

Opponensi vélemény
**Szabados Ágnes “Perturbácószámítás alapú módszerek molekulák
elektronszerkezetének leírására”**
című MTA doktori értekezéséről

Szabados Ágnes értekezése fontos, aktuális, a kvantumkémiaiában jól alkalmazható módszerekkel foglalkozik. Az értekezés logikusan felépített, igényesen megírt, szép munka.

Az értekezés hat fejezetből áll. Az első fejezet a bevezetés, mely bemutatja a kutatás motivációját, áttekinti az irodalmat. A további fejezetek tárgyalják a saját eredményeket. A második fejezet a multikonfigurációs perturbácószámítással (MCPT) foglalkozik. Az itt ismertetett eredmények öt tézispontban szerepelnek. Szabados Ágnes megmutatta, hogy az MCPT projektált változata sérti a méretkonzisztenciát, majd levezette azt az új változatot, mely megőrzi a méretkonzisztenciát. A pivot-függést pedig pivot-átlagolt módosítással javította. Ugyanakkor Moller-Plessett partíciónak megfelelő korrekciós módszert alkotott. Az MCPT-t többdimenziós modell-térre terjesztette ki.

A harmadik fejezet az energiaszintek becslését vizsgálja. Az ezzel kapcsolatos eredményeket két tézispont foglalja össze. Az alsó becslésre fókuszál, részletesen tanulmányozva a Löwdin-féle bracketing függvényt. Egy új variációs alapú közelítő módszert talált. A variációs eljáráshoz kötődő eredményei elvi jelentőségűek. A Löwdin-féle bracketing függvény perturbációs alapú számítását javasolta. Fontosnak tartom, hogy az által kidolgozott módszerrel kapott energia pontossága hasonló a Rayleigh-hányados pontosságához.

A negyedik fejezet a spin komponens skálázást mint Feenberg-skálázást tárgyalja. Az itt bemutatott eredményekhez két tézispont kapcsolódik. A spin komponens skálázást a Hartree-Fock módszerhez kötődő perturbácószámítás javítására vezették be elméleti megalapozás nélkül. Kiemelendő, hogy elméletileg elsőként Szabados Ágnes alapozta meg az eljárást. Az ő nevéhez fűződik a Feenberg-féle skálázás kétparaméteres általánosítása is. Majd további általánosítási lehetőségekre mutatott rá.

Az ötödik fejezet az SS-MRPT elmélettel kapcsolatos vizsgálatokat mutatja be, melyek két tézispontban jelennek meg. Érzékenység analíssal mutatott rá az SS-MRPT módszer kétségbe vonható pontjára, mely a komplementertérbeli függvények redundanciájával függ össze. Kanonikus ortogonálisizációt javasolt, levezette az erre vonatkozó képleteket. A numerikus eredmények alátámasztották, hogy az új eljárás orvosolja az SS-MRPT elmélet korábbi problémáját.

A hatodik fejezet a szigorúan ortogonális geminál korrekciójával foglalkozik. Három tézispont emeli ki az idevágó legfontosabb eredményeket. Jelentősnek tartom a linearizált coupled-cluster (LCC) elmélet ortogonális geminállokra való átdolgozását. Rámutatott a triplétt geminállok kitüntetett szerepére többszörös kötések esetén.

Szabados Ágnes az ELTE Elméleti Kémiai Laboratóriumában tevékenykedik. Többnyire a csoport tagjaival, ill. tanítványaival együtt publikálta cikkeit. De van néhány teljesen önálló cikke is, pl. egyedüli szerzője az egyik legtöbbet idézett munkának.

Közel 80 tudományos közleménye jelent meg referált nemzetközi folyóiratokban, melyekre több mint 700 független hivatkozás történt. Számos alkalommal tartott előadást nemzetközi konferenciákon, több ízben meghívott előadóként.

A hazai és a nemzetközi tudományos életben való aktív részvételét mutatja, hogy több díjat és kitüntetést kapott. A jelentősebbek: Vatiago díj, IBM/Löwdin ösztöndíj, Promising Scientist Award of CMOA.

Kérdéseim a következők:

A perturbációs számítás nemcsak alapállapotra használható. Az értekezésben található néhány példa gerjesztett állapotokra is. Nehezebb numerikus feladat a gerjesztett állapot vizsgálata mint az alapállapoté? Az alsó korlát formulák között szerepel a Temple-formula, mely tartalmazza az első gerjesztési energiát. Lehetne-e ezt a képletet az első gerjesztési energia becslésére használni az alapállapot energiájának ismeretében?

A bemutatott perturbációs módszereket kis molekulákra végzett számításokkal illusztrálja a szerző. Ezen módszerek közül melyek használhatók nagyobb rendszerek vizsgálatára is?

A numerikus illusztrációk energiát ill. energiakülönbségeket mutatnak be. Mennyire alkalmasak a dolgozatban bemutatott eljárások más mennyiségek meghatározására?

A benyújtott értekezés alapján megállapítható, hogy Szabados Ágnes jelentős, nemzetközi érdeklődésre számot tartó, új tudományos eredményeket ért el. Valamennyi tézist elfogadom új tudományos eredményként. Publikációs tevékenysége és annak hatása jelentősen meghaladja az előírt követelményeket.

Ennek alapján javaslom a mű nyilvános vitára bocsátását, majd az MTA doktora cím odaítélését.

Debrecen, 2021. február 12.

Dr. Nagy Ágnes
MTA doktora
egyetemi tanár