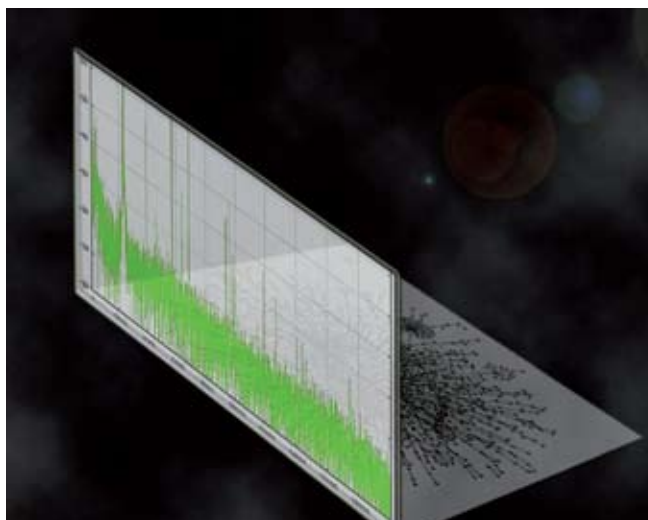


Elismerés a Kémiai Intézet kutatóinak

A spektroszkópia hálózatai – természetes kisvilágok

Az egyik legrangosabb molekulárispektroszkópai szakfolyóirat 2011. második negyedévében legtöbbet letöltött 25 cikke közé került be Császár Attila és Furtenbacher Tibor publikációja.



A Kémiai Intézet egyetemi tanára és tudományos munkatársa a spektroszkópai hálózatokról jelentette meg a komoly érdeklődést kiváltó közleményt. A *Journal of Molecular Spectroscopy* folyóirat hasábjain olvasható tudományos közlemény mindjárt megjelenése után a szaklap 25 legtöbbet letöltött cikke közé került be, jelezve, hogy a publikáció világszerte jelentős érdeklődést váltott ki a spektroszkópiával foglalkozó kutatók körében. Császár Attila az „Európai Léptékkal a Tudásért, ELTE” kutatóegyetemi projekt egyik, a kvantumkémia negyedik korszakának módszereit fejlesztő kutatócsoportját vezeti, a cikk a projekt támogatásával készült. A kollégák pozitív értékelése különösen fontos a közlemény életének ezen korai szakaszában, hiszen egy, a hagyományostól eltérő témájú közleményről van szó, melyről a szerzők paradigmaváltást várnak a molekulárispektroszkópia területén.

Spektroszkópai hálózatok.

A szerzők a molekulárispektroszkópiának olyan gráfelméleti megközelítését fejlesztették ki, mely lehetővé teszi a molekulák kísérleti vonallistájának jobb megértését, szisztematikusan növelését és javítását. A javasolt algoritmusok azon a megfigyelésen alapulnak, hogy a kvantummechanika egyszerű és természetes módon épít nagyméretű, súlyozott, irányítatlan gráfokat, ahol a diszkrét energiaszintek adják a csúcsokat, az átmenetek az éleket és az átmeneti intenzitások a súlyokat. A

molekuláris kvantummechanikai gráfok egyes részletei tanulmányozhatók nagyfelbontású spektroszkópai technikákkal, de a teljes gráf, mely a teljes vonallista információt hordozza egy adott molekulára, csak kifinomult, variációs alapú mozgás számítások segítségével vizsgálható. Mind a két megközelítés ún. spektroszkópai hálózatokat (SN) eredményez. A szerzők a víz molekula HD^{16}O izotopológjának példáján mutatják be, hogy mind a mért, mind a számított egy-fotonos abszorpciós spektroszkópai hálózatok skálafüggetlen viselkedést mutatnak annak minden szokásos következményével, beleértve csomópontok felléptét, robusztusságot, hibatűrést, és a „kisvilág” tulajdonságot. A teljes számított „determinisztikus” hálózatra a skálafüggetlenség akkor áll fenn, ha realisztikus intenzitás vágás mellett kerül sor a spektroszkópai hálózat vizsgálatára, ily módon vezetve be a „sztochasztikus” hálózatra, így módon vezetve be a „sztochasztikus” hálózatra. A molekulaszíneképek gráfelméleti megközelítése több új ötletet is ad a nagyfelbontású spektroszkópai adatokat tartalmazó információs rendszerek robusztusságának és pontosságának javítására.

Szöveg: Bódai Zsuzsanna

