

Gráfelméleti módszerek a molekulaszpektroszkópiában

Árendás Péter, II. évf. matematikus mesterszak

ELTE TTK Kémiai Intézet, Fizikai Kémiai Tanszék

Témavezetők:

Dr. Császár Attila tanszékvezető egyetemi tanár, Fizikai Kémiai Tanszék

Dr. Furtenbacher Tibor tudományos munkatárs, Fizikai Kémiai Tanszék

A dolgozat során a 2007-ben bevezetett spektroszkópiai hálózatok matematikai, gráfelméleti módszerekkel történő elemzésével foglalkoztunk. Munkánk során a H_2^{16}O spektroszkópiai hálózatát, mint tesztrendszert vizsgáltuk.

A TDK munka során két kérdést fogalmaztunk meg. Először arra kerestük a választ, hogy a H_2^{16}O molekula mért spektroszkópiai hálózata mely új, a mért hálózatban nem szereplő, de az *ab initio* kvantumkémiai számítások segítségével előállított átmenetekkel tehető összefüggővé. Ezután célul új, még nem asszignált energiaszintek elérését tűztük ki, melyekkel lehetőség nyílik a jelenlegi mért spektroszkópiai hálózat bővítése.

A H_2^{16}O molekula vizsgálata során egyrészt eljárást mutattunk arra, miként lehet a mért spektroszkópiai hálózat komponenseit új, még nem mért átmenetek segítségével összefüggővé tenni. Törekedtünk arra, hogy a kifejlesztett eljárás minél könnyebben legyen alkalmazható a gyakorlatban, a gyakorlati mérések során, ezért minél nagyobb intenzitású új átmeneteket kerestünk. Vizsgálatunkat ezután a H_2^{16}O molekulán folytattuk, és példát mutattunk általunk talált új, két ismert, címkézett energiaszint közti átmenetre.

Második feladatként arra kerestük a választ, hogy a még nem asszignált energiaszinteket milyen átmenetek megméréssel emelhetjük be a mért spektroszkópiai hálózat csúcsai közé. Eszközeink főleg adatbányászati típusú algoritmusok voltak. Megoldásként két program megírásával iteratív algoritmust adtunk meg, melyekre két programot írtunk. Az algoritmus egy bővülő csúcshalmazt hoz létre. Munkánk eredményeképp 50.253 olyan, még nem mért átmenetet találtunk, melyek asszignálásával 29.575 új energiaszintet emelhetünk a mért hálózatba.

Végezetül megemlítünk néhány olyan további kérdést a spektroszkópiai hálózatok területéről, melyekre az itt tárgyaltakhoz hasonlóan szintén matematikai módszerek alkalmazásával kereshetünk hatékonyan megoldást, legyen az gráfelmélet, adatbányászat, valószínűségszámítás vagy statisztika.