

Bírálat Dr. Kristóf Tamás *Klasszikus molekuláris szimulációk: módszerfejlesztések és predikciók* című MTA doktori értekezéséhez.

Az értekezés több mint húsz éves, rendkívül eredményes kutatómunkát foglal össze. Az eredmények értékesek és újdonságok, a publikációk a szakma rangos folyóirataiban jelentek meg és sokuk igen figyelemreméltóan idézett. Kristóf Tamás neves hazai és külföldi kutatókkal dolgozik sikeres együttműködésekben. Az értekezésben bemutatott eredményeket mind új tudományos eredménynek ismerem el. A tézispontokat elfogadom. Nyilatkozom, hogy a doktori munka tudományos eredményeit elegendőnek tartom az MTA doktori cím megszerzéséhez és javaslom a nyilvános védés kitűzését. Az eredmények és az értekezés alapján javaslom az MTA doktori cím odaítélését.

Az értekezés 3 nagy fejezetében foglalja össze Kristóf Tamás azokat az eredményeit, amelyek alapján az MTA doktori címre pályázik. A megértést egy függelék is segíti, ahol a használt módszerek lényegét és fontosabb technikai aspektusait mutatja be. Az értekezés rendkívül kellemes stílusban, kifejezetten olvasmányosan van megírva, értelemzavaró hiba nem fordult elő. A fejezetek megértését részletes, alapos bevezetések segítik. Az ábrák is legtöbbször igen jól sikerültek; nekem néha az ábrákba illesztett modellszerkezetek túl kicsik voltak, de ez persze ízlés kérdése leginkább.

Az első nagy fejezetben leginkább módszerfejlesztésekről van szó. Az irodalmi összefoglaló alapos és részletes; érthető belőle, hogy milyen irányokban volt érdemes elindulni és milyen okokból. A kutatások során többkomponensű rendszerekre fejlesztettek új Monte-Carlo módszereket, ahol a módszertani újdonság a különböző lehetséges alapsokaságokra vonatkozó MC kritérium meghatározása és aztán az eljárás használata volt. Sokféle problémára lehetett az eljárásokat alkalmazni, amelyek között sok komoly technológiai relevanciával is rendelkezik. Ilyenek például a több komponenst tartalmazó rendszerek fázisegyensúlyainak vizsgálata. Egy másik, a bíráló számára nagyon érdekes vizsgálat mágneses folyadékok fázisegyensúlyának a vizsgálata volt. A fejezettel kapcsolatban az a kérdésem, hogy az egyes sokaságokhoz tartozó, azok egyensúlyát jellemző termodinamikai potenciálfüggvényt érdemes lehet-e kiszámolni és annak változását, konvergenciáját követni a szimulációk során?

A következő két nagy fejezet a szimulációk változatos alkalmazásait mutatja be nanopórusos anyagokban. A 3. fejezet zeolitokban és ioncsatornáknál zajló adszorpciós és stacionárius anyagtranszport folyamatok szimulációit mutatja be. Ezenkívül itt is szerepel néhány módszerfejlesztés és ezek alkalmazása. Mások mellett NaA és MFI típusú zeolitokkal kapcsolatban többféle kutatás is zajlott, számomra a legizgalmasabbak azok a szimulációs vizsgálatok, ahol ipari relevanciával bíró gázelegyek zeoliton történő lehetséges szétválasztásának szelektivitását, szelektivitásait lehet meghatározni, vagy megbecsülni. Ez a fejezet sok érdekes gyakorlati kérdéssel is szembesíti az olvasót, ezért itt több kérdés is megfogalmazódott:

i) A potenciálfejlesztés, a meglévő potenciálok hangolása évtizedek óta egy bevett praktika mind a zeolitszimulációkba, mind a bioszimulációkban. Bizonyára egy igazi klisé az ezzel kapcsolatos kérdésem: milyen kritériumok alapján lehet megállapítani, hogy a kapott paraméter-készlet használható-e szélesebb körben, mint a fejlesztés területe?

ii) A H_2S - kistömegű szénhidrogének elegye esetén érdekes szelektivitási eredményeket kaptak az adszorpciós szelektivitásokra, amelyek gyakorlati haszonnal is járhatnak. Van-e elképzelés arra, hogy milyen gyakorlati, folytonos üzemű elválasztásnak lehetnek ezek a szimulációk a hasznára?

iii) A metán-hidrogén elegy MFI zeoliton történő elválasztásának szimulációjából született eredmény magyarázata nagyon frappáns: az erősebben adszorbeálódó, de lomhább CH_4 molekula lemarad, a fürge, gyengébben adszorbeálódó H_2 pedig hamarabb átjut a csatornákon. Ugyanez már nem áll meg a CO_2 - H_2 keverékre (egy másik cikk alapján), ott a CO_2 a győztes, mivel az adszorbeálódott CO_2 blokkolja a H_2 -t. Lehet-e ezek alapján stratégiákat javasolni a H_2 kinyerésére vagy éppen elválasztására (hiszen ennek hatalmas gyakorlati jelentősége van)?

iv) A dinamikus MC szimuláció egy igazi *tour de force*, és komoly erőfeszítések vannak amögött, hogy az MD-t helyettesítsék MC-vel. Ami problémát látok az az, hogy ami nyerhető a kisebb számításigényen (kevesebb számítás az egyes lépésekben) az elveszik az időfelbontáson. Ugyanakkor az MD számítások felbontását is lehet akár térben, akár időben durvítani (coarse graining). Mi az unikális előnye a dinamikus MC-nek az MD-vel szemben?

Az utolsó nagy fejezet központi motívuma a kaolinit és az abban történő adszorpciós vizsgálatok. Itt is többször visszatérő motívum, hogy a potenciálmodellek vizsgálata és egy konkrét jelenség vizsgálata összekapcsolódik, egy projektben zajlik. Ez gyakran azzal a veszéllyel jár, hogy nem lehet eldönteni, hogy a kísérlettel való esetleges jó egyezés alapja a mélyebben fekvő okok, a jelenség alapjául szolgáló fizika modellbe való illesztése, vagy pedig egy hibás modell. Ez egy általános megjegyzés, amiről szeretném Kristóf Tamás véleményét megismerni. Ebben a fejezetben is nagyon sok érdekes jelenséget vizsgálnak, amiknek gyakorlati hasznuk is van, ezért is különösen értékesnek tartom az eredményeket. Kiemelkedően érdekesnek tartom a lapleválási szimulációkat, nemcsak azért, mert 100 milliós nagyságrendű volt az atomszám a szimulációkban, hanem azért is, mert igen meggyőzőnek találtam az eredményeket. Hasonló érdeklődéssel olvastam a kaolinitlapok lehetséges pöndörödéseinek szimulációjáról, és a begömbülések potenciálmodelltől való függéseiről. A kérdésem az, hogy mennyire aggasztó a szimulált gömbülések feltűnően nagy érzékenysége a használt potenciálmodellre? Másként megfogalmazva, mi az igazság a gömbüléssel kapcsolatban? Másik, szintén idevágó kérdés: ha a kísérletek alapján nem zárható ki a kétféle irányultságú begömbülés, akkor ezt majd melyik potenciálmodell fogja reprodukálni?

Összefoglalva: Kristóf Tamás fontos eredményei és azok jelentősége alapján, valamint a kiválóan elkészített értekezése alapján javaslom az MTA doktori cím odaítélését. Az értekezést a nyilvános vitára alkalmasnak tartom.

Budapest, 2023 november 1.



Stirling András