

Opponensi vélemény

Gali Ádám “Sűrűségfunkcionál elméleten alapuló elektronszerkezet-számítások a gyakorlatban fontos ponthibákra szilíciumkarbidban, szilíciumkarbid nanocsövekben és gyémántban” című akadémiai doktori értekezéséről

Gali Ádám értekezése aktuális, a nemzetközi tudományos érdeklődés középpontjában álló kutatásokról számol be.

Az értekezés a bevezetésen kívül négy fejezetből áll. A második fejezet áttekinti az értekezésben alkalmazott módszereket. A harmadik fejezet tárgyalja a szilíciumkarbid tömbben fellépő hibákkal kapcsolatos eredményeket. A negyedik fejezet az egyfalú szilíciumkarbid nanocsövek adalékolását vizsgálja. Az ötödik fejezet témája a nitrogén-vakancia hiba és a kvantumbit megvalósítása gyémántban.

A jelölt elektronszerkezet-számításokat végzett a gyakorlatban fontos ponthibákra. Kiemelendő, hogy először alkalmazott hibrid funkcionálokat és ez lehetővé tette, hogy a korábbiaknál sokkal pontosabb eredményeket érjen el. Megjósolta pl. két-szénatomos antisite hiba jelenlétét szilíciumkarbidban. Ezt a feltevését később kísérletek igazolták.

Vizsgálatait kiterjesztette egyfalú szilíciumkarbid nanocsövekre és jelentős eredményeket ért el ezen nanocsövek adalékolásával kapcsolatosan. Különbösen érdekesek a nitrogén-vakanciával kapcsolatos számítások. A jelölt megadott egy olyan protokollt, amellyel elvileg lehetséges a semleges nitrogén-vakancia hiba gerjesztett kvartett elektronspinjét és a környező hiperfinomaktív izotópok magspinjét kvantumbit megvalósítása használni.

A jelölt eredményei jelentős nemzetközi visszhangot váltottak ki. Összefoglaló cikkek írására és előadások tartására kérték fel.

A doktori értekezés logikusan felépített munka, mely részletesen ismerteti a kutatás háttérét és az elért eredményeket. Néhol azonban aránytalan, pontatlan és vannak hibák is benne. Nem világos, hogy miért tárgyalja részletesen a ma már csak történeti jelentőségű Hartree-módszert. A jelölt még a Hartree-egyenleteket is levezeti, miközben a Kohn-Sham-egyenletek levezetésére csak utalás történik, holott ezen egyenletek megoldásából származnak az értekezés eredményei.

A (2.70) képlet hibás. Összehasonlítva a (2.61) és (2.62) képletekkel rögtön látszik, hogy a (2.70) képletből az utolsó tag törlendő. Nem szerencsés a (2.71) képlet kétrészecske kölcsönhatási függvényét ugyanazzal a betűvel jelölni, mint a teljes kétrészecske kölcsönhatási operátort a (2.60) képletben. A (2.73) képlet hibás, a jobb oldalról hiányzik a klasszikus Coulomb-energia. (A (2.61) és (2.64) képletekből is látszik.) A (2.85) képletnél jó lett volna jelezni, hogy az lokális esetre vonatkozik.

A 43. oldalon “.. a legmagasabb betöltött állapot a rendszer valódi ionizációs energiája ...” mondatból kimaradt az egyrészecske energia. Néhány sorral lejjebb pontatlan a fogalmazás: “A többi sajátértékre viszont nem garantált a pontos eredmény a Kohn-Sham-elméleten belül.” Itt nyilván arra utalt a jelölt, hogy a Kohn-Sham egyrészecske energiák nem adják meg közvetlenül az ionizációs energiákat (kivéve a legmagasabb betöltött állapot esetét.) Az elektron-kötési energiák számítására a legegyszerűbb és legrégebben alkalmazott módszer a Slater-féle átmeneti állapot módszer (J. C. Slater, Quantum Theory of Molecules and Solids vol.4.(McGraw-Hill, New York, 1974.)). Alkalmazták ezt a módszert ponthibák vizsgálatára?

A pseudopotenciálokat úgy szokták megalkotni, hogy a valencia elektron energiák ne változzanak. Meggondolandó lenne úgy módosítani a konstrukciót, hogy az új (azaz a pseudopotenciállal kapott) valencia elektron energiák az elektron-kötési energiákat adják, ne a Kohn-Sham-energiákat. Történtek ilyen jellegű próbálkozások?

A 164. oldalon azt írja, hogy “... a gerjesztési energiák pontos számítása formálisan kívül esik a Kohn-Sham-elméleten.” A Kohn-Sham-elméletet általánosították gerjesztett állapotokra is. Valójában több elmélet is létezik. Az első egzakt elmélet Theophilou (J. Phys. **C 12**, 5419 (1978)) ill. Gross, Oliveira és Kohn (E. K. U. Gross, L. N. Oliveira and W. Kohn, Phys. Rev. A **37**, 2805, 2809, 2821 (1988)) nevéhez fűződik. Ennek a sokaságelméletnek az alkalmazása azonban gyakran nehézkes. Szerencsére léteznek egyetlen gerjesztett állapotra vonatkozó elméletek is: a Levy-Nagy variációs (M. Levy and Á. Nagy, Phys. Rev. Lett. **83**, 4631 (1999); Á. Nagy and M. Levy, Phys. Rev. A **63**, 2502 (2001)) és a Kato-tételen alapuló nem-variációs (Á. Nagy, Int. J. Quantum. Chem. **70**, 681 (1998)) elméletek. Mindegyik elméletben ugyanolyan alakja van a Kohn-Sham-egyenleteknek mint alapállapot esetén, csak a Kohn-Sham-potenciál más (és természetesen a betöltési számok is mások). (Értelemszerűen a pseudopotenciál is kicsit különbözni fog az alapállapotitól.) Az említett elméletek degenerált állapotokra is alkalmazhatók, tehát nincs feltétlenül szükség a konfigurációs kölcsönhatás (CI) módszere (187. oldal).

Megállapítható, hogy Gali Ádám jelentős új tudományos eredményeket ért el. A téziseket a jelölt új tudományos eredményeinek fogadom el. Javasolom az értekezés vitára bocsátását és sikeres védelem esetén az MTA doktora cím odaítélését.

Debrecen, 2010. november 25.

/ Nagy Ágnes/
az MTA doktora