

BÍRÁLAT

FERTIG Dávid:

NANOPÓRUSOS ÉS ELEKTROREOLÓGIAI RENDSZEREK SZÁMÍTÓGÉPES SZIMULÁCIÓS VIZSGÁLATA

című Ph.D. értekezéséről

A dolgozat egyrészt részletesen ismerteti az ioncsatornák koncentrációprofiljainak és ionáramainak különböző körülmények közötti szisztematikus vizsgálatát, másrészt az elektroreológiai fluidumokban külső tér hatására kialakuló dipólusklaszterek viselkedését és annak szerkezeti-energetikai hátterét vizsgálja szimulációs módszerek segítségével.

A bemutatott és alkalmazott modellek terén egyértelműen a jelenleg elérhető legmodernebb megközelítés került bemutatásra a disszertációban nagyszámú, a témához szorosan kapcsolódó hivatkozással (szám szerint 143-at) együtt. A kiterjedt, de megfelelően tagolt dolgozat (teljes oldalszám: 106, 50 feletti ábraszám) mögött bőségesen dokumentált tudományos munka áll, az értekezés alapjául szolgáló tudományos közlemények közül, hét nemzetközileg elismert szakfolyóiratokban már megjelent. Így egyértelműen kijelenthető, hogy **az értekezés Pannon Egyetem Kémiai és Környezettudományi Doktori Iskola által támasztott szempontrendszernek megfelel.** Az értekezés szép kivitelű munka. Külön kiemelném az ábrák igényes grafikai kidolgozását, amely nagyban segíti a dolgozat témájának könnyebb megértését. Ebben az egyedi stílusú dolgozatban nem csak az elért új tudományos eredmények kerülnek bemutatásra, hanem a témában felvetődött további, tisztázásra váró szakmai kérdések is, ezzel kijelölve a potenciális jövőbeli kutatási irányokat.

A házi védés során opponenstársammal már felhívtuk a doktorjelölt figyelmét a szerkesztési és nyelvtani szempontból problematikus és javítandó részekre, amelyek a disszertációban majdnem teljesen javításra kerültek. Azonban még így is maradt a szövegben felesleges angol szakirodalmi kifejezés („Ezzel az úgynevezett *"coarse-graining"-gel nem veszítünk fontos tulajdonságokat*”). Kár érte, különösen, hogy erre előbírálóként már felhívtam a figyelmet.

Fontosnak tartom kiemelni, hogy a dolgozat mind az ioncsatorna anyag- és töltésáramai esetében, mind a fluidumokban kialakuló dipólusláncolatok tanulmányozásnál a lehetséges effektusokat szisztematikus számításokon alapuló aprólékosan elvégzett kiértékeléssel támasztja alá. Különböző modellszámítási szintű eredmények aprólékos összevetését

tartalmazza az értekezés és a doktorjelölt ezekből helytálló megállapításokat vont le. Kísérleti adatokkal a legközvetlenebb összehasonlítás az elektroreológiai fluidumokra volt végezhető, amit a dolgozat kellő alaposággal be is mutat. A mű szakmaiságához kétség sem fér.

Az értekezéshez szakmai kérdéseim a következők:

- (1) Definiálhatóak-e olyan matematikai kritériumok, amelyek alapján el lehet dönteni egy paraméterről, hogy az megfelelő vagy jó skálaparaméter? Esetleg ki lehet-e jelölni egy tartományt, ahol egy adott paraméter jó skálaparaméterként viselkedik?
- (2) A kationok szelektivitása (S_+) a Du_1 , valamint a Du_2 függvényében szigmoid függvényre hasonlít (2.4.7. ábra, 41. oldal). Sor került-e ilyen illesztésre, illetve az illesztett paraméterek segítségével új skálaparaméter sejtés megfogalmazására?
- (3) Az elektroreológiai fluidum szimulációk esetében a biexponenciális illesztéssel két időállandó (τ_1 és τ_2) került meghatározásra, különböző mennyiségekből ($u^{\text{dip}}(t^*)$, $D^*(t^*)$ és $\Delta\epsilon(t^*)$). Lehet-e a másik két illesztési paraméterhez (A és B) is fizikai értelmet rendelni? Mi mondható el a bemutatott biexponenciális függvények illesztésének jóságáról? Megállapítható-e, hogy melyik időállandó meghatározás a robosztusabb? Mekkora ezen illesztett paraméterek hibája?

Fenti kérdések a téma érdekességét és potenciális kutatási irányok nagy számát mutatja, valamint a kíváncsiságom mérőszáma, nem érintik a dolgozat alapvető értékeit. A megfogalmazott eredményeket új eredményként ismerem el. Mindenképpen javaslom a dolgozat nyilvános vitára bocsátását, illetve sikeres védelem esetén pedig a doktori fokozat odaítélését. Röviden: **Minősítés: elfogadásra javaslom.**

Miskolc, 2021. május 18.

Dr. Szőri Milán
egyetemi docens
Miskolci Egyetem
Kémiai Intézet