

Bírálat
Szidarovszky Tamás
"Molekulák erős külső terekben"
című MTA doktori értekezésről

A dolgozat 170 oldalt és 290 hivatkozást tartalmaz. A dolgozat nyelvezete megfelelő, néhány helyen fedezhető fel benne egy kissé a tudományos „konyhanyelv” hatása. Az ábrák minősége megfelelő, néhol kissé túl zsúfoltak. A dolgozat alapvetően 18+15 cikkre alapszik. Ezt a megjegyzést azért teszem, mert szerintem a X. elméleti spektroszkópia fejezet, amihez a tézispontok szerint 15 cikk tartozik, nem igazán illeszkedik a dolgozat hangvételéhez, gondos kidolgozásához. Ez a fejezet összesen 4 oldalt foglal el a dolgozatban. Véleményem szerint az I-IX fejezet bőven igazolja, hogy Szidarovszky Tamás a fény-anyag kölcsönhatás elméleti vizsgálatában, a kísérleti adatok információtartalmának jobb értelmezése terén világszínvonalú eredményeket ért el. A dolgozatban felsorolt eredmények és ezek fogadtatása is arra utal, hogy a jelölt messze túlteljesítette az MTA doktori cím odaítéléséhez szükséges követelményeket. Ezt a véleményemet a későbbiekben felmerült kérdéseim nem változtatták meg.

A jelölt a dolgozat írásának egy teljesen újszerű módszerét mutatja be. Megpróbálja a lehető legegyszerűbben bemutatni a komoly elméleti és programozási problémák megoldása során kapott eredményeit, amely számos esetben megoldhatatlan feladat.

Kérdéseim:

II. fejezet

a: Mi indokolja, hogy a „fény” tulajdonságainak jellemzésére néha a Thz , néha a nm jelölést használja:

b: Mikor nevezhetjük a molekulákat „laza szerkezetűnek”? (8. oldal)

III. fejezet

a: Milyen térerő/intenzitás esetén nem igaz a 2. egyenlet? Itt megjegyezném, hogy ezt a két mennyiséget amelyek tényleg kapcsolatban vannak egymással, gyakran használja rokonértelmű kifejezésként.

- b: Milyen esetben szükségesek a magasabb rendű polarizálhatóságok? (12. oldal)
- c: A 20. oldalon megemlíti hogy számolásokat közepes és nagyintenzitású lézerimpulzusok esetén végzi, amikor a levezetés csak a nem túl nagy intenzitásokra igaz (11. oldal). Milyen módon lehet ezt a két megjegyzést közös nevezőre hozni?
- d: A 20. oldalon bevezetésre kerül a molekuláris anizotrópia fogalma, mint egy fontos befolyásoló tényező. Milyen módon vezethető le ez a korábban leírt egyenletekből?
- e: A 4. ábrán láthatjuk, hogy a CH_3F molekula esetén közepes intenzitásnál az alapvonal lényegesen alacsonyabb és eltér a többi vizsgált molekulától. Mi ennek a fizikai oka?
- f: Mi az oka annak, hogy a kísérleti és a számolási paraméterek nem tökéletesen egyeznek? (21. oldal)
- g: A 10. ábrán látható adatok $T=1$ és 10 K -en történő számolásokhoz kapcsolódnak. Miért vannak az adatok az 1 „table”-ban $T=0,0\ 0.1$ illetve 5 K -en,
- h: Mi volt az oka annak, hogy a molekulaparaméter vizsgálatokor, kb. $0.1\text{--}0.3\text{ D}$ -nél nagyobb értéket használt? (31 oldal)
- i: Mi az oka a CCSD(T) illetve B3LYP módszerek esetén a különböző bázis használatának? Ismereteim szerint a két módszer más jellegű módon konvergál az alkalmazott báziskészlet függvényében?
- j: Volt valami oka annak, hogy H_2He^+ rezonáns illetve nemrezonáns esetekre két különböző intenzitású impulzust használtak?

IV. fejezet

- a: Mit tekintünk ebben az esetben erős illetve gyenge lézerfénynek? (44, 45 oldal)
- b: Ezen fejezetben a polarizálhatóságot is figyelembe vevő tagot miért nem kell figyelembe venni? (46. oldal)
- c: Milyen fényintenzitások esetén hanyagolhatók el fény-anyag kölcsönhatási tagok? (48. oldal)

d: Az 50. oldal elején kifejtett megfogalmazás nem egészen világos. Meg tudná ezt egy kicsit pontosabban fogalmazni? A sajátállapotok lineáris kombináció nem tekinthető egy kölcsönös megfeleltetésnek?

e: Mit jelent ebben az esetben a numerikus pontosság? (54. oldal)

f: Milyen módon lehetne a számításait kísérletileg validálni? Létezik ilyen kísérleti módszer? (67. oldal)

g: A 68. oldalon legalább valami kísérleti eredményt be lehetne mutatni.

V. fejezet

a: Mi az oka annak, hogy a CASSCF és az FCI esetén különböző bázisokat használt? (73, 74 oldal)

b: Milyen módon jellemezhetjük a H..He kötés erősségét?

c: Lehetőség van arra, hogy a 45. ábrán látható kisebb (mellék) csúcsokhoz valami fizikai értelmezést rendeljünk? (83. oldal)

VI. fejezet

a: Mekkora az üregrezonátor mérete? (84 oldal)

b: Léteznek olyan sötét polaritonok amelyek valamiféle delokalizált szerkezetet írnak le? (85. oldal)

c: Melyek azon pontok ahol az elmélet nem sikeres, illetve milyen fejlődés várható ezen a területen? (86. oldal)

d: Miért nem szükséges figyelembe venni a másodrendű tagot? (67. egyenlet)

e: Mi az oka annak, hogy csak a legnagyobb hullámhosszú foton rezonál? (88. oldal)

f: Mekkora lehet a 90. oldalon megemlített közelítések hibája?

g: Milyen fontosabb gyakorlati alkalmazását tudná említeni a polartion kémiaiának?

VIII. fejezet

a: Itt „gold standard”-nak nevezi a CCSD(T)/aug-cc-pVQZ módszert? Van ennek valami oka?

X. Fejezet

a: Volt valami specifikus oka annak, hogy ez a fejezet összesen 4. oldal és 15 cikkben szereplő anyagról szól?

Általános kérdésem: Milyen lehetőségeket lát a munkája során bevezetett elméleti és programozási fejlesztéseknek nagyobb molekulák esetén, illetve lát-e lehetőséget gyakorlati alkalmazásra?

Gratulálok a jelöltnek, a dolgozat téziseit elfogadom és sikeres védés esetén az MTA doktori cím odaítélését javaslom.

Budapest 2024 11.22



Bakó Imre