

A bírálóbizottság értékelése

Szabados Ágnes a hullámfüggvény alapú kvantumkémiai eljárások fejlesztése területén ért el kiemelkedő eredményeket. A jelölt mintegy 70 tudományos publikációt közölt már, amire több mint 700 hivatkozás érkezett. A dolgozat alapjául szolgáló munkák célja, hogy olyan számítási eljárásokat dolgozzanak ki, amelyek szokatlanabb vegyértékállapotok, sokrészecske-kölcsönhatások, vagy éppen a komoly elméleti kihívást jelentő átmenetifém-rendszerek elektronszerkezetének leírására is alkalmasak. A doktori munka Szabados Ágnes 18 közleményében szereplő eredményeit mutatja be 5 fejezetbe csoportosítva:

- multikonfigurációs perturbációs számítással kapcsolatos eredmények;
- geminál referencia függvények referenciafüggvényként való használatának vizsgálata;
- a spinadaptált állapotspecifikus multireferenciás perturbációs számítás néhány problémájának megoldása;
- a spinkomponens skálázás részletes elemzése;
- és molekuláris energiaszintek alsó becslésére szolgáló új eljárások kidolgozása.

Az eredményeket 14 tézispontban foglalta össze, amelyek mindegyikét a bizottság tartalmilag elfogadja és mindegyiket új tudományos eredményként ismeri el. A doktori munka alapjául szolgáló cikkek hatását jól illusztrálja, hogy több mint 370 független hivatkozás érkezett már rájuk. Szabados Ágnes eredményei és különösen kérdésfelvetései széleskörű felkészültséget és igényes kutatómunkát tükröznek. Fontosnak tartjuk kiemelni emellett a jelölt iskolateremtő munkásságát és az utánpótlásnevelésben végzett rendkívül sikeres erőfeszítéseit. A bizottság az eredmények közül különösen értékesnek tartja a multikonfigurációs perturbációs számítás alapú eljárás család bevezetését és a spinkomponens skálázás elméleti megalapozását.