

Vélemény
Szidarovszky Tamás
MOLEKULÁK ERŐS KÜLSŐ TEREKBE
című MTA doktori dolgozatáról

Szidarovszky Tamás dolgozatának témája molekulák és elektromágneses sugárzás kölcsönhatásának a vizsgálata olyan paramétertartományban, amikor a hagyományos leírási módszerek nem, vagy csak korlátozottan alkalmazhatók. Elméleti munkájának egy része így módszerfejlesztés, azaz új számítási eljárások kidolgozása, ugyanakkor ezeket a módszereket alkalmazza is konkrét molekulák esetére. A téma aktualitását a kísérleti eljárások fejlődése (pl. új lézerrendszerek beüzemelése) szolgáltatja, de a dolgozatban feltett és megválaszolt kérdések fundamentális jelentőséggel is bírnak – általános értelemben, a fény-anyag kölcsönhatás elmélete szempontjából.

A dolgozatban összefoglalt elméleti munka három nagy cím köré csoportosítható, ezek a (klasszikus) lézertérbe helyezett molekulák leírása, a polaritonkémia, illetve spektroszkópiai vizsgálatok. Szidarovszky Tamás tézispontjait is e három téma szerint, alpontokra bontva adja meg.

Lézerek terével kölcsönható molekulák kapcsán az egyik fontos részterület ahhoz a jelenséghez kapcsolódik, hogy a lézertér a molekulák orientációját megváltoztatja, elforgatja őket. Rendezett molekulák rendszerében pontosabban kontrollált kísérletek végezhetők, illetve a rövid impulzusokkal kölcsönható molekulák leírásakor a fix irányítottság feltételezését is alátámaszthatja ez a jelenség. Szidarovszky Tamás munkája során nem pusztán a forgási szabadsági fok és az elektromágneses tér összecsatolódását vizsgálta, hanem kitért a vibráció szerepére is. Kiemelendő, hogy elkészített egy olyan programot, amely segítségével a problémakört – akár kísérleti szempontból – tanulmányozó kollégák kiszámíthatják a lézertér forgató hatását (merev rotátor közelítésben). A témával kapcsolatos 1(a)-(g) tézispontokban megfogalmazott állításokat a jelölt publikációkkal alátámasztott, új tudományos eredményeinek fogadom el.

Érdekes, és sok szempontból újszerű az a megközelítés, ha a molekulákkal kölcsönható elektromágneses teret nem a területen szokásos klasszikus, időfüggő mezőként, hanem kvantált módon, a „fotonkép” alkalmazásával írjuk le. Ebben az esetben, kellően erős csatolás esetén (amit pl. egy üregrezonátor idézhet elő), a fotonokkal való csatolás a molekula energiaszintjeinek észrevehető eltolódásához vezet. Ez a jelenség a külső tér frekvenciájának megfelelően elektronállapotok, de akár rezgési (forgási) nívók között is felléphet. Szidarovszky Tamás mindkét eset vizsgálatával foglalkozott és dolgozatában is kitér mind az elektronikus, mind pedig a rezgési polaritonokkal kapcsolatos eredményeire. Ezek közül a nem-adiabatikus hatások fontossága miatt a kónikus kereszteződésekkel kapcsolatosokat érzem a legjelentősebbnek. A polaritonkémiaival kapcsolatos 2(a)-(e) tézispontokat is önálló, új tudományos eredménynek tekintem.

Az anyagvizsgálati módszerek fejlődésének dacára a spektroszkópiai eredmények jelentősége nem csökkent, így elméleti értelmezésük továbbra is kiemelt fontosságú a szerkezet és az azzal összefüggő fizikai-kémiai tulajdonságok megértése szempontjából. Szidarovszky Tamás eddigi munkái közül talán ezen a területen a legnagyobb a módszerfejlesztés szerepe. A témakörben a probléma nem-hermitikus leírásával kapcsolatos eredményeit tekintem elvi szempontból a legfontosabbnak. A spektroszkópiai eredményeket összefoglaló 3(a)-(e) tézispontokat is elfogadom, mint új tudományos eredményeket.

Maga a dolgozat egy jól olvasható, tartalmilag szépen strukturált munka, érezhető az a szándék, hogy a szöveg önmagában is megérthető legyen. Ennek megfelelően hangsúlyosak a bevezető részek, és a tématerületen gyakori rövidítések feloldását sem kell keresgélennie az olvasónak. Talán a szövegszerkesztő magyarítása sikerülhetett volna jobban (Fig. 1->1. ábra, elválasztások, sorvégek „túllógása”, esetleg fejléc használata), illetve a fejezetek is jobban elváltak volna, ha új oldalon kezdődnek (de ez már szubjektív). Mindezek természetesen apróságok, semmiképpen nem zavarják a tartalom értelmezését.

Általánosan elmondható, hogy a Szidarovszky Tamás a kvantumkémiai nagyon széles eszköztárát felvonultató munkát tett le az asztalra. Biztos kézzel nyúl csoportelméleti eszközökhöz, de ugyanez a hozzáértés érződik a kvantált elektromágneses terek – hagyományosan inkább a fizikához kapcsolt – leírása esetén is. Dolgozatában jelentős súlyt képvisel az elméleti módszerek fejlesztése, ami jellemzően türelmet igénylő, nem azonnali eredményeket szolgáltató munka. Emellett azonban nem veszíti szem elől az alkalmazásokat sem, ahogyan azt egy-egy konkrét példa részletes végigszámolása mutatja.

Összefoglalva, Szidarovszky Tamás dolgozatában fontos, értékes tudományos munkát mutat be. Tézispontjait önálló tudományos eredményként fogadom el. Alapvetően elméleti munkája több ponton szorosan kapcsolódik kísérleti eredményekhez.

A fentiek alapján javaslom Szidarovszky Tamás dolgozatának nyilvános vitára bocsájtását.

Kérdéseim a jelölthöz:

1. Az 5. és 6. ábrán, a nagyobb intenzitású terek esetén (felső panelek), az irányítottság kevésbé oszcilláló része (a dolgozat szóhasználatával: az alapvonal) a legtöbb molekula esetén a véletlenszerűséget jelentő $1/3$ -os értéknél észrevehetően nagyobb. Kapcsolható valamilyen szemléletes magyarázat ehhez a jelenséghez?

2. Az időfüggő Schrödinger egyenlet megoldása (pl. IV. fejezet, 35. ábra) kapcsán a dolgozat kissé szűkszavúan fogalmaz az alkalmazott módszerekről. Azt szeretném megkérdezni a jelölttől, hogy ezeknél a számításoknál pontosan milyen numerikus eljárás mutatkozott a leginkább célravezetőnek?

3. A forgási illetve rotációs átmenetekkel rezonáns fotonok energiája már nem nagyságrendekkel nagyobb a szobahőmérséklethez tartozó kT termikus energiánál. Pl. a vízmolekula kapcsán a VIIIA fejezet végén vázolt termikus tulajdonságok számításánál van-e, lehet-e szerepe annak, hogy termikus egyensúly esetén a fotonmódus nincs jó közelítéssel vákuumállapotban?

4. Kissé általánosabban: az üregbeli elektromágneses tér állapota a molekulával történő kölcsönhatás előtt akár preparálható is. Más szóval, ha egyetlen módusra gondolunk, annak az állapota sokféle (a termikus mellett pl. (nem-nulla)fotonszám sajátállapot, koherens állapot, stb.) lehet. Kérdésem a szerzőhöz, hogy a dolgozatban ismertetett eredmények között van-e olyan, amely esetén várható, hogy kvalitatív módon függ az üregbeli tér állapotától?

5. A dolgozatban szereplő Hamilton-operátorok jellemzően hossz mértékben kerültek felírásra, és a külső térrel való kölcsönhatás a molekula elektromos dipólmomentumán keresztül valósul meg. Erős elektromágneses terekben az anyag mágneses dipólmomentuma is szerepet játszhat. A szerző szerint milyen mértékben tenné bonyolultabbá a dolgozatban összefoglalt számításokat, ha ezt a kölcsönhatást is figyelembe vennénk? Arra gondolok, hogy pl. egyetlen kvantált módus és egy molekula csatolása esetén a mágneses dipól tag ugyan összetettebb kölcsönhatást jelent, de a probléma dimenzióját ez nem feltétlenül növeli, így a számítások numerikusan továbbra is kezelhetők maradnak. Igaz ez? Ismeretes-e esetleg olyan eredmény, amely ezt a kérdést járja körül, a dolgozatban ismertetett módszerekhez hasonló alapossággal?



Szeged, 2025. február 20.

Földi Péter