

## ELŐSZÓ

A Magyar Tudományos Akadémia 180. közgyűléséhez kapcsolódóan a Kémiai Tudományok Osztálya 2010. május 7-én tudományos ülést szervezett. Inczedy János, az MTA rendes tagja javaslatára a tudományos ülés tematikája a „*Számítógépes matematikai módszerek alkalmazása a kémiában*” volt. A tudományos ülésen öt előadás hangzott el. A Magyar Kémiai Folyóirat jelen száma az elhangzott előadások közül négy előadás anyagát tartalmazza.

A korszerű számítógépes módszereket a kémia valamennyi területén alkalmazzák. A kemometriai módszerek alkalmazása a műszeres analitikában a közvetlenül nem mérhető fontos anyagi tulajdonságok meghatározása során – elsősorban sokváltozós matematikai módszerek alkalmazásával – lényeges információt nyújt. Bonyolult összetételű, sokalkotós elegyek, keverékek alkotóinak mennyiségi meghatározása ma már rutinszerűen elvégezhető. Az analitikai műszerek által szolgáltatott többdimenziós jelek számos olyan rejtett, közvetlenül nem hozzáférhető információt rejtenek, amelyek csak matematikai módszerekkel hozzáférhetők.

Az anyagi tulajdonságok tanulmányozása során a kémiai vizsgálatok nagyon jól kiegészíthetők számítógépes kísérletekkel, hiszen a szimulációk során az anyag szerkezetének molekuláris felbontású modelljét kapjuk. Számítógépes molekuladinamikai szimulációk részletes információt adnak a molekuláris rendszerek dinamikájáról, időbeli változásairól, a molekulák konformációs változásairól. Ma már rutinszerű a fehérjék és egyéb makromolekulák természetes közegükben, azaz oldatban történő szimulációja, és ezen eredmények biológiai és biokémiai alkalmazása.

A számítógéppel támogatott folyamatmérnökség, a folyamatrendszerek matematikai modelljeinek felállítása és vizsgálata létfontosságú a fenntartható fejlődést biztosító, és egymás működését is befolyásoló legkülönbözőbb folyamatok és rendszerek összehangolt működését megvalósító rendszerek tervezésében és működtetésében.

Annak ellenére, hogy a számítógépes eljárások alkalmazása Magyarországon akkor indult el, mikor a külföldi kapcsolatok még erősen akadályozva voltak, a magyar kutatók szinte első pillanattól kezdve az első nemzetközi szervezetben tagként közreműködtek. Nagyon korán megalakult az MTA Automatikus Elemzés Munkabizottsága és nemzetközi konferenciákat is szerveztek hazánkban a számítógépes matematikai módszerek kémiai alkalmazása területén.

A Magyar Kémiai Folyóirat jelen száma bepillantást ad a számítógépes matematikai módszerek kémiai alkalmazásának négy, alapvetően különböző területére.

Felinger Attila  
Pécsi Tudományegyetem, Analitikai és Környezeti Kémia Tanszék  
7624 Pécs, Ifjúság útja 6.