

A bírálóbizottság értékelése

A pályázó automatizált programozási technikát fejlesztett ki, amely utat nyitott bonyolult kvantumkémiai számítások hatékony megvalósítására. A kidolgozott matematikai eljárások (algoritmusok) alkalmazásával mód nyílt mind a felvetett problémák kezelésére alkalmas egyenletek levezetésére, mind azok megoldására, különböző modellek esetén. Az automatizált technika lehetővé tette több részprobléma megoldását, amelyek egyenként is igen jelentős fejlesztések, mint pl. az analitikus energia-deriváltak kiszámítása, a gerjesztett állapotok tulajdonságainak meghatározása, tetszőleges gerjesztések hatásának figyelembevétele, továbbá egy, a számításokat megkönnyítő általános közelítés kidolgozása. A jelölt által kifejlesztett számítási eljárások lényegesen növelik a kémiailag megfelelő pontossággal számítható rendszerek (molekulák) méretét, ugyanakkor számottevően csökkentik a számítások gépidejét. A bizottság úgy ítéli meg, hogy a pályázó igen jelentős eredményeket ért el szakterülete, az elméleti kémia területén, és mindegyik tézisének elfogadja új tudományos eredményként.