

Bírálat

Kristóf Tamás „Klasszikus molekuláris szimulációk: módszerfejlesztések és predikciók” című MTA doktori dolgozatáról

A kémia hagyományosan egy kísérleti tudomány, de a 20. század második felében elindult a kémiai rendszerekre alkalmazható elméleti módszerek fejlesztése is. A folyamatos módszerfejlesztéseknek és a számítástechnika rohamos fejlődésének köszönhetően a 21. századra az elméleti kémiai egyenrangú partnere lett a kísérletnek. Számos esetben a számítások kulcsszerepet játszatnak a kísérleti adatok értelmezése során, sőt sok esetben az elmélet mélyebb betekintést enged a kémiai rendszerek atomi szintű világába, mint a kísérlet. Továbbá azt is fontos hangsúlyozni, hogy a modern számítási módszerek sokszor megbízható predikciókkal is szolgálnak, és az elméleti eredmények önmagukban, a kapcsolódó kísérletek nélkül is megállják a helyüket. Kisebb kémiai rendszereket manapság nagy pontossággal tudunk leírni a kvantummechanika alkalmazásával. A kvantummechanika használata elsősorban az elektronok mozgásának leírására fontos, az elektronoknál több nagyságrenddel nehezebb atommagok mozgását már a klasszikus mechanika törvényei is általában jó pontossággal leírják. Természetesen a magmozgás leírása során sem kerülhetjük meg az elektronokat, mert az elektronok mozgásból adódik az a potenciálisenergia-felület, amely az atommagokat mozgató erőket adja. A kölcsönhatási potenciál pontossága nagyban befolyásolja a magmozgás leírásának pontosságát. Kis rendszerek esetén a potenciált megkaphatjuk kvantumkémiai számítások alkalmazásával, nagyobb rendszerek esetén általában empirikus, kvantumkémiai és/vagy kísérleti adatokra optimált paramétereket tartalmazó potenciálfüggvényeket használunk.

Kristóf Tamás munkássága is az elméleti kémiai területéhez tartozik. Kutatásai során általában nagyméretű kémiai rendszerek szimulációjával foglalkozik, ahol a kölcsönhatási potenciál pontos kvantumkémiai számítására nincs lehetőség. A Jelölt elsősorban molekuladinamikai és Monte Carlo szimulációkat végez, amelyek során az atommagokat klasszikusan írja le és a kölcsönhatási potenciált empirikus függvényekkel közelíti.

Az MTMT szerint a Jelöltnek 86 közleménye jelent meg SCI folyóiratokban, amelyből 69 a tudományos fokozat megszerzése óta került publikálásra. A 86 cikkből 48-ban levelező szerző és a publikációira ezidáig 925 független hivatkozás érkezett. A Hirsch-indexe 21. Az évenkénti hivatkozásainak száma emelkedő tendenciát mutat, az utóbbi években körülbelül 100 hivatkozást kap, a Google Tudós szerint idén (2023. november 10-én) már 161 hivatkozásnál tart. Ez a publikációs teljesítmény – figyelembe véve a Jelölt életkorát – nem nevezhető kiemelkedőnek nemzetközi mércével mérve, de az MTA doktora cím elnyeréséhez szükséges szintet bőven eléri, sőt túl is teljesíti.

A dolgozat igen terjedelmes, összesen 179 számozott oldalból áll, bár az utolsó közel 30 oldal a referenciákat tartalmazza. Egy rövid általános bevezetés után áttér a három fő fejezetre, amelyek bemutatják a (1) fluidumok fázisegyensúlyainak számítását klasszikus molekuláris szimulációkkal és a kapcsolódó módszertani fejlesztéseket, a (2) molekuláris szimulációkat geometriai kényszerek mellett: adszorpció és stacionárius anyagtranszport tanulmányozását nanopórusos rendszerekben és a (3) kaolinit interkalációjának és exfoliációjának szimulációját. Ez a három fejezet több mint 120 oldat fed le. Minden egyes nagy fejezet egy rövid irodalmi áttekintéssel kezdődik, majd jól tagoltan bemutatja a saját eredményeket. A dolgozat egy rövid összefoglalással, egy részletes függelékkel, köszönetnyilvánítással és a korábban említett irodalomjegyzékkel zárul. A közel 20 oldalas függelék az alkalmazott módszerek elméleti alapjait mutatja be, ami hasznos a témában kevésbé járatos olvasó számára. A dolgozat 41 publikációra épül, amelyből 18-nak Kristóf Tamás az első szerzője. A 41 cikkén kívül még felsorol a Jelölt 13 további saját publikációt, amelyek szintén kapcsolódnak a dolgozat témaköréhez. A dolgozat felépítése arányos és igényes, elírásokat csak elhanyagolható számban tartalmaz. A dolgozat olvasása közben az a véleményem alakult ki, hogy a Jelölt jól ismeri az általa művelt tudományterületet és a szaknyelvet helyesen használja. Az alkalmazott módszerek elméleti alapjainak függelékben történő bemutatását is jó ötletnek tartom. Bizonyos ábrák lehetnek volna színesebbek a modern trendeknek megfelelően. A dolgozat eredményei mögött álló 41 publikáció a szakterület rangos nemzetközi folyóirataiban jelent meg. A fentiek alapján véleményem szerint a dolgozat mindenben megfelel az MTA doktora cím követelményeinek.

Kristóf Tamás az eredményeit 10 tézispontban foglalta össze, amelyek alapján elmondhatjuk, hogy

1. Felismerték a Gibbs-sokaságú Monte Carlo (GEMC) szimulációk általánosításának és tipizálásának lehetőségeit többkomponensű rendszerekre, illetve egyes változataikat kombinálták extrapolációs módszerekkel.
2. Nagy számításigényű, összetett GEMC szimulációkat alkalmaztak töltött és töltetlen merev gömbökből álló modellrendszerek fázisegyensúlyainak feltérképezésére.
3. Realisztikus kölcsönhatási modellek alkalmazásával predikciókat végeztek anyagtudományi vagy technológiai szempontból érdekes, illetve klasszikus molekuláris szimulációkkal kevésbé vizsgált anyagi rendszerekre.
4. A GEMC szimulációkat alkalmaztak polidiszperz rendszerek fluidum-fluidum egyensúlyainak vizsgálatára.
5. Szimulációs predikciókat végeztek elegyadszorpciós egyensúlyokra NaA zeoliton és tisztán szilícium-dioxidos zeolitokon, illetve párhuzamosan foglalkoztak az NaA zeolit potenciálmodelljének fejlesztésével.

6. Új módszereket dolgoztak ki és teszteltek stacionárius membrántranszport MD és MC alapú atomi szimulációira.
7. Kidolgoztak egy új dinamikus MC (DMC) szimulációs eljárást, amelyet redukált modellekkel leírt biológiai ioncsatornák viselkedésének vizsgálatára alkalmaztak.
8. A kaolinit interkalációjára vonatkozó klasszikus szimulációik a vendégmolekulák bázislapok közé beépülésének atomi szintű modellezésére és a kialakult szerkezetek elemzésére annak idején az irodalomban az elsők között jelentek meg.
9. Reálisabb, flexibilis potenciálmodellek (ld. CHARMM potenciálmodell-rendszer; a kaolinitra az INTERFACE potenciálmodell) és NpT MD szimulációk használatával is tanulmányozták a kaolinit interkalációs viselkedését ismert interkalálószerkek jelenlétében.
10. Nagy számításigényű atomi felbontású szimulációkkal tanulmányozták a kaolinit szemcsékről bekövetkező lapleválás lehetőségét és a szabad lapok geometriáját.

Figyelembe véve a tézispontok részletesebb kifejtését, mind a 10 pontot új tudományos eredménynek tekintem és elfogadom.

A Jelölt kutatási témájához kapcsolódóan a következő érdeklődő kérdéseket teszem fel:

1. Módszerfejlesztési eredményeiket mennyire használják más kutatócsoportok?
2. Véleményem szerint a szimulációk pontosságát elsősorban az alkalmazott potenciálfüggvény pontossága szabja meg. Egyetért-e ezzel az állítással, és mi volt az ezzel kapcsolatos tapasztalata a kutatásai során vizsgált rendszerek esetében?
3. Véleménye szerint mekkora a jelentősége a klasszikus szimulációkban elhanyagolt kvantumeffektusoknak a dolgozatban tárgyalt rendszerek esetén?
4. Van-e lehetőség tisztán elméleti adatokon alapuló potenciálfüggvények kifejlesztésére a kutatásai során vizsgált rendszerek esetén?

A dolgozat és a benne leírt tudományos eredmények, valamint a kapcsolódó publikációk alapján javaslom a nyilvános vita kiírását és sikeres védelem esetén az MTA doktora cím odaítélését.

Szeged, 2023. november 10.



Czákó Gábor
az MTA doktora