

A bírálóbizottság értékelése

A Bizottság álláspontja szerint Boda Dezső munkássága kiemelkedő az ionhomogén elektrolit rendszerek Monte-Carlo módszerrel történő szimulációja terén. Az általa tanulmányozott minden főbb ionhomogén rendszer esetén: tömbfázisú elektrolit, elektrokémiai kettősréteg és biológiai ioncsatornák, illetve az alkalmazott vizsgálati módszerek fejlesztésében is új tudományos eredményeket ért el. Ennek megfelelően a Bizottság a Jelölt minden tézispontját új tudományos eredményként fogadja el. Külön kiemelendő biológiai kalcium és nátriumcsatornáknál kísérletileg észlelt iontranszport jelenségek sikeres szimulációja és elméleti értelmezése. A jelölt legfontosabb eredményei:

Új, nagyobb pontosságú módszert dolgozott ki az indukált töltések számítására (Induced Charge Computation, ICC).

A szimulációs módszert alkalmassá tette az ionok eltérő dielektromos állandójú közegekbe való átlépésének vizsgálatára. Ez a módszerfejlesztés tette lehetővé a Monte Carlo módszerek alkalmazását biológiai ioncsatornák vizsgálatára.

A nagykanonikus Monte Carlo (GCMC) szimuláción alapuló iteratív módszert vezetett be a kémiai potenciálok meghatározására.

Sikeresen alkalmazta a töltött és polarizált síkok módszerét az elektromos kettősréteg geometriában a központi cellákon kívül eső töltések és dipólusok hatásának számítására.

Bevezette a Nernst-Planck egyenletnek egy integrált alakját, amely lehetőséget adott az egyensúlyi GCMC szimulációk által szolgáltatott koncentrációprofilok felhasználásával az ioncsatornának különböző ionokra vonatkozó vezetésének számítására.

Bizonyította, hogy a tömbfázisú elektrolit közepes aktivitási együtthatójának nem monoton koncentrációfüggő viselkedése magyarázható a koncentrációfüggő dielektromos állandó használatával.

Megfelelő módszerek alkalmazásával sikeresen reprodukálta szimulációkkal a kettősréteg kapacitásának anomális hőmérsékletfüggését és megállapította annak okát.

Vizsgálatai kiderítették, hogy az elektromos kettősréteg esetében a belső réteg és az elektrolit határfelületén indukált töltés jelenik meg, amelyet Gouy-Chapman-elmélet nem vesz figyelembe. Ezt korrigálandó egy új egyenletet vezetett be a belső réteg kapacitásának leírására.

Sikeresen alkalmazta a Monte Carlo szimulációt elektromos kettős rétegek vizsgálatára az ion-dipólus modell esetében.

Az általa továbbfejlesztett szimulációs módszerek alkalmasnak bizonyultak a biológiai kalcium- és nátriumcsatornák esetében kísérletileg tapasztalt blokkolási jelenségek elméleti leírására. Ezek alapján azonosította az ionszelektivitást indukáló mechanizmust és megállapította a különböző szerkezeti paraméterek hatását a csatorna szelektivitására.