

**Áttekintés a perturbációszámításról  
és annak alkalmazásáról  
az elektronszerkezet leírásában**

**Pályázat a Kémiai Intézet  
2017. évi Tudományos Díjára**

**SZABADOS ÁGNES**  
EGYETEMI DOCENS

Eötvös Loránd Tudományegyetem  
Természettudományi Kar  
Kémiai Intézet



## 1. Rövid ismertetés

Az Elsevier kiadó néhány éve indított „Reference Modules” néven tematikus gyűjteményt hét témában, melyek egyike a „Chemistry, Molecular Sciences and Chemical Engineering” című. A gyűjtemények elektronikus formában elérhető, áttekinthető cikkeket tartalmaznak melyeket egy szűkebb terület művelői felkérésre készítenek. A gyűjtemények célja az interdiszciplináris kutatás/oktatás elősegítése. A cikkek doktori szintű bevezetését adják egy-egy témának, miközben rövid, naprakész eligazítással szolgálnak a határterületen tájékozódni kívánó, tapasztalt kutató számára. A kéziratok referálást követően kapnak időbélyegzőt és kerülnek on-line publikálásra. A cikkek aktualitását a szerkesztők megadott időközönként ellenőrzik, szükség esetén frissítést kérnek a szerzőtől.

Az ELTE Elméleti Kémiai Laboratórium tagjaként Szabados Ágnes kapott felkérést a „Reference Modules” egy cikkének elkészítésére perturbációszámítás (perturbation theory, PT) témában. A 2016-ban beküldött kézirat az alábbi, kedvező bírálatot kapta: „The manuscript was extremely well written not only from the historical point of view but also from the theoretical point of view. The BW and RS-PT were intensively discussed from various aspects. Also, the contents include SR and MR-PT. I strongly recommend to publish this manuscript.” Az on-line megjelent cikk hivatalos idézési módja: Á. Szabados: Perturbation Theory: Time-Independent Aspects of the Theory Applied in Molecular Electronic Structure Description, *Elsevier Reference Module in Chemistry, Molecular Sciences and Chemical Engineering*, doi:10.1016/B978-0-12-409547-2.11467-2, published online: 28-Jan-2017.

Látható, hogy a cikk végső címe az eredeti felkéréshez képest szűkebb területet jelöl meg. A módosítás szükségszerű volt, hiszen a PT önmagában túl tág témának bizonyult a kiadó szabta kereteket és elvárásokat tekintve. Rövid bevezető után a cikk első fő fejezete az időtől független perturbációs technikák némelyikének (e.g. Brillouin-Wigner, BW és Rayleigh-Schrödinger, RS) formális összegzését adja. Ezt követi néhány fontos aspektus elemzése (t.i. variáció- és perturbációszámítás kapcsolata, méretkonzisztencia kérdésköre, konvergencia). A második fő fejezet a PT alkalmazásait tekinti át az elektronkorreláció leírására, mind az egydeterminánsra épülő (single reference, SR), mind a többdetermináns (multireference, MR) kiindulópontot alkalmazó eljárásokat érintve.

Budapest, 2017. december 29.

Szabados Ágnes