

## Kvantumkémia Magyarországon.

### Bevezetés a Kémiai Tudományok Osztálya MTA 2019. évi közgyűléséhez csatlakozó előadói ülésének e számban megjelenő előadásanyagához.

NÁRAY-SZABÓ Gábor

*Kémiai Intézet, Eötvös Loránd Tudományegyetem, 1117 Budapest, Pázmány Péter stny. 1A, Magyarország*

A kvantumkémia a zseniális matematikus-fizikus Paul Dirac kilencven éve leírt mondatával vette kezdetét, miszerint ismertek az alapvető fizikai törvények, melyek alapját képezik a fizika jelentős részét és a kémia egészét leíró matematikai elméletnek, csak az a nehézség, hogy az e törvények alapján levezetett egyenletek exakt megoldása túl bonyolult. Ezért kívánatos közelítő gyakorlati módszerek kifejlesztése, melyek túl sok számítás nélkül elvezethetnek a komplex atomi rendszerek fő vonásainak magyarázatához. Hazánkban Gombás Pál néhány évvel e kijelentés után kezdett el foglalkozni a témával, az atom statisztikus elméletéről írt könyve nemzetközi sikert aratott.<sup>1</sup> A kvantumkémikusok első generációja rajta kívül Gáspár Rezső,<sup>2</sup> Kapuy Ede és Török Ferenc<sup>3</sup> nevével fémjelezhető. Ezt követte a második generáció, Pulay Péter,<sup>4</sup> Fogarasi Géza,<sup>5</sup> Mayer István,<sup>6</sup> akik tanítványai és fiatalabb munkatársai alkotják a harmadik generációt (Ángyán János,<sup>7</sup> Császár Attila,<sup>6</sup> Csonka Gábor,<sup>8</sup> Lendvay György,<sup>9</sup> Nagy Ágnes,<sup>6</sup> Pápai Imre,<sup>6</sup> Surján Péter,<sup>6</sup> Szalay Péter<sup>10</sup>). A magyar kvantumkémia sikereit jelzi, hogy szép eredményeket ért el már a negyedik generáció is, amit számos, vezető nemzetközi folyóiratban megjelent publikáció, a rájuk kapott sokezer idézet, díjak, elismerések bizonyítanak (Czakó Gábor<sup>6</sup>, Kállay Mihály,<sup>11</sup> Legeza Örs,<sup>6</sup> Mátyus Edit,<sup>12</sup> Turi László<sup>13</sup>).

Az MTA Kémiai Tudományok Osztálya 2018. május 9-én „Kvantumkémia Magyarországon” címmel rendezett tudományos ülést, melyen az alábbi előadások hangzottak el:

- *Czakó Gábor*, MTA doktora: Alapvető kémiai reakciók dinamikájának és mechanizmusainak vizsgálata
- *Császár Attila*, MTA doktora: Molekulák mozgásban
- *Legeza Örs*, MTA doktora: Molekulákba kódolt információ: átmeneti fém klaszterek elektronszerkezete
- *Mayer István*, MTA doktora: Kötésrend és vegyértékindexek
- *Nagy Ágnes*, MTA doktora: Gerjesztett állapotok sűrűségfunkcionál elmélete
- *Pápai Imre*, MTA doktora: Kvantumkémia es katalizátorfejlesztés
- *Surján Péter*, MTA doktora: Elektronlokalizáció és a kémiai kötés: a “magyar iskola” eredményei
- *Szalay Péter*, MTA doktora: Elektron-korreláció és elektronszerkezet

Ezen az ülésen lehetőség nyílt arra, hogy a vegyészkutatók szélesebb köre is megismerje a kiváló eredményeket. Csak a metodikai kutatások szerepeltek a programban, az alkalmazások, melyek a modern molekuláris tudományokban már nélkülözhetetlenek, olyan széles körűek hazánkban is, hogy egyetlen ülészakon nehéz áttekinteni őket. Itthon is tapasztaljuk, hogy Dirac kívánsága valóra vált, a kvantumkémiai számítások a molekuláris szerkezetek és átalakulások leírásának, megértésének, sok esetben a kísérletek tervezésének nélkülözhetetlen eszközévé váltak.

#### Hivatkozások

1. Gombás, P. *Die statistische Theorie des Atoms und ihre Anwendungen*, Springer, Wien, 1949. <https://doi.org/10.1007/978-3-7091-2100-9>
2. Gáspár, R. Über eine approximation des Hartree-Fockschens potentials durch eine universelle potentialfunktion. *Acta Phys. Hung.* **1954**, *3*, 263-268. <https://doi.org/10.1007/BF03156228>
3. Kapuy E., Török F. *Az Atomok és molekulák kvantumelmélete*, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1975.
4. Pulay P. *Ab initio* calculation of force constants and equilibrium geometries in polyatomic molecules. I. Theory. *Mol. Phys.* **1969**, *17*, 197-204. <https://doi.org/10.1080/00268976900100941>
5. Fogarasi, G., Zhou, X.F., Taylor, P.W., Pulay, P. The Calculation of Molecular Geometries: Efficient Optimization by Natural Internal Coordinates and Empirical Correction by Offset Forces. *J. Am. Chem. Soc.* **1992**, *114*, 8191-8201. <https://doi.org/10.1021/ja00047a032>
6. Összefoglaló cikkét lásd ebben a különszámban.
7. Paier, J., Marsman, M., Hummer, K., Kresse, G., Gerber, I.C., Ángyán, J.G. Screened hybrid density functionals applied to solids. *J. Chem. Phys.* **2006**, *124*, 154709. <https://doi.org/10.1063/1.2403866>
8. Sun, J.W., Xiao, B., Fang, Y., Haunschild, R.; Hao, P., Ruzsinszky, A., Csonka, G.I., Scuseria, G.E., Perdew, J.P. Density Functionals that Recognize Covalent, Metallic, and Weak Bonds. *Phys. Rev. Lett.*, **2013**, *111*, Paper: 106401. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.111.106401>
9. Van Wyngarden, A.L., Mar, K.A., Boering, K.A. Lin, J.J., Lee, Y.T., Lin, S.Y., Guo, H., Lendvay, G. Nonstatistical behavior of reactive scattering in the O-18+O-32(2) isotope exchange reaction. *J. Am. Chem. Soc.* **2007**, *129*, 2866-2870. <https://doi.org/10.1021/ja0668163>
10. Szalay, P.G., Müller, T., Gidofalvi, G., Lischka, H., Shepard, R. Multiconfiguration self-consistent field and multireference configuration interaction methods and applications. *Chem. Rev.* **112**, 108-181, 2012. <https://doi.org/10.1021/cr200137a>

11. Rolik, Z., Szegedy, L., Ladjanszki, I., Ladoczki, B., Kállay, M. An efficient linear-scaling CCSD(T) method based on local natural orbitals.. *J. Chem. Phys.* **2013**, *139*, 094105. <https://doi.org/10.1063/1.4819401>
12. Mátyus, E. On the calculation of resonances in pre-born-oppenheimer molecular structure theory. *J. Phys. Chem. A* **2013**, *32*, 7195-7206. <https://doi.org/10.1021/jp4010696>
13. Turi, L., Rossky, P.J. Theoretical Studies of Spectroscopy and Dynamics of Hydrated Electrons. *Chem. Rev.* **2012**, *112*, 5641-5674. <https://doi.org/10.1021/cr300144z>

## Quantum Chemistry in Hungary

Quantum chemistry began with the statement of Paul Dirac ninety years ago: “The underlying physical laws necessary for the mathematical theory of a large part of physics and the whole of chemistry are thus completely known, and the difficulty is only that the exact application of these laws leads to equations much too complicated to be soluble. It therefore becomes desirable that approximate practical methods of applying quantum mechanics should be developed, which can lead to an explanation of the main features of complex atomic systems without too much computation.” Prof. Gombás was the first who made progress in quantum chemistry in Hungary already in the thirties of the last century. His book on the statistical theory of atoms became popular among theoretical chemists worldwide. The first generation of Hungarian quantum chemists included Rezső Gáspár, Ede Kapuy and Ferenc Török. They were followed by the second generation (Peter Pulay, Géza Fogarasi and István Mayer), whose students and younger colleagues form the third generation (J.G. Ángyán, A.G. Császár, G. Csonka, G. Lendvay, Á. Nagy, I. Pápai, P.R. Surján and P. Szalay). Nice results were achieved by the fourth generation, too (G. Czakó, M. Kállay, Ö. Legeza, E. Mátyus and L. Turi). Articles in this paper were written on the basis of lectures presented at the seminar of the Hungarian Academy of Sciences on May 9, 2018. The program was the following:

- *G. Czakó*: Study of the dynamics and mechanism of basic chemical reactions.
- *A. Császár*: Molecules in motion.
- *Ö. Legeza*: Information encoded in molecules, electronic structure of transition metal clusters.
- *I. Mayer*: Bond order and valence indices.
- *A. Nagy*: Density functional theory of excited states.
- *I. Pápai*: Quantum chemistry and the development of catalysts.
- *P. Surján*: Electron localisation and the chemical bond. Results of the „Hungarian school.”
- *P. Szalay*: Electron correlation and electron structure.

Only methodological issues were treated, applications are numerous, they form an essential part of the understanding and prediction of molecular structures and events.