

Beszámoló az Anyag- és Molekulaszerkezeti Munkabizottság (AMMB) 2009. évi tevékenységéről

1. Statisztikai adatok

2009-ban legfontosabb rendezvényünk a XII. Anyagszerkezet-kutatási konferencia volt, melyet május 13-14-én tartottunk Mátrafüreden hazai kollégáink és diákjaik részvételével. Emellett a Kémiai Kutatóközpontban folytattuk a „Szerkezeti Kémiai Előadások” előadássorozat szervezését. Ezen és még néhány más kutatóhelyen szervezett előadásokon több magyar és külföldi kutató számolt be eredményeiről.

1. táblázat

Munkabizottság	ülések (és azokon az előadások száma)			külföldi előadók száma	PhD értekezés előzetes vitája	MTA doktora értekezés bemutatása	Részvétel konferencia-rendezésben, db
	< 1 napos	1 napos	több napos				
Anyag- és Molekulaszerkezeti Munkabizottság	11		1	6	2		5

2. 2009-ban elért fontosabb új eredményeink

Magas szintű kvantumkémiai számításokkal kis molekulák fiziko-kémiai paramétereinek meghatározása (Császár Attila G., ELTE TTK Kémiai Intézet, Molekulaspektroszkópai Laboratórium).

1. Készítettünk egy általános célú, variációs alapú magmozgás számító programot. A protokoll és a program neve GENIUSH, jelentése „General (GE) ro-vibrational code with numerical (N), internal-coordinate (I), user-specified (US) Hamiltonians (H)”. A kidolgozott algoritmus és a kapcsolódó program először teszik lehetővé teljesen általános rezgési belső koordináták és forgási koordináta rögzítések használatát variációs alapú magmozgás számításokban tetszőleges N-atomos molekuláris rendszerekre. Az alkalmazásokat, magukban foglalva redukált dimenziójú modellek használatát sok-atomos rendszerekre, csak a rendelkezésre álló számítógépes erőforrások korlátozzák. A J. Chem. Phys. folyóiratban megjelent cikket (E. Mátyus, G. Czakó, A. G. Császár, Toward Black-Box-Type Full- and Reduced-Dimensional Variational (Ro)Vibrational Computations, J. Chem. Phys. 2009, 130, 134112) a Virtual Journal of Biological Physics Research (<http://www.vjbio.org>) 2009. április 15-ei száma kiválasztotta, mint egy, a kutatás élvonalába tartozó cikket.

2. Sor került a variációs alapú, félmerev molekulák magmozgás számítását lehetővé tevő DEWE programrendszer (Discrete variable representation - Eckart-Watson Hamiltonian - Exact inclusion of PES) első jelentősebb mértékű továbbfejlesztésére. Sikerült a különböző, a gyakorlatban felmerülő esetekre leginkább alkalmas számítási protokollok kiválasztása az Eckart-Watson Hamilton operátor és direktszorzat bázis alkalmazása esetében. A fejlesztések lehetővé tették, hogy az 5-atomos metán molekulára minden eddigénél pontosabban lehessen kiszámítani az első 200 rezgési energiaszintet egy közel félmilliárdos méretű Hamilton-mátrix alkalmazása segítségével. A cikk (E. Mátyus, J. Šimunek, and A. G. Császár, On Variational Computation of a Large Number of Vibrational Energy Levels and Wave Functions for Medium-Sized Molecules, J. Chem. Phys. 2009, 131, 074106) 2009. augusztusában a JCP folyóirat 20 legtöbbet letöltött cikke közé került. Elkészült a DEWE program kibővítése a forgási mozgások és a szimmetria figyelembe vételét is lehetővé tevő résszel. A DEWE programot alkalmassá tettük továbbá rezgési intenzitások variációs alapú számítására is. Az új algoritmus tesztelésére az NCCO molekula példáján került sor, a vonatkozó mátrixizolációs infravörös méréseket német együttműködésben sikerült elvégezni (P. R. Schreiner, H. P. Reisenauer, E. Mátyus, A. G. Császár, A. Siddiqi, A. C. Simmonett, and W. D. Allen, Infrared Signatures of the NCCO Radical, Phys. Chem. Chem. Phys. 2009, in print). Ahogy az elvárható, a számított intenzitások nagyban segítették a kísérleti eredmények értelmezését.

Elméleti kémiai, főként hullámfüggvény-analízissel foglalkozó kutatások (MTA Kémiai Kutatóközpont Elméleti Kémiai Osztálya, Mayer István)

1. Pedro Salvadorral (Gironai Egyetem, Spanyolország) együttműködve sikerült bevezetni a molekulán belüli atomok effektív minimális bázisának fogalmát a hullámfüggvények 3-dimenziós "fuzzy atomok" típusú analízise keretében és elkészíteni az ezek meghatározásához szükséges számítógép-programot. (I. Mayer, P. Salvador: "Effective Atomic Orbitals for Fuzzy Atoms." J. Chem. Phys. 2009, 130, 234106, 1-6) A "fuzzy atomok" használata esetén a molekula által elfoglalt teret az egyes atomokhoz tartozó térrészekre bontjuk úgy, hogy az egyes atomokhoz rendelt tartományok nem válnak élesen szét, hanem fokozatosan mennek át egymásba. Az effektív minimális bázis azt jelenti, hogy közönséges vegyületek esetén a tapasztalat szerint minden atom épp annyi "effektív" atompályával járul hozzá számottevő mértékben a hullámfüggvény felépítéséhez, mint ahány pálya szerepel az adott atom klasszikus minimális bázisában. Ez az effektív minimális bázis a hullámfüggvény a posteriori analízisével megkapható. Az effektív minimális bázis létezése nem volt nyilvánvaló, így ez az eredmény elősegítheti a modern számítási eredmények összekapcsolását a klasszikus kémiai fogalmakkal. (Korábban hasonló eredményeket kaptunk a hullámfüggvényeknek az absztrakt "Hilbert-térbeli" analízisével is.)
2. Sikerült definiálni az atomi (lokális) spint molekulákban, korrelált hullámfüggvényekre, a Clark-Davidson-féle korábbi elmélet defektusait kiküszöbölve. Annak ismerete, hogy egy molekulában mekkora spin rendelhető az egyes atomokhoz elsősorban mágneses rendszerek -- átmenetifém-komplexek, (anti)ferromágnesek, "molekuláris mágnesek" -- vizsgálatánál érdekes, de általában is hasznos lehet molekulák elektronszerkezetének mélyebb megértéshez. Az ilyen adatokat a molekuláris rendszerre kapott hullámfüggvények a posteriori analízisével lehet kinyerni. Korábban Clark és Davidson javasoltak egy erre a célra szolgáló formalizmust, de azt, bár matematikailag formálisan korrekt, mi fizikailag elfogadhatatlannak találtuk, mivel a kovalens molekulák atomjaihoz is számottevő lokális spin rendel. Ezt a hibát 2007-ben sikerült kiküszöbölnünk egydetermináns hullámfüggvények esetére, s idén a javított elméletet sikerült kiterjeszteni a korrelált hullámfüggvényekre is. (I. MAYER: Local Spins: An Improved Treatment for

Correlated Wave Functions. Chem. Phys. Letters. 2009, 478, 323-326) Eduard Matitovai (Szczecini Egyetem, Lengyelország) együttműködve elkészült a módszer alkalmazását lehetővé tévő számítógép-program is.

Az MTA Kémiai Kutatóközpont és a Műegyetem Fizikai Kémia Tanszéke 2000 óta üzemelteti a közös „Lézerspektroszkópia” oktató-kutató laboratóriumot. Kutatói az elektrongerjesztési spektroszkópia területén dolgoznak, ezen belül királis anyagok spektroszkópiájával, fluoreszcens jelzőanyagokkal, fotokróm rendszerekkel foglalkoznak. A fluoreszcens anyagok közül legutóbb a metilénkékről jelent meg közleményük, amelynek témája a festék komplexalkotása kalixarénszulfonátokkal. Az utóbbi makrociklusok a nagy negatív töltéssűrűségű környezetet modellezik, ami a metilénké esetében fokozott aggregációhoz vezet. Az eredmények érdekesek lehetnek a festék biológiai (mikroszkópiai festék) és orvosi (fotodinámias terápia) alkalmazásai szempontjából. (O. Varga, M. Kubinyi, T. Vidóczy, P. Baranyai, I. Bitter, M. Kállay: Methylene blue-calixarenesulfonate supramolecular complexes and aggregates in aqueous solutions, J. Photochem. Photobiol. A 2009, 207, 167-172).

3. A tudományág hazai helyzete

Az anyag- és molekulaszervezet kutatás jelenlegi hazai helyzete – magyarországi viszonylatban - jónak mondható, bár a kutatásokhoz szükséges műszerezettség fejlesztésére az utóbbi néhány évben csak kevés forrás jutott. Az elmúlt évtized kutatói létszámkorlátozásaiból adódó csökkenést hatékonyan pótolják a doktoránsok és a kutatásba bevont egyetemi hallgatók. Az utóbbiak – a korábbi gyakorlatnak megfelelő „ismerkedés” helyett egyre inkább - komoly kutatómunkát végeznek, s még egyetemi tanulmányaik alatt (a jobbak több) tudományos közlemény társszerzőségét érdemlik ki. A hazai kutatói állomány szaktudását és eredményeit magas színvonalú közleményeik minősítik.

4. Adatok, információk a rokon szervezetekkel, egyesületekkel való kapcsolattartásról

Informális kapcsolat több MTA munkabizottsággal és az MKE-vel is van. Legaktívabb a kapcsolatunk az MTA Szervetlen és Fémorganikus Kémiai Munkabizottsággal. Jövő tavasszal egy közös többnapos hazai szimpóziumot tervezünk.

5. Adatok hazai vagy nemzetközi tudományos iskolák, műhelyek és konferenciák szervezéséről

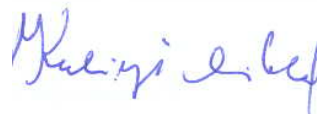
2. táblázat

Munkabizottság	Részvétel konferenciarendezésben, a rendezvény(ek) címe, helye, időpontja
Anyag- és Molekulaszerkezeti Munkabizottság	3rd Central and Eastern European Proteomic Conference 2009 október 6-9 Budapest
	27th Informal Meeting on Mass Spectrometry 2009 május 3-7 Retz, Ausztria
	XXVI. Colloquium Spectroscopicum Internationale 2009. augusztus 30-szeptember 3 Budapest
	25th European Crystallographic Meeting (ECM25) 2009 augusztus 16-21 Istanbul, Turkey
	Annual Executive Committee Meeting of the European Crystallographic Association 2009 február 27 - március 1 Budapest, Hungary.

Budapest, 2009. november 10.



titkár



elnök