekeredését vizsgálta nem mutatnak annyira erős preferenciát egyik vagy másik irány tekintetében? Ennek megállapításához párhuzamos szimulációk elvégzése vagy valamiféle szabadenergia-profil adhatna választ.

-Mit gondol, mi lehet az oka annak, hogy a porin RREE mutánsának all-atom szimulációjával nem sikerült a rektifikációt igazolnia, míg a primitív modellel igen? Miért nyomja el a rektifikációt az atomi felbontás zaja?

A kritikák és kérdések ellenére úgy vélem, hogy a disszertáció magas színvonalú, és a fenti kérdések megvitatása után a jelöltnek a doktori cím megadható. A dolgozatot elfogadásra javaslom.

Bécs, 2019 október 31



Hantal György, PhD

