



MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA

KÉMIAI TUDOMÁNYOK OSZTÁLYA

FIZIKAI-KÉMIAI TUDOMÁNYOS BIZOTTSÁG

POLÁNYI MIHÁLY- DÍJ KURATÓRIUMA

 General Electric

MEGHÍVÓ

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

Az ünnepi ülés tárgya:
a 2014. évi Polányi Mihály-díjak átadása

időpontja:
2015. május. 12. 10:30 óra

színhelye:
MTA Székház, Kisterem

A díjazott
Szalay Péter

A díjat átadja
Joó Ferenc
az MTA rendes tagja, osztályelnök

A díj átvétele után a díjazott egy 45 perces előadást tart,
melynek kivonatát alább olvashatják.

Az ünnepi ülés nyilvános, arra minden érdeklődőt várunk.

Lendvay György s.k.

az MTA FKB titkára

Pálinkás Gábor s.k.

az MTA FKB elnöke

1051 Budapest, Nádor utca 7. (1245 Budapest, Pf. 1000)

Telefon: +36 1 411-6306 / Fax: +36 1 411-6122 / E-mail: kemia@titkarsag.mta.hu / www.mta.hu

Magasszintű kvantumkémiai módszerek a szerkezetkutatás szolgálatában

Szalay Péter

ELTE TTK Kémiai Intézet

A kvantumkémiai számítások a kémiai kutatás természetes eszközeivé váltak, ma már preparatív munkát is alig lehet publikálni az eredményeket alátámasztó számítások nélkül. A kvantumkémiai közelítéseknek azonban sok szintje van, a számítások költsége és komplexitása rohamosan növekszik a pontossággal. Hol lehet megállni? Melyik szinten kapunk már viszonylag megbízható eredményt?

Mivel az egyszerűbb számítások ma már rutinszerűen végezhetőek, egy kvantumkémikusnak nem lehet más a feladata, mint a magasszintű módszerek fejlesztése, és olyan kérdések vizsgálata, melyekre ezek nélkül nem kaphatunk megfelelő választ. Az előadásomban be szeretném mutatni, hol tart ma a gerjesztett állapotok elektronszerkezetének leírására alkalmas elmélet, és néhány példán megmutatni, milyen problémák megoldása lehetséges ezek segítségével.