

A bíráló bizottság értékelése

Szalai István dipoláris fluidumok esetében megállapította az ú.n. Mean Spherical Approximation (MSA) érvényességi tartományát a folyadék-gőz fázisegyensúly, az állapotegyenlet és a dielektrikus permittivitás leírására. Értékes elméletet dolgozott ki a Yukawa-fluidumok folyadék-gőz egyensúlyára és polarizációjának térerősség-függésére. Elméleti javítást adott a dipoláris fluidumok termodinamikai leírására.

Kiterjesztette a ferrofluidumokra vonatkozó elméletet nagy mágneses terekre és kidolgozta az ilyen folyadékok Yukawa potenciális kölcsönhatáson alapuló termodinamikáját, és az eredményekkel az elvégzett Monte Carlo szimulációknál kitűnő egyezést talált. A nagyterű közelítést kiterjesztette polidiszperz mágneses fluidumok, illetve mágneses filmek szabadenergiájának meghatározására. Sűrűségfukcionál-elmélet segítségével meghatározta az inhomogén mágneses folyadékok fázisegyensúlyát.

Meghatározta a liotrop folyadékkristályok elektromos térbeli fázisdiagramját. Elméleti leírást dolgozott ki különböző alakú molekulák esetére kidolgozott kétdimenziós folyadékkristályok fázisviszonyaira. Perturbatív elméletet adott a folyadékkristályok mezofázisaira, és megmutatta, hogy nagy sűrűségeken a nematikus fázis másodrendű átalakulással ferroelektromos-nematikus fázissá alakulhat.

Különböző elméleti megközelítések ötvöztetésével sikeresen továbbfejlesztette a Monte Carlo szimulációs módszert, amely így alkalmasabbá vált fázisegyensúlyok, többkomponensű rendszerek valamint mágneses fluidumok vizsgálatára.

Különböző alakú és méretű nanopórusokba zárt elektrolitok egyensúlyi és nemegyensúlyi molekuladinamikai szimulációjával transzportegyütthatókat határozott meg, és kiszámította ezek függését a pórusok paramétereitől. Rámutatott, hogy hogyan befolyásolja a pórus a folyadék szerkezetét.

Szalai István munkássága eredeti, nemzetközileg is elismert eredményekkel gazdagította a komplex folyadékok statisztikus fizikai leírását. A jelölt a komplex folyadékok elméletének és számítógépes szimulációs módszereinek széleskörű alkalmazásával és továbbfejlesztésével jelentősen hozzájárult a gyakorlat és az élő rendszerek szempontjából is fontos dipoláris molekuláris fluidumok, mágneses folyadékok és folyadékkristályok tulajdonságainak és fázisviszonyainak tisztázásához.