

A bírálóbizottság értékelése

A bizottság az alábbi 10 tézisben összefoglalt eredmények mind a 10 pontját új tudományos eredménynek tekinti és elfogadta.

1. A Gibbs-sokaságú Monte Carlo (GEMC) szimulációk általánosítása és tipizálása többkomponensű rendszerekre, illetve egyes változatainak kombinációja extrapolációs módszerekkel.
2. Nagy számításigényű, összetett GEMC szimulációk alkalmazása töltött és töltetlen merev gömbökből álló modellrendszerek fázisegyensúlyainak feltérképezésére.
3. Szimulációs predikciók realisztikus kölcsönhatási modellek alkalmazásával anyagtudományi vagy technológiai szempontból érdekes, illetve klasszikus molekuláris szimulációkkal kevésbé vizsgált anyagi rendszerekre.
4. A GEMC szimulációk alkalmazása polidiszperz rendszerek fluidum-fluidum egyensúlyainak vizsgálatára.
5. Szimulációs predikciók elegyadszorpciók egyensúlyokra NaA zeoliton és tisztán szilícium-dioxidos zeolitokon, illetve párhuzamosan az NaA zeolit potenciálmodelljének fejlesztése.
6. Új módszerek kidolgozása és tesztelése stacionárius membrántranszport molekuladinamikai (MD) és MC alapú atomi szimulációira.
7. Egy új dinamikus MC (DMC) szimulációs eljárás kidolgozása, amelyet redukált modellekkel leírt biológiai ioncsatornák viselkedésének vizsgálatára alkalmaztak.
8. A kaolinit interkalációjára vonatkozó klasszikus szimulációk a vendégmolekulák bázislapok közé beépülésének atomi szintű modellezésére és a kialakult szerkezetek elemzésére.
9. Reálisabb, flexibilis potenciálmodellek és NpT MD szimulációk használata a kaolinit interkalációs viselkedésének modellezésére ismert interkalálószerkezetek jelenlétében.

10. Nagy számításigényű atomi felbontású szimulációk a kaolinit szemcsékről bekövetkező lapleválás és a szabad lapok geometriájának tanulmányozására.