

### *Rövid méltatás:*

Császár Attila vegyész, az MTA doktora (1998), az ELTE tanszékvezető egyetemi tanára három évtizede nemzetközi szinten is kiemelkedő és elismert kutatója a kvantumkémianak, az elektron- és magmozgások elméletének, a molekulák szerkezetkutatásának, valamint a számítógépes molekulaszpektroszkópiának. Az utóbbi években elért kiemelkedő kutatási eredményei közé tartozik a spektroszkópiai hálózatok elméletének kidolgozása és azok alkalmazása nagyfelbontású molekulaszinképek értelmezésére és asszignálására, a kvantumkémia negyedik korszakának definiálása és ennek kapcsán sokoldalú módszerfejlesztés a variációs alapú magmozgás számítások területén, illetve egyes egzotikusnak tekintett kémiai jelenségek (mint pl. az alagúthatás és a rezonanciák) vizsgálata. Az általa fejlesztett elméletek segítségével kiterjedt számításokat végzett gyakorlati szempontból is fontos tudományos problémákra, mint például a földi üvegházhatás megértése. Ennek kapcsán egy IUPAC Task Group keretében nagymértékben hozzájárult a víz izotopológiai spektrumainak részletes megértéséhez.

### *Részletes indoklás:*

Császár Attila 1959-ben született Dorogon, 1983-ban szerzett – a Kar Kiváló Hallgatójaként és Népköztársasági Ösztöndíjasként – vegyész diplomát az ELTE-n. Diplomamunkáját az MKE nivódíjjal jutalmazta. Oktatói és kutatói pályafutása az ELTE-hez kapcsolódik, a külföldi tanulmányutaktól eltekintve (közte hosszabb idő eltöltése a stanford-i (USA), illetve a cambridge-i és reading-i (UK) egyetemeken) itt dolgozik 1983 óta, jelenleg egyetemi tanárként, a Fizikai-Kémiai Tanszék tanszékvezetőjeként, az általa alapított Molekulaszerkezet és Dinamika Laboratórium vezetőjeként.

Császár Attila kutatásai a kezdetektől a kvantumkémia és a nagy pontosságú kísérleti kémia eredményeinek összekapcsolására irányultak, ezen a területen számos új elméleti módszert vezetett be és alkalmazott sikerrel. A pontos, hibabecslést is tartalmazó kvantumkémiai számítások egyik világviszonylatban számon tartott úttörője. Az általa az 1990-es évek elején kifejlesztett ún. *focal-point analysis* (FPA) módszer ma már széleskörű alkalmazásra talált a kvantumkémiaiában. Az FPA módszer segítségével meghatározta az utóbbi években például a biológiai építőköveknek számító aminosavak (glicin, prolin, alanin, cisztein és treonin) konformereit, azok szerkezetét és relatív entalpiáját, ezeket ma is elfogadott referencia értékeként tartják számon a kísérleti tanulmányokban is. Ugyanezen módszer alkalmazásával rögzítette molekulák proton affinitásának skáláját, valamint egy részvételével működő IUPAC Task Group alkalmazta módszereit és eredményeit gyökök termokémiájának felülvizsgálata során.

Az utóbbi 10 évben érdeklődése alapvetően a variációs alapú magmozgás számítások és a molekulaszpektroszkópia felé irányult, jelentős számban vezetett be olyan új számítási eljárásokat és módszereket, melyek szoros kapcsolatot teremtenek a kvantumkémia és a szerkezeti kémia, illetve a nagyfelbontású spektroszkópiai mérések eredményei között. Kutatásai több kiemelkedő, jelentős nemzetközi érdeklődést kiváltó, a tématerületen meghatározó közleményt eredményeztek. A vízmolekula pontos potenciálisenergiafelületének, dipólusfelületének és rezgési-forgási spektrumának számításáról a *Science* folyóiratban 2003-ban megjelent közleményére ma már több mint 180 hivatkozás érkezett. 2012-ben jelent meg közleménye a  $H_3^+$  molekulaion spektroszkópiájáról a *Phys. Rev. Lett.* Folyóiratban (eddig 14 hivatkozással). A háromatomosnál nagyobb molekulák rezgési-forgási spektrumának variációs alapú számítására és értelmezésére új algoritmusokat és programokat fejlesztett ki (DOPI, DEWE, GENIUSH). Kidolgozta a spektroszkópiai hálózatok elméletét, mellyel a lehető legpontosabb kísérleti energiaszinteket határozta meg kis molekulákra ( $H_2O$  és izotopológjai,  $H_3^+$  és izotopológjai, ketén), az általa kifejlesztett MARVEL (Measured Active Rotational-Vibrational Levels) algoritmus új alapokra helyezte a nagyfelbontású szinképek analízisének bonyolult feladatát. Jelentős eredményeket ért el disszociációs

állapotok feletti ún. kvázistacionárius rezonancia állapotok számításában. A *Nature* folyóiratban került 2008-ban közlésre a hidroximetilén (HCOH) gyök előállításával és alagúthatással formaldehiddé történő átalakulásával kapcsolatos közleménye, megalapozva a hidroximetilén származékok érdekes és furcsa kémiáját (85 hivatkozás). Munkásságát kiválóan foglalja össze a 2012 elején a *Phys. Chem. Chem. Phys.* folyóiratban a szerkesztők felkérésére megírt „*The fourth age of quantum chemistry: Molecules in motion*” című „*Perspectives*” közleménye, mely megjelenésekor a folyóirat második legtöbbet letöltött cikkévé vált.

Császár Attila eddig több mint 180 tudományos közleményt jelentetett meg, melyekre közel 5500 hivatkozás érkezett. H-indexe a hazai vegyészek között kimagaslóan magas, 42, a cikkeire érkező hivatkozások száma évente mintegy 650-nel emelkedik. 2011-ben jelent meg angol nyelven társszerkesztőként és szerzőként is jegyzett (tan)könyve, „*Equilibrium Molecular Structures*” címmel. 1997-ben elnyerte az Elsevier kiadó „*Sir Harold Thompson*” díját. 2010-ben a Svájci Kémiai Társaság előadó körútra hívta. Két tanítványa is elnyerte a Junior Prima díjat.