

A bírálóbizottság értékelése

A bizottság az alábbi 2 fő tézisben és azok alpontjaiban összefoglalt eredményeket mind új tudományos eredménynek tekinti és elfogadta.

1) a GENIUSH rezgési-forgási (kvázi)variációs kvantumkémiai program alkalmazása és továbbfejlesztése molekuláris rendszerek mozgásának kvantummechanikai leírására, különös tekintettel a nagyamplitúdójú mozgásokkal rendelkező rendszerekre.

Részletezve:

- bázis- és grid-levágási módszerek alkalmazása a számítási költségek dupla-exponenciális skálázódásának polinomiálissá csökkentésére.
- metán-atom, metán-ion, metán-víz komplexek, a hangyasav monomer és dimer nagyfelbontású rezgési spektrumának számítása és a kísérleti spektrumokkal való összevetése.

2) a QUANTEN algoritmus és explicit korrelált variációs számítógépes program, egy molekulafizika platform, létrehozása az atomi-molekuláris anyag kvantumelméletének fejlesztéséhez a Born–Oppenheimer és nem-relativisztikus közelítések nélkül, precíziós spektroszkópiai alkalmazásokhoz.

Részletezve:

- variációs pre-Born–Oppenheimer, perturbatív vezető rendű relativisztikus és QED korrekciók implementációja. A relativisztikus QED Bethe–Salpeter-egyenlet tanulmányozása atomi-molekuláris számításokhoz, variációs eljárás tervezése a Salpeter–Sucher-féle megközelítésben definiálható pár-nélküli Dirac–Coulomb(–Breit) operátorra.
- a fejlesztett módszerek alkalmazása kimagasló pontosságú spektroszkópiai számításokra 3-5 részecske rendszerekre, pl. H_2 , H_3^+ , He_2^+ , és további egy és két elektronos molekulák és ionokon hidrogéntől vasig.