

**Molekulák stacionárius
energiaszintjeinek becslése alulról**

**Pályázat a Kémiai Intézet
2016. évi Tudományos Díjára**

SZABADOS ÁGNES
EGYETEMI DOCENS

Eötvös Loránd Tudományegyetem
Természettudományi Kar
Kémiai Intézet

1. Rövid ismertetés

A Kémiai Intézet Elméleti Kémiai Laboratóriumában folyó kutatások egyik fókuszpontja újfajta közelítések kidolgozása molekulák stacionárius állapotbeli energiájának becslésére. Az új módszerek jelentőségét az adja, hogy megbízhatóságban és/vagy pontosságban és/vagy a költséghatékonyságot tekintve a korábbiaknál előnyösebbek.

A 2015. évben egy olyan munkáról tudtunk beszámolni (Zs. Tóth and Á. Szabados: Energy error bars in direct configuration interaction iteration sequence, *The Journal of Chemical Physics* **143**, 084112 (2015).) amely egy próba hullámfüggvénnyel kapott közelítő energiaszint pontosságának becslésére lehet alkalmas. Az alapgondolat a következő. Adott, közelítő hullámfüggvénnyel könnyen kapható felső becslés a megfelelő energiaszintre, a Hamilton operátor várható értékének számításával (*c.f.* variációs tétel). Ugyanezzel a hullámfüggvénnyel alsó becslést számítva a közelítő energiához hibát rendelhetünk. Fontos, hogy mind a felső, mind az alsó becslés szoros legyen, hiszen kísérleti szempontból nem maguk az energiaszintek, hanem azok különbségei relevánsak, a számított hibák hibái pedig kivonáskor halmozódnak. A hibabecslés általunk követett metodikája jelenleg éppen ezért nem tartozik a kurrens kvantumkémiai kutatások fő irányvonalába, mert kellően szoros, és a várható értékkel összemérhető számításigényű alsó korlát eddig nem volt ismert.

Az általunk alkalmazott alsó becslés a Löwdin-féle bracketing függvényen alapul, amely kellően szoros korlátot ad, de a Hamilton operátor inverzének megjelenése miatt számítása túlságosan drága. Mi egy olyan eljárást dolgoztunk ki, amely az inverz Taylor során alapul és a függvény közelítő számítását teszi lehetővé a felső korlattal összemérhető számításigény mellett. Numerikus vizsgálataink szerint az általunk javasolt, közelítő alsó korlát hibája a várható értékkel egy nagyságrendbe esik. A munka jelentőségét mutatja, hogy a 2015. évi International Congress of Quantum Chemistry (ICQC) rendezvényen az erről beszámoló poszter díjat nyert.

A munka folytatása jelenleg laboratóriumunkban zajlik. Egyrészt a becslés pontosságán igyekszünk javítani a Taylor sor kiinduló pontjának (az ú.n. nulladrendű operátornak) ügyesebb megválasztásával. Másrészt a módszer megbízhatóságának jellemzésére próbálunk indikátor mennyiséget kidolgozni. Sajnos u.i. az inverz közelítése nyomán a bracketing függvény szigorú alsó korlát jellege elvész.

Budapest, 2016. december 30.

Szabados Ágnes