

VÉLEMÉNY

Halász Gábor „Degenerált állapotok és nemadiabatikus folyamatok molekuláris rendszerekben” c. akadémiai doktori dolgozatáról

Halász Gábor dolgozata a hagyományos formát követi: a 97 oldalas dolgozatban megpróbálja összefoglalni az elmúlt évtizedben folytatott kutatásai eredményeit a - tegyük mindjárt hozzá - tetszetős és jól forgatható kötetben. Az értekezés 9 fejezetből áll, melyek közül az első kettő a bevezetés és elméleti összefoglaló, az utolsó kettő az összefoglalás és köszönetnyilvánítás, a maradék öt viszont az eredményeket gyűjti egybe. Az évtizedes munka mögött 39 magas színvonalú publikáció áll, melyek közül 16-ban a jelölt az első szerző, így szakirodalmi tevékenységével eleget tesz az akadémiai doktori cím elvárásainak.

Minthogy a cikkek megjelenése – és ez esetben magas szintű folyóiratokban való megjelenés ténye – egyet jelent független és szakértő bírálók szakmai jóváhagyásával, illetőleg pozitív véleményével, így a bíráló számára ez könnyebbséget jelent, hiszen elsősorban a dolgozatra kell koncentrálnia.

A disszertáció 2. fejezete elméleti összefoglaló. Ebben a fejezetben foglalja össze a szerző a molekuláris rendszerek Born-Oppenheimer, illetve nemadiabatikus közelítését. Itt vezeti be a dolgozat fő érdekességének számító kónikus kereszteződések elméletét és legfontosabb vizsgálati módszereit. A fejezet rövid, mindössze 14 oldal, jó összefoglalását adja az elméletnek. Noha a témában én nem vagyok szakember, mégis meglepődve tapasztaltam, hogy a fejezet, mely megalapozza a teljes dolgozat elméleti hátterét, mindössze 25 irodalomra hivatkozik. Megjegyzem, hogy az egész dolgozat mindösszesen 64 hivatkozást tartalmaz, ami kétféle következtetést sejtet. Lehetséges, hogy a téma olyannyira új és járatlan terület, melynek alig-alig van előzménye. A másik lehetőséget fel se vetem...

A 3. fejezet címe “Kónikus kereszteződés és nemadiabatikus csatolás”. A fejezet a $H+H_2$ rendszerrel, a C_2H , NaH_2 , víz és acetilén molekulák topológiai tulajdonságaival és elektronállapotaik csatolódásaival foglalkozik. E fejezet mögött áll a legtöbb – szám szerint 25 – saját publikáció, így azt mondhatjuk, hogy ez a dolgozat legfontosabb fejezete. Fő célja a kónikus kereszteződések megtalálása. A D topológiai matrix vizsgálatával megállapítja, hogy egy adott rendszer leírásához hány elektronállapotot szükséges figyelembe venni. Ahol a kétállapot közelítés nem alkalmazható, a háromállapot közelítés megfelelő pontossággal

leírja a diabotikus potenciálokat, ahol az sem, ott a négyállapot közelítés vezet eredményre (pl. NaH_2). Így számos kónikus kereszteződést sikerült megtalálni. Ezzel kapcsolatban két kérdést teszek fel. Az első a degeneráció és a szimmetria kérdése. Mivel a kónikus kereszteződés degenerált elektronállapotokat jelent, hogyan lehetséges ez pl. C_{2v} szimmetria esetében? A második kérdés sokkal konkrétabb. Vajon a négyállapot közelítés nem bontható-e fel kétállapotot tartalmazó részekre? Ha igen, mekkora hibát vétünk? Ugyanezen fejezet 38. oldalához: Kiváncsi vagyok hogy a 3-atomos NH_2 molekula esetén hogyan veszi fel a “zárt görbe síkját a molekula tengelyére merőlegesen”. Végül megjegyzem, hogy a 3.8. ábra jobbfelén levő vázlat fejjel lefelé áll.

Az 5. fejezetben a jelölt a Renner-Teller és Jahn-teller hatásokkal kapcsolatos eredményeit ismerteti. A C_2H_2^+ molekula példáján megmutatja, hogy olyan lineáris, többatomos molekulák esetén, melyekben fellép a Renner-Teller effektus, a lineáris geometriából kimozdítva a Renner-Teller sajátosság megszűnik, de ugyanakkor szükségszerűen megjelenik két kónikus kereszteződés. A jelenséget néhány más, lineáris molekulán is sikerült megmutatni. Érdekes kérdésnek tűnik, hogy a két, első közelítésben független jelenség között létezik-e valamilyen oksági kapcsolat?

Végül még egy megjegyzés az 5.1. ábrával kapcsolatban. Az ábrán ϕ , a szövegben φ szerepel. Illetve ϕ és ϕ_1 , míg a szövegben φ_1 és φ_2 .

A 6. fejezet a kónikus kereszteződéseken át lejátszódó ultragyors, sugárzás nélküli átmenetek vizsgálati eredményeit tartalmazza. Halász Gábor ezúttal már nagy rendszerek elektronszerkezeti és dinamikai folyamataira koncentrált. A vizsgálatokhoz továbbfejlesztette az ún. 3 effektív módus módszert és alkalmazta a pirazin és butatrién molekulák ultragyors fotodinamikájának leírására. Meghatározta a tetrahidrokannabinol alap- és első gerjesztett állapota közötti kónikus átmenetet. Mindezek biológiai szempontból rendkívül fontosak, hiszen a Nap káros sugárzásának kitett élő szervezetek fotostabilitása létfontosságú. Természetesen a nagy rendszerek vizsgálatához kevésbé pontos kvantumkémiai módszereket tudott csak használni, azokat is csak egyszerűsített szerkezeten. Ámbár, ami azt illeti, az eredetileg 49 atomos molekulából csonkított 41 atomos rendszer nem éppen komoly könnyítés.... Ezzel összefüggő kérdésem az 55. oldal szövegéhez kapcsolódik: vajon a DFT módszer(ek) ab initio számítások-e? És ha igen, miért nem? Ugyancsak ide tartozik az az elfogadott vélemény, hogy a B3LYP funkcionál nagy rendszerek számítására nem túl alkalmas. Miért nem választott valamilyen más, alkalmasabb funkcionált a jelenleg létező számos egyéb közül? A 6.4. ábrán mit jelent a pontokból álló vonal? Mintha hiányozna néhány odaeső számítás.

A 7. fejezet lézerindukált kónikus kereszteződésekkel kapcsolatos. Ezek megjelenése a kétatomos molekulák elektromágneses tér nélküli fizikai tulajdonságait jelentősen megváltoztatja. Úgy is mondhatjuk, hogy a lézer intenzitásával illetve frekvenciájával befolyásolhatóvá, vagy inkább szabályozhatóvá válik molekulák elektronállapotainak csatolása. Ezért az effektus kutatása igen jelentős. A jelölt az Na_2 molekula kónikus kereszteződéseit vizsgálta, melyhez a magmozgás Schrödinger-egyenletét kellett megoldani először “lézermentes” állapotban, majd a lézer-molekula kölcsönhatás alkalmazása mellett. Kiszámította a topológiai vagy Berry fázis értékét, mely ugyanannyinak adódott, mint a természetes kónikus kereszteződések esetén. Megmutatta, hogy az így keltett kónikus kereszteződések hogyan módosítják a molekula különböző dinamikai tulajdonságait.

A 8. fejezet címe Eredmények összefoglalása és kitekintés. Ezzel szemben itt a jelölt nem foglal össze semmit, csupán a jövőbeli terveit ismerteti a kb. másfél oldalon keresztül.

A dolgozat viszonylag könnyen olvasható, fogalmazása világos és érthető. Felhívnam a figyelmet azonban néhány kétes vagy ügyetlen, de mindenképpen zavaró megfogalmazásra, például az alábbiakra (zárójelben a szerintem korrekt forma).

...általános esetben történő teljesüléséhez (amely általános esetben akkor teljesül, ha...), degenerancia (degeneráció), mag koordináta, erő állandó (magkoordináta, erőállandó). A jelölt munkájához számítógépet és nem számológépet használt, tehát számításokat és nem számolásokat végzett. A Tézisfüzet Célkitűzések fejezetében a jelölt vizsgált, tanulmányozott, foglalkozott valamivel, ami szép dolog, de ez nem lehet egy kutatásnak a célja, legfeljebb a módszere.

A fenti megjegyzések nem kisebbítik a jelölt eredményeit. Az elmúlt évtizedben komoly és értékes munkát végzett, mely átfogó tudásról és érdeklődésről tesz tanúbizonyságot. Eredményei magas szintű publikációkban láttak napvilágot. A bírálatban előforduló felvetések többsége nem a munka lényegi részéhez kapcsolódik. Az érdemi rész, az eredmények, a publikációk a végzett munka minősége és mennyisége tiszteletet érdemel. Az Tézisfüzetben leírt tézispontok elfogadhatók. Mindezek alapján javaslom dolgozat nyilvános vitára bocsátását és sikeres védés esetén az akadémiai doktori cím odaítélését.

Budapest, 2012 májusa.

Dr. Veszprémi Tamás
egyetemi tanár, akadémiai doktor