

Tanulmányok

KIVÁLÓSÁGI KÖZPONT AZ EÖTVÖS LORÁND TUDOMÁNYEGYETEM TERMÉSZETTUDOMÁNYI KAR KÉMIAI INTÉZETÉBEN: A KVANTUMKÉMIAI ISKOLA

CENTRE OF EXCELLENCE AT THE INSTITUTE OF CHEMISTRY, FACULTY OF SCIENCE, EÖTVÖS LORÁND UNIVERSITY: THE SCHOOL OF QUANTUM CHEMISTRY

Surján Péter
az MTA doktora, egyetemi tanár
Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Kar Kémiai Intézet, Budapest
peter.surjan@ttk.elte.hu

ÖSSZEFOGLALÁS

Tanulmányunkban rámutatunk arra, hogy az elmúlt évtizedekben az elméleti kémia, ezen belül az ún. kvantumkémia területén az ELTE Kémiai Intézetében kialakult egy nemzetközi szinten kiemelkedő színvonalú tudáscentrum, iskolateremtő központ, egyfajta „center of excellence”. Nemzetközi ismertsége és elismertsége ellenére a hazai akadémiai körökben kevés szó esik erről, az intézet értékei még az egyetemen belül sem közismertek. Rövid történeti összefoglaló után ismertetjük a tudáscentrum létrejöttének tudáspolitikai háttérét és jelenlegi személyi állományát. Megadjuk a centrumban aktívan működő oktatók főbb tudományterületi paramétereit, és felsoroljuk sikeres tanítványaikat.

ABSTRACT

In our study we point out that in the last decades the Institute of Chemistry of Eötvös Loránd University has become an internationally outstanding knowledge centre, a school of quantum chemistry, a kind of “centre of excellence” in the field of theoretical chemistry, including quantum chemistry. In spite of its international recognition and reputation, little is said about it in Hungarian academic circles, and the values of the Institute are not well known even within the university. After a brief historical overview, we describe the science policy background of its creation and present the current faculty of the Knowledge Centre. We provide the main scientometric parameters of the professors who are actively working in the Centre and we list their most successful students.

Kulcsszavak: kvantumkémia, kiválósági központ, tudományos iskola

Keywords: quantum chemistry, centre of excellence, scientific school

MI A KVANTUMKÉMIA?

A kvantumkémia a *quantum chemistry* szakkifejezés magyar fordítása, a legtágabb értelemben a fizika kvantumelméletének kémiai vonatkozásait gyűjti egyetlen szóösszetételbe. Igen érdekes dologról van szó: két, tárgyában, módszereiben és szemléletében eredetileg nagyon is különböző tudományág: a fizika és a kémia összefonódásáról. Az elméleti fizika fejlődése a 20. század elejére jutott el oda, hogy egyáltalán szóba jöhetett a hagyományos, makroszkopikus tárgyak és jelenségek (vö. mechanika, csillagászat) mellett a mikrovilág (atomok, molekulák) megértése és leírása – megnyitva ezzel az utat a kémiai történések leírásához is.

Röviden, a kvantumkémia a molekuláris anyag kvantumelmélete. Határterületként, az elméleti szilárdtest-fizikával összefonódva pedig tartalmazza a polimerek és kristályok leírását is. Az anyagok tulajdonságai a kvantumkémia segítségével számszerűsíthetők és számíthatók. A kvantumfizika elvein túl alkalmazza a számítástudomány módszereit is. Alkalmas mind a mérhető mennyiségek elvi úton történő számítására, mind bonyolult, absztrakt fogalmak kvantitatív leírására is. Sőt, kvantumkémiai számítások segítségével olyan kémiai adatok is megkaphatók, amelyek kísérleti úton nem vagy csak nagy nehézségek árán férhetők hozzá.

Fontos hangsúlyozni, hogy a kvantumkémia nem lezárt terület: számos megoldásra váró tudományos problémával áll szemben. Ahogy a molekuláris tudományok mind a mai napig fejlődésben vannak, úgy fejlődik az ezek elméleti, kvantitatív hátterét adó molekuláris kvantumelmélet is.

TÖRTÉNETI ÁTTEKINTÉS: A GYÖKEREK

A kémia hagyományosan gyakorlati, kísérleti tudomány. Művelői elsősorban nem íróasztal mellett, hanem laboratóriumokban dolgozva vizsgálták az anyagot, és állítottak elő új vegyületeket. Az a változás, amely a fizikában a 19. század végére megtörtént, hogy két egyenrangú tudományról, a kísérleti, illetve az elméleti fizikáról is szó lehet, a kémiát akkor még elkerülte.

A 20. század elején kidolgozott, paradigmaváltó *kvantummechanika* az elméleti fizika igazi diadala volt: magyarázatot adott az atomok létezésének misztériumára, és pontosan leírta számos mikroszkopikus rendszer tulajdonságait. Ez a siker eleinte nem volt átütő erejű a kémia szempontjából: még az atomok körében is szinte kizárólag egyetlen elektrontól álló rendszerekre alkalmazták. A kutatók

kezdetben nem is voltak biztosak abban, hogy a kémiában tipikus, többelektronos rendszerekre érvényes-e a kvantummechanika. Így volt ez egészen addig, amíg 1927-ben Walter Heitler és Fritz London egy kvantummechanikai modellt alkalmazva meg nem magyarázta a hidrogénmolekula létezését, a tudománytörténetben először írva le ezzel a kémiai kötés létrejöttét. Szintén 1927-ben Max Born és Robert Oppenheimer szétválasztotta a molekulákon belüli elektronok gyors mozgását az atommagok lassabb rezgéseitől és a molekulák egészének forgásaitól. Ettől a dátumtól számítják a *kvantumkémia* születését.

Bár Paul Dirac, a később Nobel-díjat kapott fizikus már 1929-ben kijelentette, hogy a kvantummechanika képes a kémiai történések magyarázatára, a kémikusok ezt sokáig túlzásnak tartották.¹ Ennek oka az volt, hogy a 20. század első felében elméleti számításokat – azok bonyolultsága miatt – kémiai szempontból igazán érdekes rendszerekre nem lehetett végezni. Történtek ugyan fontos *kvantitatív* előrelépések bizonyos kémiai fogalmak kvantumfizikai értelmezésének irányában – közülük itt a sík szerkezetű molekulákat közelítőleg leíró Hückel-elméletet, Linus Pauling munkásságát (hibridizáció) vagy a molekulákon belüli atomok Mulliken-féle töltésének formuláját említjük. Bár ezek bizonyos szemléletbeli változást előrevetítettek, a kémikusok zöme akkor még nem foglalkozott kvantumkémiaiával, és az egyetemeken nem is tanították azt vegyészhallgatóknak.

Az 1960-as években Török Ferenc, az Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Kar (ELTE TTK) Általános- és Szeretlen Kémiai Tanszékén dolgozó spektroszkópus vegyész felismerte az addigra főleg fizikusok által kidolgozott kvantumkémiai elméletek óriási kémiai jelentőségét, illetve ezek lehetséges alkalmazhatóságát. Tisztában volt azzal is, hogy ha valaki vegyészként olyasmivel szeretne foglalkozni, akkor nagyon sok újat kell megtanulnia, olyasmiket, amik az akkori vegyészképzésből világszerte hiányoztak: a Hilbert-terek matematikáját és a kvantummechanikát. Török Ferenc maga is nekilátott, és felnőttként végezte el a matematikus szakot. Komoly tekintélye révén elérte, hogy 1972-ben (Magyarországon először) az ELTE vegyészképzésében kötelező tárgyként megjelent egy „Elméleti kémia” című tantárgy, amelynek ő lett az első előadója. Ez a lépés Magyarországon teljesen egyedülálló volt, sőt akkor még a világban is kevés helyen teremtettek ilyen iskolát. A címben szereplő kiválósági központ születését bizvást kapcsolhatjuk Török Ferenc professzor ezen munkásságához.²

¹ Dirac ezen korai kijelentése később kiegészítésre szorult: kiderült, hogy a kémiai történések és tulajdonságok egy részét csak az – éppen Dirac által megalapozott – relativisztikus kvantummechanika magyarázza. Ilyen tulajdonság például az arany szép sárga színe, a higany folyékony volta vagy az ólomakkumulátor működése – ezek igazi relativisztikus effektusok.

² Török professzor mellett az ELTE úttörői között néhai Kajtár Márton professzor említendő, akit a magyar olvasóközönség leginkább a *Változatok négy elemre* című csodálatos szerves kémia könyvéről ismerhet. Ő azok közé a kiváló hazai kémikusok közé tartozott, akik kísérleti kutatóként elsők között ismerték fel az elméleti (ezen belül a kvantum-) kémia jelentőségét.

Később, az Akadémiai Kiadó gondozásában jelent meg Kapuy Ede és Török Ferenc tankönyve (*Az atomok és molekulák kvantumelmélete*, Kapuy–Török, 1975), amely magyar nyelven, széles körben tette elérhetővé és tanulhatóvá a szakterületet. A könyv megírásának alapjául pedig egy ELTE TTK-s jegyzet (Török–Pulay: *Elméleti kémia*,³ 1973) szolgált.

A FELEMELKEDÉS KORSZAKA: A KÖZELMÚLT

Az 1960-as évektől kezdve világszerte robbanásszerű fejlődés indult el a kvantumkémiaiban, amit részben az – akkori mércével – nagy teljesítményű számítógépek oktatási/kutatási célú használatának bevezetése okozott, részben pedig az elméleti módszerek, eljárások fejlődése, a kvantumkémikusok téglát téglára építő kitarító munkássága.

Ez a robbanás a Török Ferenc által alapított magyar csoportot felkészülten érte. Ez a csoport vezetőjének személyén kívül elsősorban két, akkor még fiatal kutató, Pulay Péter és kicsit később Fogarasi Géza tevékenységéhez kapcsolható. Ők sokat dolgoztak együtt is, sokat merítettek Török professzor karizmatikus egyéniségéből, és abból a felismerésből, hogy a kvantummechanika valóban lehet *ancilla chimiae*,⁴ mégpedig azáltal, hogy a különböző tudományterületek határai összemosódnak (interdiszciplinaritás). Ennek megfelelően, elsősorban alkalmazott kvantumkémiaiával foglalkoztak, azonban az alkalmazások érdekében fejlesztettek elméleti metodikákat is. Ezek közül a Pulay-féle erőmódszer egyenesen korszakalkotó volt (sokan nem is hitték akkor, hogy meg lehet csinálni). Ez a világra szóló sikert aratott eljárás alapozta meg azt a ma már mindennapos gyakorlatot, hogy a többatomos molekulák egyensúlyi szerkezetét (az atomok energetikailag optimális elrendeződését) viszonylag rutinszerűen ki lehet számítani, és nem utolsósorban megalapozta az ELTE-n művelt kvantumkémia világhírét.⁵

³ A jegyzet címe részben azért nem „*Kvantumkémia*” lett, mert a korabeli vegyészek többsége idegenkedett a számára szokatlan „kvantum” szótól. Ugyanakkor a cím nagyon találó, kifejezi, hogy az „elméleti kémia” tágabb halmaz a „kvantumkémianál”.

⁴ „A kémia szolgálója”.

⁵ Az elméleti kémiai csoport óriási sikerét ezekben az években – amikor Pulay még Magyarországon volt – egy érdekes statisztika is mutatja. A legtekintélyesebb kémiai folyóirat, a *Journal of the American Chemical Society* 2003-ban fennállásának 125. évét ünnepelte, s ekkor összeállították a folyóirat történetében az idézettség alapján legsikeresebb 125 cikk listáját. Erre, a középmezőnyben felkerült Pulayék egy cikke is: *Systematic Ab Initio Gradient Calculation of Molecular Geometries, Force Constants and Dipole-Moment Derivatives* (1376 független idézet, addig) (Pulay et al., 1979). Ez nagy sikere volt a magyar tudománynak.

A fejlődés további fontos lépése tehetséges tanítványok bevonása volt. Ez első sorban Fogarasi Géza⁶ érdeme, mert – sajnos – Török professzor korán elhunyt, Pulay pedig az 1980-as években az USA-ba emigrált.⁷ Fogarasi két legsikeresebb tanítványa Császár Attila és Szalay Péter lettek, akik ma az elméleti kémia professzorai az ELTE TTK Kémiai Intézetében. Császár az MTA levelező tagja, MTA kutatócsoport-vezető, Szalay pedig az International Academy of Quantum Molecular Science tagja. Ők Fogarasival hármásban a Széchenyi-díjat is elnyerték 2017-ben.⁸

A következő lépés Surján Péter meghívása volt 1989-ben, aki abban az évben a Budapesti Műszaki Egyetemen, korábban a Chinoi kutatóközpontban volt állásban. Ő az ELTE fizikus szakán végzett 1978-ban, és ennek megfelelő szemlélettel közelítette meg a kémiai problémákat.⁹ Tudományos munkásságában kezdettől fogva az elvi és a módszertani kérdések álltak előtérben, az oktatásban pedig kidolgozta a kvantumkémia műveléséhez szükséges felsőbb matematika és kvantummechanika vegyészhallgatók számára könnyen elsajátítható tananyagát, amit korábban az egyetemisták csak kivonatossan tanultak ezen a szakon.

Szintén az 1990-es évek elején csatlakozott az ELTE kvantumkémiai iskolájához Náray-Szabó Gábor, az MTA tagja, aki abban az időben alkalmazott kvantumkémiai foglalkozott, kiváltképpen biológiai rendszerek leírásával. Hídat vert a kísérletes kutatások irányába is: kezdeményezésére valósult meg az ELTE fehérjekrisztallográfiai laboratóriuma.

Mindezen fejlemények azt eredményezték, hogy az 1990-es és a 2000-es években meglehetősen sok, nagyon tehetséges és szorgalmas vegyészhallgató csatlakozott diákkörösként, doktorandusként és fiatal kutatóként az így kialakult elméleti kémiai iskolához. Közülük néhányan más (hazai vagy külföldi) egyetemen, kutatóhelyen futottak be karriert, de többen maradtak az ELTE-n, és jelenleg is ezt az iskolát erősítik. Az iskola legsikeresebb tanítványairól a következő részben teszünk említést.

A kvantumkémiai iskola sikeréhez az alapítók és a műüket folytatók személyiségén túl érdekes módon egy kevésbé pozitív körülmény is hozzájárult. Az történt, hogy a tudomány művelésének hazai finanszírozási korlátai sokkal kevésbé zavarták az elméleti kutatásokat, mint az igen költséges kísérleti, nagy műszerekkel végzett munkát.¹⁰ A kvantumkémia művelése ugyanis sokkal „gazdasá-

⁶ Az 1980-as években ő lett az ELTE TTK-n megalakult Elméleti Kémia Laboratórium, majd az 1990-es évektől az Elméleti Kémia Tanszék vezetője.

⁷ Ez idő tájt a csoport tagja volt Császár Pál, aki fiatalon életét vesztette, és a BME-ről érkezett Pongor Gábor, jelenleg nyugdíjas.

⁸ Aktuális tudományometriai mutatóikat lásd az *1. táblázatban*.

⁹ Egyetemi doktorátusát kvantumkémiaiából szerezte, doktori szigorlatán Török Ferenc professzor vizsgáztatta.

¹⁰ Hasonló jelenség volt megfigyelhető a 20. század második felében a fizikai kutatásokban is.

gosabb”: mindössze „papírra, ceruzára” és számítógép-kapacitásra volt szükség ehhez, a tudományos kapcsolatok ápolásának költségein felül. Ezt mint lehetőséget felismerve egyre több tehetséges fiatal kutató érdeklődése fordult az elméleti kutatás irányába, magas szinten biztosítva ezzel a kvantumkémikus humán erőforrás utánpótlását.

A TUDÁSCENTRUM JELENE

Oktatók és tanítványok

Az ELTE TTK Kémiai Intézetében jelenleg határozatlan idejű munkaviszonnyal rendelkező kvantumkémikus oktatók/kutatók főbb adatait az *1. táblázatban* foglaljuk össze.

1. táblázat. A mai személyi állomány – törzstagok

Név	Munkakör, tudományos cím	MTMT-adatok	
		publikációk száma	idézettség
Császár Attila	egyetemi tanár, az MTA levelező tagja	280	10 729
Daru János	egyetemi adjunktus, PhD (2015)	14	268
Mátyus Edit	egyetemi docens, habil.	70	1108
Surján Péter	egyetemi tanár, az MTA doktora	203	3703
Szabados Ágnes	egyetemi tanár, az MTA doktora	80	922
Szalay Péter	egyetemi tanár, az MTA doktora	130	7355
Szidarovszky Tamás	tudományos munkatárs, PhD (2013)	51	662
Túri László	egyetemi tanár, az MTA doktora	53	2221

(A *Magyar Tudományos Művek Tárából [MTMT]* a „Közlemények összesen” rovatban megadott cikkek számát és az ezekre kapott független idézeteket gyűjtöttük össze – 2023. 11. 08.)

Megemlítendő még természetesen az Elméleti Kémia Laboratórium, majd Tanszék korábbi vezetője: Fogarasi Géza professor emeritus (86 publikáció, 8435 független idézet). Náray-Szabó Gábor, az MTA rendes tagja, 1992 és 2013 között egyetemi tanárként dolgozott a Tudáscentrumban (324 publikáció, 3237 független idézet).

A 2. táblázatban az iskola három szenior (Császár, Surján, Szalay) és két fiatalabb (Szabados, Mátyus) tagjának végzett doktoranduszait soroljuk fel, külön megjelölve azokat, akik jelenleg is az akadémiai szférában dolgoznak.

2. táblázat. Végzett doktoranduszok

A volt doktorandusz neve	Témavezető	Végzés éve	Jelenlegi munkahely az akadémiai szférában
Árendás Péter	Császár A. (50%)	2019	matematikus, főiskolai docens, Budapesti Gazdasági Egyetem (BGE)
Berente Imre	Szalay P. (50%)	2008	
Bódi András	Császár A. (50%)	2006	Paul Scherrer Institut (PSI), Svájc
Czakó Gábor	Császár A.	2007	egyetemi docens, Szegedi Tudományegyetem (SZTE), Lendület-nyertes
Czinki Eszter	Császár A.	2006	
Fábrí Csaba	Császár A.	2013	tudományos munkatárs, Eötvös Loránd Tudományegyetem (ELTE)
Ferenc Dávid	Mátyus E.	2023	posztdoktor, Université Toulouse III-Paul Sabatier, Franciaország
Furtenbacher Tibor	Császár A.	2009	tudományos főmunkatárs, HUN-REN-ELTE-kutatócsoport
Füsti-Molnár László	Szalay P.	1999	Austin, USA
Jeszenszki Péter	Surján P.	2015	tudományos munkatárs, ELTE
Kállay Mihály	Surján P.	2001	egyetemi tanár, Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem (BME), European Research Council – ERC- és Lendület-nyertes
Kóhalmi Dóra	Surján P.	2009	
Lázár Armand	Surján P.	2004	középiskolai tanár
Letif, Mones	Túri László (50%)	2011	Senior Staff Research Scientist, Equilibrium Energy, Cambridge, Egyesült Királyság

2. táblázat folytatása

A volt doktorandusz neve	Témavezető	Végzés éve	Jelenlegi munkahely az akadémiai szférában
Madarász Ádám	Túri László	2009	tudományos munkatárs, Magyar Kutatási Hálózat Természettudományi Kutatóközpont
Martin Santa Daria, Alberto	Mátyus E.	2022	posztdoktor, Universidad de Salamanca, Spanyolország
Mátyus Edit	Császár A.	2010	egyetemi docens, ELTE, ERC-nyertes
Mihálka Éva Zsuzsanna	Surján P. (50%), Szabados Á. (50%)	2021	tudományos munkatárs, Komenius University, Pozsony, Szlovákia, SAS PRO2 Marie Curie COFUND-nyertes
Nagy Péter	Szabados Á.	2015	tudományos munkatárs, BME, ERC-nyertes
Németh Károly	Surján P.	1996	research professor, Illinois Institute of Technology, Chicago, Illinois, USA
Papp Dóra	Császár A.	2018	posztdoktor, SzTE
Rolik Zoltán	Surján P.	2010	egyetemi adjunktus, BME
Sarka János	Császár A.	2017	posztdoktor, Universität zu Köln, Köln, Németország
Simkó Irén	Császár A.	2022	posztdoktor, USA
Szabados Ágnes	Surján P.	2002	tanszékvezető egyetemi tanár, ELTE
Szabó István	Császár A. (50%)	2016	
Szakács Péter	Surján P.	2011	
Szekeres Zsolt	Surján P.	2007	
Szidarovszky Tamás	Császár A.	2013	tudományos munkatárs, ELTE
Tajti Attila	Szalay P.	2011	tudományos munkatárs, ELTE
Tarczay György	Császár A. (50%)	2001	egyetemi tanár, ELTE, Lendület-nyertes
Zoboki Tamás	Surján P.	2015	

Azok a végzettek, akiknél nincs feltüntetve az egyetemi vagy kutatóintézeti besztás, az iparban vagy az üzleti életben dolgoznak. Fontos szempont, hogy a táblázatban szereplő PhD-hallgatók magyar állami ösztöndíjjal járták ki az ELTE (nemrégén Hevesy Györgyről elnevezett) kémia doktori iskoláját.

A fentiekén kívül kiemelendők még a következő tanítványok:

- Bérces Attila, aki Szalay Péter témavezetésével diplomázott, majd a kanadai University of Calgaryn szerzett PhD-fokozatot. Ezután több nagy gyógyszergyártó alkalmazásban vezetett számítástechnikai kémiai kutatásokat, majd hazatérve több céget is alapított (Chemistry Logic, Omixon), amelyek biomarkerekkel és szoftverekkel segítik az egészségipart.
- Paizs Béla, aki Szalay Péter és Fogarasi Géza vezetésével diplomázott, majd a Központi Kémiai Kutatóintézetben (KKKI) dolgozó Mayer István mellett doktorált az ELTE Kémiai Doktori iskolájában. Hosszú évekig a németországi Heidelbergben, a rákkutató intézetben Suhai Sándor csoportjában végzett kvantumkémiai kutatásokat. Jelenleg a neves angliai kutatóintézet, a Rosalind Franklin Institute Molecular Structure Elucidation osztályának vezetője.
- Rosta Edina, aki Surján Péter témavezetésével diplomázott az ELTE-n, majd a Nobel-díjas Arieh Warshel mellett doktorált az USA-ban; jelenleg a University College, London professzora, ERC-nyertes.

Érdemes megemlítenünk a korábban doktoráltak közül a táblázatban feltüntetett Füsti-Molnár Lászlót, aki saját szoftvercéget alapított az USA-ban, elsősorban hatékony sűrűségfüggvény-elméleten alapuló kvantumkémiai programrendszerek fejlesztésére és forgalmazására (Quantum Future Scientific Software LLC), Lázár Armandot, aki a doktorálással párhuzamosan tanári diplomát is szerzett, és a PhD-képzés befejezése óta középiskolai tanárként dolgozik, valamint Szekeres Zsoltot, aki a Morgan Stanley cégnél dolgozik, jelenleg a Data Science (adattudomány) csoport vezetője. Ugyanitt dolgozik Czinki Eszter is. Berente Imre a vegyiparban, Szakács Péter és Zoboki Tamás az informatikai iparban helyezkedett el idehaza.

A lista jól mutatja, hogy az ELTE kvantumkémikus iskolája nemzetközi szinten játszik alapvető szerepet a kutatói utánpótlás biztosításában.

Kutatási területek

Az iskola fontosabb tudományos eredményei a közelmúltban elsősorban az alábbi témákban jöttek létre:

- Molekulák rezgése, forgása, spektrumok elmélete, nagyfelbontású és precíziós molekulaszpektroszkópia (Császár Attila);
- Relativisztikus és kvantumtérelméleti korrekciók a kémiában, a precíziós spektroszkópia elmélete (Mátyus Edit);
- Konjugált polimerek, fullerének kvantumkémiaja, a kételektronos kémiai kötés kvantumkémiai modellje (Surján Péter);
- Nyílt héjú elektronpár függvények (Szabados Ágnes);
- Az elektronkorreláció elmélete, perturbációszámítás (Szabados Ágnes és Surján Péter);

- Elektronkorreláció, molekuláris tulajdonságok, potenciálfelületek, gerjesztett állapotok és biomolekulák kvantumkémiaja, molekuláris spektroszkópia, a fotokémiai reakciók dinamikája (Szalay Péter);
- Kevert kvantumos-klasszikus szimulációk elmélete és gyakorlati alkalmazásai, korrelációs függvények kvantálása (Túri László).

Szervezet

Az iskola tagjai az ELTE TTK Kémiai Intézetében több tanszéken és kutatócsoportban dolgoznak (Fizikai Kémia Tanszék: Császár, Mátyus, Surján, Szalay, Szidarovszky; Szervetlen Kémia Tanszék: Szabados; Szerves Kémia Tanszék: Daru), és a Kémiai Intézetben négy Laboratóriumot¹¹ tartanak fent:

- Elméleti Kémiai Laboratórium (Surján, Szabados, Szalay),
- Kémiai Informatikai Laboratórium (Túri),
- Molekulaszerkezet és Dinamika Laboratórium (Császár),
- Molekuláris Kvantumdinamika Kutatócsoport (Mátyus).

Igen erős csapatot képez még a HUN-REN–ELTE Komplex Kémiai Rendszerek Kutatócsoport (vezető: Császár Attila). Az iskola alkalmazásában álló fiatalabb kutatók ezen csoportok egyikében dolgoznak.

Fiatal kutatóink

Több, az iskolában végzett diákunk jelenleg pályázati forrásból van alkalmazásban az ELTE Kémiai Intézetében. Felsorolásszerűen: Tajti Attila, Furtenbacher Tibor, Fábri Csaba, Jeszenszki Péter, Margócsy Ádám, Sarka János.

Emisszió: diákjaink a világban

Amint a 2. táblázat mutatja, diákjaink egy része nem az ELTE-n, hanem más hazai vagy külföldi kutatóhelyen futott be sikeres karriert (BME; Illinois Institute of Technology, Chicago; Komenius University, Pozsony; University College, London; Szegedi Egyetem stb.). A jelen sorok írója nem tekinti veszteségnek az ország szempontjából, ha Magyarországon végzett kutatók külföldi egyetemeken dolgoznak, és ezzel bizonyítják a hazai oktatás és kutatás sikerességét.

Vendégkutatók

Alább néhány kiemelkedő kutatót sorolunk fel, akik egy-két napos látogatásnál hosszabb időt töltöttek el az ELTE TTK kvantumkémikusai között.

Wesley D. Allen	Jean Demaison	Jürgen Gauss
Masato Kobayashi	Luis Lain	Mezey Pál
Debashis Mukherjee	Bill Poirier	Oleg Polyansky
Peter R. Schreiner	John Stanton	Brian Sutcliffe
Jonathan Tennyson	Carmela Valdemoro	

¹¹ A Laboratórium az ELTE TTK Szervezeti és Működési Szabályzata szerint az Intézet kutatási célú, szervezeti egységnek nem minősülő, flexibilisen alapítható és megszüntethető egysége.

Kapcsolatok más kutatócsoportokkal

Házon belüli kapcsolatok

A kvantumkémia elnevezés nem fedi le mindazt, amit „elméleti kémia” néven nevezhetünk a 21. században. Az ELTE TTK Kémiai Intézetében is dolgoznak kollégák, akik elméleti kutatást folytatnak, de nem (elsősorban) kvantumkémiai foglalkoznak (Baranyai András és Turányi Tamás egyetemi tanárok, Farkas Ödön, Tóth Gergely és Zsély István Gyula egyetemi docensek). Az Elméleti Kémiai Laboratórium korábban intenzív együttműködést folytatott az ELTE TTK Fizikai Intézetével is (Kürti Jenő egyetemi tanár, jelenleg professor emeritus, Koltai János egyetemi docens).

Hazai kapcsolatok

Dinamikusan alkalmazkodva a felmerülő feladatokhoz, az ELTE kvantumkémiai szívesen működnek együtt más hazai kutatócsoportokkal. Ezek közül az alábbiakat emeljük ki:

- Kállay Mihály BME-n lévő csoportjával az elektronszerkezet-számítás területén;
- Fábri Csaba és Szidarovszky Tamás a Debreceni Egyetemen dolgozó Vibók Ágnes professzor asszonnyal;

A korábbi években szoros együttműködés zajlott az MTA Központi Kémiai Kutatóintézetében¹² dolgozó Mayer Istvánnal 2020-ban bekövetkezett haláláig.

Nemzetközi együttműködések

Az ELTE kvantumkémiai iskola volt, és jelenlegi tagjai kiterjedt nemzetközi együttműködésekkel folytatnak. Ezek felsorolásától itt eltekintünk, ezekről az érdeklődő olvasó az MTMT-ben dokumentált publikációk társszerzőin keresztül tájékozódhat.

A „Kapuy-előadások”

Az ELTE TTK Kémiai Intézetében működő Elméleti Kémiai Laboratórium (szoros együttműködésben a Molekulaszerkezet és Dinamika Laboratóriummal, valamint a Molekuláris Kvantumdinamika Kutatócsoporttal) szervezi az évente egy alkalommal hirdetett Kapuy-előadást.¹³ Ez egy rendkívül nagy presztízsű sorozat, amely eredetileg Császár Attila professzor kezdeményezésére indult el, és amelyre a Laboratórium egy-egy, a világ legismertebb, legkiemelkedőbb kutatói közül kiválasztott személyt hív meg, honorárium felajánlása nélkül. Egy kutató

¹² Később: ELKH, majd Magyar Kutatási Hálózat, Természettudományi Kutatóközpont.

¹³ Kapuy Ede (1928–1999) elméleti fizikusnak, a kvantumelmélet művelőjének emléket állítva.

csak egyszer kaphat meghívást. Az eddigi Kapuy-előadók listáját a 3. táblázatban gyűjtöttük össze.¹⁴

3. táblázat. A Kapuy-előadás-sorozat előadói

2023	Gustavo Scuseria	USA
2022	Barney Ellison	USA
2021	Jozef Noga	Szlovákia
2020	elmaradt a Covid-járvány miatt	
2019	Markus Reiher	Svájc
2018	Jean-Paul Malrieu	Franciaország
2017	Jerzy Ciosłowski	Lengyelország
2016	Trygve Helgaker	Norvégia
2015	Paul Ayers	Kanada
2014	Paul Mezey	Kanada, Japán
2013	Werner Kutzelnigg	Németország
2012	Hans Lischka	Ausztria/USA
2011	István Mayer	Magyarország
2010	Wilfried Meyer	Németország
2009	Enrico Clementi	Olaszország/USA
2008	Hiroshi Nakatsuji	Japán
2007	Mark Hoffmann	USA
2006	Ingvar Lindgren	Svédország
2005	Jürgen Gauss	Németország
2004	Debashis Mukherjee	India
2003	Josef Paldus	Kanada
2002	John F. Stanton	USA
2001	Rodney J. Bartlett	USA
2000	Henry F. Schaefer III	USA

¹⁴ Megjegyzendő, hogy 2000–2005 között működött a Molekulaspektroszkópai Laboratórium szervezésében egy másik annuális előadás-sorozat, a „Török Lectures” is. E sorozat előadói voltak: Péter Pulay (2000), Jonathan Tennyson (2001), Tucker Carrington (2002), Petr Čáský (2003), Brian Sutcliffe (2004), Jean Demaison (2005).

Aki kicsit is járatos a kvantumkémia irodalmában, látja, hogy a fenti előadók a világ vezető kutatói közül kerültek ki. Meghívásukra nem véletlenül, hanem munkásságuk ismeretében, gyakran informális együttműködés révén került sor. Példaként ragadjuk ki Ingvar Lindgren nevét, aki több mint két évtizeden át volt a fizikai Nobel-díj bizottságának tagja, majd 1989–1992 között annak elnöke.

A TUDÁSCENTRUM KONCEPCIÓJA, SZELLEMI SÉGE, „MISSION STATEMENT”

A fent ismertetett informális ELTE-s kvantumkémiai iskola több speciális tulajdonságot tud felmutatni, olyanokat, amelyeket a jelen összeállítás szerzője komoly értéknek tart. Mindenekelőtt azt említjük meg, hogy az iskola nem rendelkezik hierarchikus szervezettel. Nem úgy működik, hogy egy (vagy több) „főnök” ad kötelezően megoldandó feladatokat a többieknek. Minden „törzstag” önállóan keresi meg azt a tudományos témát, amelyen képességeinek megfelelően a leghatékonyabban tud dolgozni. Ennek megfelelően hangsúlyosan jelenik meg a témák diverzifikációja, ami oda vezet, hogy az iskola eredményei a kvantumkémia igen sok ágára terjednek ki, az anyagtudományi kutatásoktól az elektronkorreláció és az atommagmozgások elméletén keresztül a relativisztikus és kvantumelektrodinamikai korrekciókig. Rendkívül széles tudásbázis áll így elő. A fiatalok (diplomázók, doktoranduszok és posztdoktorok) természetesen kapnak irányítást és segítséget.

A kvantumkémiai Tudáscentrumban zajló kutatások koherenciáját a tudomány frontvonaláiban művelt témák automatikusan teremtik meg a téma konkrét mibenlététől függetlenül, azáltal, hogy a centrum minden tagja magas színvonalon dolgozik, és a szakma vezető folyóirataiban publikál („frontier science”).

JÖVŐKÉP ÉS ÖSSZEFOGLALÓ

Most, hogy a kémikus társadalom nemcsak elfogadja a kvantumkémiai számításokat, hanem egyre inkább alkalmazza is azokat, és támaszkodik is rájuk, az ELTE-s kvantumkémiai iskola szerepe is felértékelődik. Mintha véget ért volna a tudomány azon korszaka, amikor a kvantumkémikusok zárt szigeteket alkottak a vegyészek társadalmában. Ez természetesen felelősséget is ró az iskola tagjaira: mind szélesebb körben kell átadniuk ismereteiket a fiatal egyetemistáknak, akik közül néhányan a Török Ferenc professzor által fél évszázada megálmodott és megalapított grandiózus projekt folytatói lehetnek majd.

KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

A jelen összeállítás elkészítéséhez értékes javaslataival hozzájárult Császár Attila, Fogarasi Géza, Mátyus Edit, Szabados Ágnes, Szalay Péter, Turányi Tamás és Túri László.

IRODALOM

- Kapuy Ede – Török Ferenc (1975): *Az atomok és molekulák kvantumelmélete*. Budapest: Akadémiai Kiadó
- Pulay Péter – Fogarasi Géza – Pang, Frank et al. (1979): Systematic AB Initio Gradient Calculation of Molecular Geometries, Force Constants and Dipole-Moment Derivatives. *Journal of the American Chemical Society*, 101, 10, 2550–2560. DOI: 10.1021/ja00504a009
- Török Ferenc – Pulay Péter (1973): *Elméleti kémia*. Budapest: Tankönyvkiadó