

Bírálat
**“Ionok és dielektrikumok ionhomogén rendszereinek
Monte Carlo szimuláció”**
Boda Dezső
MTA Doktori dolgozat.

A dolgozat 197 oldalt, 316 hivatkozást tartalmaz. A dolgozat külalakja, szerkesztése és az ábrák minősége jó, helyesírási hibát alig találni benne. A dolgozat 50 igen magas impakt faktorú lapban megjelent publikációra épül. A dolgozat könnyen olvasható, azonban az óriási anyagmennyiségre való tekintettel néhol igen nagy logikai ugrások találhatók benne. Én javasolnám a jelöltnek, hogy a dolgozatot alkotó két fő téma közül akármelyiket könyv alakban jelentesse meg részletesebb kifejtéssel.

A dolgozat a Veszprémi Egyetem Fizikai tanszékén folyó munka folyamatába illik bele, ahol elméleti módszerekkel tanulmányozzák az atomos és molekuláris folyadékok termodinamikai, szerkezeti tulajdonságait. A dolgozatban ezen Liszi János professzor által elkezdett munka kiterjesztése olvasható inhomogén rendszerekre. A dolgozatot olvasva azonnal szembetűnő, hogy a jelölt milyen otthonosan mozog a Monte Carlo szimuláció alkalmazásaiban (módszerfejlesztéstől az alkalmazásig). A dolgozatban az oldószer a víz minden esetben implicit módon van figyelembe véve. Milyen esetekben okozhat ez nagy problémát? Hogyan értelmezhetjük a 60-80 relatív dielektromos állandót olyan esetekben ahol a rendelkezésre álló térfogat, perturbáló tényezők biztosan megzavarják a víz 3D hidrogénkötéses szerkezetét?

A dolgozat első és második fejezetében megtudhatjuk, hogy a klasszikus elektrodinamika milyen új lehetőségeket nyújthat azok számára akik értő kézzel nyúlnak hozzá. Megmutatja, milyen módon elehet az indukált töltést illetve hatását figyelembe venni különböző határfeltételek esetén. A harmadik fejezetben a dolgozatban alkalmazott szimulációs technikákról, mintavételezési módszerekről kaphatunk részletes képet. Milyen módon gyengülnek a Coulomb kölcsönhatások alacsony hőmérsékleten (41. oldal)? A negyedik fejezetben tömbfázisú elektrolitok kémiai potenciáljának számítását tárgyalja a szerző. Eredményei azt mutatják hogy az ún. II+IV elmélet alkalmazásával igen jó egyezést érhetünk el a kísérlettel Li ill. NaCl, illetve kétértékű ionok esetén.

Tudna a jelölt valamiféle lényeges szerkezeti különbséget mondani arra, hogy a K és CsCl esetében miért lényegesen nagyobb az eltérés a kísérlettől. ? Milyen lényeges különbség lehet a Na és CaCl₂ rendszerek között szerkezeti szempontból, hiszen a Na⁺ és Ca²⁺ ionok mérete igen hasonló?

Az ötödik fejezetben az elektromos kettősréteg tulajdonságaival foglalkozik a jelölt. Mi az oka, hogy a 2:1 elektrolitok(PZC) esetén az elméletek nem megfelelően működnek?

A hatodik fejezetben az ioncsatornák szelektivitását vizsgálja a jelölt. Véleményem szerint bővebben kifejtve ez is elég lett volna az MTA Doktori címének megszerzésének céljából.

A fejezetben meggyőző módon mutatja be a jelölt, hogy milyen módon lehet magyarázni az ioncsatornák Ca/Na szelektivitását illetve Almers-McClesky kísérletet. Mit gondol a jelölt hol vannak a módszerének korlátai? Ebben a fejezetben a jelölt stílusa kissé túl személyessé válik

Összefoglalva a dolgozat egésze és a jelölt munkássága messzemenőleg kielégíti az MTA doktori cím elnyerésével szemben támasztott követelményeket. Javaslom a nyilvános vita kitűzését, és sikeres védelem esetén a cím odaítélését.

Budapest 2013 február 1.

Bakó Imre