

Bírálat
Szabados Ágnes
**“Perturbációszámítás alapú módszerek molekulák
elektronszerkezetének leírására”**
című MTA doktori dolgozatáról

A dolgozat 152 oldalt, 326 hivatkozást tartalmaz és a jelölt 37 dolgozatában leírt eredményeket foglalja össze. A dolgozatra vonatkozó tudományometriai adatok azt mutatják, hogy a jelölt bőven teljesíti az MTA doktori beadásához szükséges paramétereket.. A dolgozat nyelvezete könnyen olvasható, tanító jekkegű, csak igen kevés helyen viseli magán a tudományos konyhanyelv problémáit. A jelölt iskolateremtő munkássága is jelentős, hiszen a mai fiatal ún. „hard core” kvantumkémikus nemzedék legjobbjai pályakezdésében jelentős szerepet játszott. A dolgozat 6 fejezetből épül fel amelyekből az első egy a perturbációelméleti összefoglaló, és a további ötben a jelölt álta fejlesztett módszerekkel kapcsolatos eredmények kerülnek leírásra. Az eredmények mindegyike magas színvonalú újságokban jelent meg. Véleményem szerint a levezetések helyesek, de ezen véleményemben néhai szobatársam Mayer István mondati is segítettek. Ő szerinte amit a jelölt leírt, az minden esetben alaposan átgondolt matematikailag helyes levezetés. A dolgozattal kapcsolatban egyetlen általános jellegű kérdésem van, a többi megjegyzést a fejezetek értékeléséhez kapcsolódóan teszem fel. Milyen új a fizikai megértés szempontjából fontos jelenségre világított rá pályafutása alatt a perturbációelmélet tárgykörében tartozó fejlesztések?

1. Bevezetés:

- a. Redukált rezolvens(5, 7 egyenlet) inverzéről a jelölt megmutatja, hogy a jelen formában nem helyesen van leírva. Számolás során a gyakorlatban melyik formulát használja?
- b. Milyen effektus okozza, hogy az $f(\epsilon)$ bracketing függvény közrefogó tulajdonságát csak modell rendszerkerek lehetett biztosítani?
- c. Milyen gyakorlati alkalmazás esetén van szükségünk több célfüggvényre (1.2 fejezet)?
- d. Milyen esetben degenerált sajátfüggvénye E^0 a H^0 -nak(12 oldal)?

- e. Milyen esetben nincs Coulomb kölcsönhatás AB rendszer esetén? (15 oldal)
- f. Honnan származik az a numerikus tapasztalat, hogy másodrendig pontos EN energia alulról becsli az FCI energia értéket adott bázisban?
- g. Mekkora egy determináns súly amikor összemérhető a HF determinánssal? (27 oldal)

2. Multikonfigurációs perturbációszámítás (MCPT)

- a. Található-e valamilyen fizikai rejtett összefüggés a 215 hivatkozásban Mayer István levezetett ortonormált rendszerre kapott és a Gram-Schmidt majd Löwdin lépés után kapott eredmények között? (41 oldal)
- b. A 99. egyenletben mi a kizáró tényező, hogy E_k és E_{ref} egyenlő legyen?
- c. Mi történik a méretkonzisztencia módszer esetén akkor, ha olyan molekulapályából indulunk ki amelyek nem egy molekulára lokalizáltak? (46 oldal)?
- d. Hogy látszik az 1 táblázatból az oszcillációs jelleg (61 oldal)?
- e. Mi alapján feltételezi a jelölt hogy a bázisméretfüggés a referenciamódszereknél és a saját eredményeinél hasonló?
- f. Az 1 táblázat esetében mi értelme van az optimált partíció esetén PT3 bemutatásának, amelynek definíció szerint nullának kell lennie?
- g. Általánosságban az EN és DK partíciók energiái milyen módon viszonyulnak a referencia energiákhoz (molekulaenergiák, potenciális energia görbék), és rendelhetünk-e ehhez valamiféle fizikai okot?

3. Molekuláris energiaszintek becslése alulról

- a. Mi a jelentősége a $\langle H \rangle$ mennyiség bevezetésének?
- b. Milyen esetben nem teljesül a 72 oldal közepén ismertetett feltétel?
- c. Mi értelme van a 6. táblázatban az iterációs eljárás során kapott energiaértékeket megadni?
- d. Miből adódhat, illetve hogyan jellemezhetnénk a hullámfüggvényben mutatkozó nagyfokú „hibát” (83. oldal)?
- e. A 6-31G* bázis esetén mi értelme van az FCI eredményekhez való hasonlításnak?
- f. Milyen fizikai relevanciája van $R=3.789 \text{ \AA}$ A OH kötéshossznál történő számolásnak (84. oldal)?

4. Spin komponens skálázás mint a Feenberg skálázás

- a. Milyen fizikai megfontolás van azon megállapítás mögött, hogy Grimme harmadrendű energia esetén egy konkrét képletet ad meg (175 egyenlet), míg a jelölnél ez az érték 0.
- b. Miért nem alkalmazott a jelölt az energiaszámításoknál diffúz függvényeket (9. táblázat)?
- c. Mekkora az MP3 járulék nagysága a „jól viselkedő” molekulák esetén?
- d. Milyen módon következik egyértelműen az O3 esetében, hogy az MP sor konvergenciája rossz MP3 eltérés adatokból?
- e. A 10-es táblázat esetén nem lett volna célszerűbb a $\Delta E_F - \Delta E_R$ értéket megadni?

5. SS-MRPT elmélettel kapcsolatos vizsgálatok

- a. Lehet úgy általánosítani, 11 táblázatban leírtakat, hogy ha a érzékenységi paraméter nagyon nagy akkor a probléma nem a túl kicsi CAS koefficiensből származik?
- b. Hogy befolyásolja ezen következtetéseket az alkalmazott bázis nem igazán flexibilis volta (DZ)?
- c. A 12 táblázatban miért nem a korábban ismertetett BeH₂ rendszer esetén történi meg az összehasonlítás? Itt megjegyezmem, hogy itt az alkalmazott bázis lényegesen nagyobb.

6. Szigorúan ortogonális geminálfüggvények korrekciója.

- a. A geminálfüggvények vizsgálata esetén mi indokolja a 6-31G* bázis használatát?
- b. Milyen új fizikai adatokra vonatkozó információkat nyerhetünk a geminálfüggvények használatával?

A jelölt dolgozatával és egész munkásságával bizonyította, hogy az MTA doktori fokozat odaítéléséhez szükséges feltételeket teljesítette. Sikeres védés esetén javaslom a fokozat odaítélését.

Bakó Imre

Bakó Imre

Budapest 2021. augusztus 14.