



**MTA Kémiai Tudományok Osztálya  
Fizikai-kémiai Bizottság  
Polányi Mihály Kuratóriuma  
1051 Budapest, Nádor u. 7.**



az Alapítvány szponzora

---

## MEGHÍVÓ

**az MTA Kémiai Osztálya és a Fizikai-kémiai Bizottság  
ünnepi ülésére**

Az ünnepi ülés tárgya:  
**a 2012. évi Polányi Mihály díjak átadása**

időpontja:  
2013. március. 12. 14:00 óra

színhelye:  
az MTA Székház Kisterme

A 2012. évi díjazottak:

**Császár Attila**  
(fődíj)

**MiskolcZY Zsombor**  
(fiatal kutatói díj)

A díjakat átadja  
**Horvai György**  
az MTA levelező tagja, a Kémiai Osztály elnökhelyettese

A díj átvétele után a díjazottak egy-egy kb. 45 perces előadást tartanak,  
melyeknek kivonatát alább olvashatják.

Az ünnepi ülés nyilvános, arra minden érdeklődőt várunk.

Lendvay György  
az MTA FKB titkára

Pálincás Gábor  
az MTA FKB elnöke

## **A kvantumkémia negyedik korszaka**

Császár Attila

ELTE Kémiai Intézet, Molekulaszerkezet és Dinamika Laboratórium

Az utolsó igazán jelentős természettudományos paradigmaváltást a kvantummechanika megjelenése jelentette, a kémia alapvető elmélete már közel 90 éve a kvantumkémia. A kvantumkémia első három korszakát alapvetően az elektronszerkezet-számítás fejlődése határozta meg. A negyedik korszakban a variációs alapú magmozgás számítások pontossága lehetővé teszi, hogy az elektron- és magmozgások együttes tárgyalása segítségével akár effektív, hőmérsékletfüggő, kísérletileg közvetlenül meghatározható mennyiségeket számítsunk a kvantumkémia segítségével. Ezek a mennyiségek segítik az elmélet alkalmazását a szerkezetkutatásban, a nagyfelbontású molekulaszpektroszkópiában, a termokémiában, a kémiai kinetikában és a dinamikában, számos egyéb terület mellett. Meggyőződésem szerint a kísérlet avagy elmélet kérdésre ma az a válasz, hogy a kísérleti vizsgálatok, a kvantumkémiai számítások, valamint az információtechnológiai eszközök alkalmazása együttesen biztosítják a kémia további gyors ütemű fejlődéséhez szükséges háttérrel.

Az előadásban sor kerül a kvantumkémia negyedik korszakához kapcsolódó módszerfejlesztéseink, a kifinomult új elméleti eljárások (például spektroszkópiai hálózatok) rövid áttekintésére, a segítségükkel kisebb molekulákra számított eredményeink, valamint egyes, ma még egzotikusnak számító kémiai jelenségek elméleti vizsgálati lehetőségeinek bemutatására.

## **Mikrokörnyezet hatása a gerjesztett állapotból kiinduló folyamatok kinetikájára**

Miskolczi Zsombor

MTA Természettudományi Kutató Központ Molekuláris Farmakológiai Intézet

A fényelnyelést követő folyamatok kinetikájának feltárása elengedhetetlenül szükséges a különféle alkalmazási területeknek leginkább megfelelő fluoreszcenciás jelzőanyagok kifejlesztése érdekében. Ezért vizsgáljuk a molekul szerkezet és a mikrokörnyezet hatását a gerjesztett állapotból kiinduló folyamatok kinetikájára. Célunk, hogy feltérképezzük, hogy a nemkovalens kölcsönhatások, mint a hidrogénhíd-kötés, szupramolekuláris komplexképződés miképpen befolyásolja a fotofizikai folyamatok sebességét. A mért fluoreszcenciás sajátság változásának nyomonkövetésével értékes termodinamikai paraméterek határozhatók meg, reakciómechanizmusok állíthatók fel, illetve analitikai módszerek dolgozhatók ki. Fotofizikai paraméterek időbeli változásával meghatározható a komplexképződés kinetikája.

A hidrogénhíd-kötés illetve protontranszfer alapvető szerepet játszik vegyületek szingulett gerjesztett állapotának energiavesztésében. Az anyagok fényelnyelést követő folyamatainak kinetikája jelentősen módosulhat üreges, makrociklusos vegyületekbe ékelődésekor is. A makrociklus üregének a polaritása meghatározható a megfelelő fluoreszcenciás jelzőanyaggal. Az üregbe ékelődött vendégmolekula termikus és fotokémiai stabilitása nőhet. A fotokróom vegyület különböző formái közötti átalakulások sebessége hangolható makrociklusokkal.