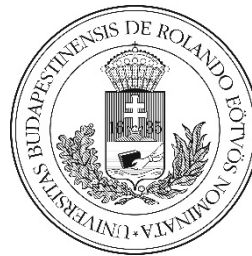


Pro Scientia Aranyérmesek Társasága
bíráló bizottsága



Dr. Vesztergom Soma
egyetemi adjunktus

Eötvös Loránd Tudományegyetem
Fizikai Kémiai Tanszék

H-1117 Budapest
Pázmány Péter sétány 1/A

Tel.: +36 1 372 2500 / 1505
E-Mail: soma.vesztergom@ttk.elte.hu

2025. május 12.

Ajánlólevél

Tisztelt Bizottság!

Jelen levelemmel *Rácsai Balázs*, az Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Kara III. évfolyamos kémia alapszakos (BSc) hallgatója *Pro Scientia Aranyéremre* beadott pályázatát kívánom támogatni.

Rácsai Balázs alapszakos tanulmányai első évében csatlakozott az ELTE Kémiai Intézetének Molekuláris Kvantumdinamika Kutatócsoportjához. A Jelölt a 2023-as nyár folyamán Mátyus Edit témavezetése mellett kezdett ismerkedni a molekuláris kvantummechanikával, majd egy numerikus matematikai módszert implementált a kutatócsoport által fejlesztett QUANTEN programcsomagba egy analitikus alakban nem ismert integrál értékének pontos kiszámítására. Az integrál molekuláris rendszerek pontos (regularizált) relativisztikus korrekcióinak kiszámításához volt szükséges, nem létezett a kiszámítására gyakorlatban jól alkalmazható módszer. Rácsai Balázs kiválóan megoldotta a feladatot, rendszeres konzultációkkal, alapvetően önálló munka révén. Ebből a kutatásból született Rácsai Balázs *Regularized relativistic corrections for molecular systems* c. TDK dolgozata, amellyel 1. díjat nyert a 37. Kémia OTDK (2025) Elméleti Kémia 2. szekciójában. Az eljárást a Journal of Chemical Physics a rangos "Communications" fejezetében közölte. Azóta Rácsai Balázs és a kutatócsoport más tagjai számos kis, molekuláris rendszerre alkalmazták a módszert regularizált relativisztikus korrekciók pontos kiszámítására.

Jelenleg folyamatban levő (zürichi és amsterdami csoportok által végzett) nagyfelbontású, precíziós spektroszkópiai mérések értelmezéséhez a relativisztikus korrekciók mellett szükséges nemadiabatikus korrekciók figyelembevétele is. Az elmúlt tanév során Rácsai Balázs a nemadiabatikus (tömeg)korrekciók elméletének fejlesztésével, numerikus kiszámításával, valamint spektroszkópiai alkalmazásával foglalkozott. Munkája várhatóan



jelentős nemzetközi érdeklődésre számot tartó, már megjelent, illetve jelenleg is kidolgozás alatt álló publikációkhoz járult hozzá.

Rácsai Balázs egyetemi (BSc) tanulmányai mellett egészen kiemelkedő tudományos tevékenységet folytat: fontos kutatási kérdések megoldásában képes hatékonyan részt venni, lelkiismeretesen elvégzi a rá bízott feladatokat, konstruktív résztvevője a rendszeres konzultációknak. Tanulmányi eredményeit illetően, Rácsai Balázs eddig kitűnő eredménnyel végezte az ELTE kémia BSc képzését.

Rácsai Balázs eddig megjelent folyóiratcikkei:

1. Balázs Rácsai, Dávid Ferenc, Ádám Margócsy, Edit Mátyus, Regularized relativistic corrections for polyelectronic and polyatomic systems with explicitly correlated Gaussians, *Journal of Chemical Physics* 160, 211102 (2024), <https://doi.org/10.1063/5.0213079> (ebben a cikkben az első szerző Rácsai Balázs végezte az algoritmus-fejlesztést, programozást, a numerikus tesztet, alkalmazásokat, valamint a kézirat első verziójának megírását).
2. Balázs Rácsai, Tibor Furtenbacher, Luciano Fusina, Gianfranco Di Lonardo, Attila G. Császár, MARVEL analysis of the high-resolution rovibrational spectra of H16O35Cl, *Journal of Molecular Spectroscopy* 384, 111561 (2022), <https://doi.org/10.1016/j.jms.2021.111561> (itt Rácsai Balázs feladata leginkább adatfeldolgozás és adatgyűjtés volt, valamint a MARVEL módszert alkalmazása a H16O37Cl és H16O37Cl kísérletileg mért rovibronikus átmeneteire).
3. Gábor Ecseri, Irén Simkó, Tibor Furtenbacher, Balázs Rácsai, Luciano Fusina, Gianfranco Di Lonardo, Kirk A. Peterson, Attila G. Császár, Joint survey of the experimental high-resolution spectra of H16O37Cl and H16O37Cl with a reanalysis of the 2v2 band, *Journal of Molecular Spectroscopy* 397, 111834 (2023), <https://doi.org/10.1016/j.jms.2023.111834> (itt Rácsai Balázs feladata leginkább adatfeldolgozás és adatgyűjtés volt, valamint a MARVEL módszert alkalmazása a H16O37Cl és H16O37Cl kísérletileg mért rovibronikus átmeneteire).

Konferencia előadások és poszterek:

1. Balázs Rácsai, Dávid Ferenc, Ádám Margócsy, Edit Mátyus: Regularized relativistic corrections for polyelectronic and polyatomic systems with explicitly correlated Gaussians, PSAS'2024 - International Conference on Precision Physics of Simple Atomic Systems, Zürich, Svájc, 2024. június 10-14; poszterprezentáció (Rácsai Balázs a bemutató szerző).
2. Balázs Rácsai: Regularized relativistic corrections for polyelectronic and polyatomic systems with explicitly correlated Gaussians, MTA Anyag- és Molekulaszerkezeti Munkabizottság ülése, Mátrafüred, 2023. november 24-25 (előadás).



Fenti eredményei alapján meggyőződése, hogy kiemelkedő TDK és OTDK eredményei alapján Rácsai Balázs méltó pályázója a Pro Scientia Aranyérem rangos elismerésének, pályázatának elfogadását ezért jó szívvel támogatom.

Tisztelettel,

Dr. Vesztergom Soma

egyetemi adjunktus

Kémia Szakterületi TDK Felelős

ELTE TTK