

Az SZTE Kutatóegyetemi Kiválósági Központ tudásbázisának
kiszélesítése és hosszú távú szakmai fenntarthatóságának megalapozása
a kiváló tudományos utánpótlás biztosításával”



Eötvös Loránd Kollégium Kémia Műhely 2011. 12. 19.

Egy félig empirikus, félig teoretikus élet
Dr. Tasi Gyula



TÁMOP-4.2.2/B-10/1-2010-0012 projekt



A kísérleti és az elméleti kutatómunka egyaránt fontos, komplementer tevékenységek. A nyers kísérleti adatok azonban adekvát kiértékelés nélkül semmit sem érnek. Ez a tény egyértelműen mutatja napjainkban a matematika és a számítástechnika jelentőségét a kémiában.

Gimnázium (Esztergom, 1974-1977) -kémia tagozat (matematika, fizika, kémiai, biológia)

Werner Heisenberg: *A rész és az egész*, Gondolat, Budapest, 1975.

Venetianer Pál: *A molekuláris biológia időszerű kérdései*, Tankönyvkiadó, Budapest, 1974.

Beke Manó: *Bevezetés a differenciál- és integrálszámításba*, Gondolat, Budapest, 1965.

Ladik János, *Kvantumbiokémia*, Gondolat, Budapest, 1967.

(Később személyes kapcsolat Ladik Jánossal és Venetianer Pállal.)





“[...] Ami felől nincs kétségem az az, hogy a Teremtőnek nagyon kellett ismernie a **hullámmechanikát** és a **szilárd testek fizikáját**, sőt alkalmaznia is kellett azokat. Biztos, hogy az élet megformálásakor nem szorítkozott kizárólag a molekuláris szintre csak azért, hogy azt a biokémikus számára egyszerűbbé tegye.” [Albert Szent-Györgyi, Introduction to a Submolecular Biology, Academic Press, 1960]

“[...] A tudás olyan mint egy szent tehen, és az én problémám az, hogy miképp lehet egy tehenet úgy megfejni, hogy közben távol maradjunk a szarvaitól. [...] Sokan úgy vélik, hogy a könyvek tartalmát a fejünkbe kell préselni. Azt gondolom, ennek az ellenkezője közelebb áll az igazsághoz. [...] Valójában a legtöbbünknek egész életünkön át tanulni kell, és már deres fejjel történt, hogy én magam is hozzáfogtam a **kvantummechanika** tanulmányozásához. [...]” [Albert Szent-Györgyi, Teaching and the Expanding Knowledge, Science, 146, 1278 (1964)]



Egyetem, JATE (Szeged, 1978-1980, 1980-1985, vegyész szak, summa cum laude)

Szász Pál: *A differenciál- és integrálszámítás elemei I-II*, Közoktatásügyi Kiadóvállalat, Budapest, 1951.

Paul R. Halmos: *Véges dimenziós vektorterek*, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1984.

Marx György: *Kvantummechanika*, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1964.

Ladik János: *Kvantumkémia*, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1969.

D.M. Bishop: *Group Theory and Chemistry*, Clarendon Press, Oxford, 1973.

A. Szabo , N.S. Ostlund: *Modern Quantum Chemistry*, Macmillan Publishing Co., Inc., 1982.



Empíria (1983-1992)

- heterogén katalízis zeolitokon (termosztált cirkulációs reaktor építése, GC-analízis, szimuláció, paraméterbecslés)
- gázok adszorpciója zeolitokon (volumetrikus adszorpciós berendezés építése, paraméterbecslés)
- IR, UV-Vis spektroszkópiai tanulmányok zeolitokon (spektrumok dekonvolúciója, kiértékelése)

Együttműködés Dr. Horst Förster professzorral és csoportjával

1990: Hamburgi Egyetem, Fizikai-kémiai Intézet (3 hónap)

1992: Hamburgi Egyetem, Fizikai-kémiai Intézet (6 hónap)

Tasi Gyula: *Kis molekulák adszorpciója és átalakulása zeolitokban: kísérlet és elmélet*, Kandidátusi értekezés, 1993.

Teória (1985-)

PcMol (1986-1992): Semiempirical quantum chemical calculations on microcomputers, CheMicro Ltd., Budapest (Együttműködés Náray-Szabó Gábor akadémikussal.)

Náray-Szabó Gábor: *Alkalmazott kvantumkémia*, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1979.

G. Náray-Szabó, P.R. Surján, J.G. Ángyán: *Applied quantum chemistry*, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1987.

Kapuy Ede, Török Ferenc: *Az atomok és molekulák kvantumelmélete*, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1975.

Kapuy Ede (1928-1999)

12th Ede Kapuy Memorial Lecture (2011): Dr. Mayer István

Molekulák reaktivitásának, hasonlóságának jellemzése:
molekuláris elektrosztatikus potenciáltérképek és atomi
töltések számítása

Representation of molecules by atomic charges: a new population analysis. Journal of Computational Chemistry, 1992, **13**: p. 371-379.

Calculation of electrostatic potential maps and atomic charges for large molecules. Journal of Chemical Information and Computer Sciences, 1993, **33**: p. 296-299.

Using molecular electrostatic potential maps for similarity studies.
Topics in Current Chemistry, 1995, **174**: p. 45-71.

Gyógyszermolekulák tervezése (egy magyar-amerikai céggel való kooperáció)



Kutatómunka Japánban: Dr. Fujio Mizukami professzorral való együttműködés (1995-2001), Tsukuba Science City



*National Institute of
Advanced Industrial Science
and Technology*
AIST







選んだ。



元素の周期表

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1	1H 水素 1.008																2He ヘリウム 4.003
	▶ は金属元素。 は非金属元素。 ▶ 原子番号は国際原素量表の値を有効数字4桁で示した。 ▶ () 内は、その元素の代表的な同位体の質量数を示した。																
	3Li リチウム 6.941	4Be ベリリウム 9.012							(読み方) 原子番号 記号 元素名 質量数 原子番号 記号 元素名 質量数			5B 硼 10.81	6C 炭素 12.01	7N 窒素 14.01	8O 酸素 16.00	9F フッ素 19.00	10Ne ネオン 20.18
	11Na ナトリウム 22.99	12Mg マグネシウム 24.31										13Al アルミニウム 26.98	14Si シリコン 28.09	15P リン 30.97	16S 硫黄 32.07	17Cl 塩素 35.45	18Ar アルゴン 39.96
	19K カリウム 39.10	20Ca カルシウム 40.08	21Sc スカンジウム 44.96	22Ti チタン 47.88	23V バナジウム 50.94	24Cr クロム 51.99	25Mn マンガン 54.94	26Fe 鉄 55.85	27Co コバルト 58.93	28Ni ニッケル 58.69	29Cu 銅 63.55	30Zn 亜鉛 65.39	31Ga ガリウム 69.72	32Ge ゲルマニウム 72.61	33As アセニウム 74.92	34Se セレン 78.96	36Kr クリプトン 83.80
	37Rb ルビジウム 85.47	38Sr ストロンチウム 87.62	39Y イットリウム 88.91	40Zr ジルコニウム 91.22	41Nb ニオブ 92.91	42Mo モリブデン 95.94	43Tc テクネチウム 98.91	44Ru ルビジウム 101.1	45Rh ロジウム 100.9	46Pd パラジウム 106.4	47Ag 銀 107.9	48Cd カドミウム 112.4	49In インジウム 114.8	50Sn スズ 118.7	51Sb アンチモン 121.8	52Te テルル 127.6	54Xe キセノン 131.3
	55Cs セシウム 132.9	56Ba バリウム 137.3	57-71 ランタノイド 138.9	72Hf ハフニウム 178.5	73Ta タンタル 180.9	74W モリブデン 183.8	75Re ロジウム 186.2	76Os オスミウム 190.2	77Ir イリジウム 192.2	78Pt プラチナ 195.1	79Au 金 197.0	80Hg 水銀 200.6	81Tl タリウム 204.4	82Pb 鉛 207.2	83Bi ビスマuth 209.0	84Po ポロニウム (210)	86Rn ラドン (222)
7	87Fr フランシウム 223		89-103 アクチノイド 226														
	ランタノイド																
	57La ランタン 138.9	58Ce セリウム 140.1	59Pr プラセオジム 140.9	60Nd ネオジム 144.2	61Pm プロメチウム 145.0	62Sm サマリウム 150.4	63Eu ユークリウム 152.0	64Gd ガドリウム 157.3	65Tb テルビウム 158.9	66Dy ジスプロシウム 162.5	67Ho ホウメリウム 164.9	68Er エルビウム 167.3	69Tm テュリウム 168.9	70Yb ytterbium 173.0	71Lu ルテチウム 175.0		
	アクチノイド																
	89Ac アクチン 227.0	90Th トランシウム 232.0	91Pa プロアクチニウム 231.0	92U ウラン 238.0	93Np ネプツニウム 237.0	94Pu プルトニウム 239.0	95Am アメリシウム 243.0	96Cm カリホルニウム 247.0	97Bk ベルカリウム 247.0	98Cf カリフォルニウム 251.0	99Es エイスンマン 252.0	100Fm フェルミウム 257.0	101Md モリブデン 288.1	102No ノボリウム 289.1	103Lr ロレンシウム 260.1		



SZÉCHENYI TERV

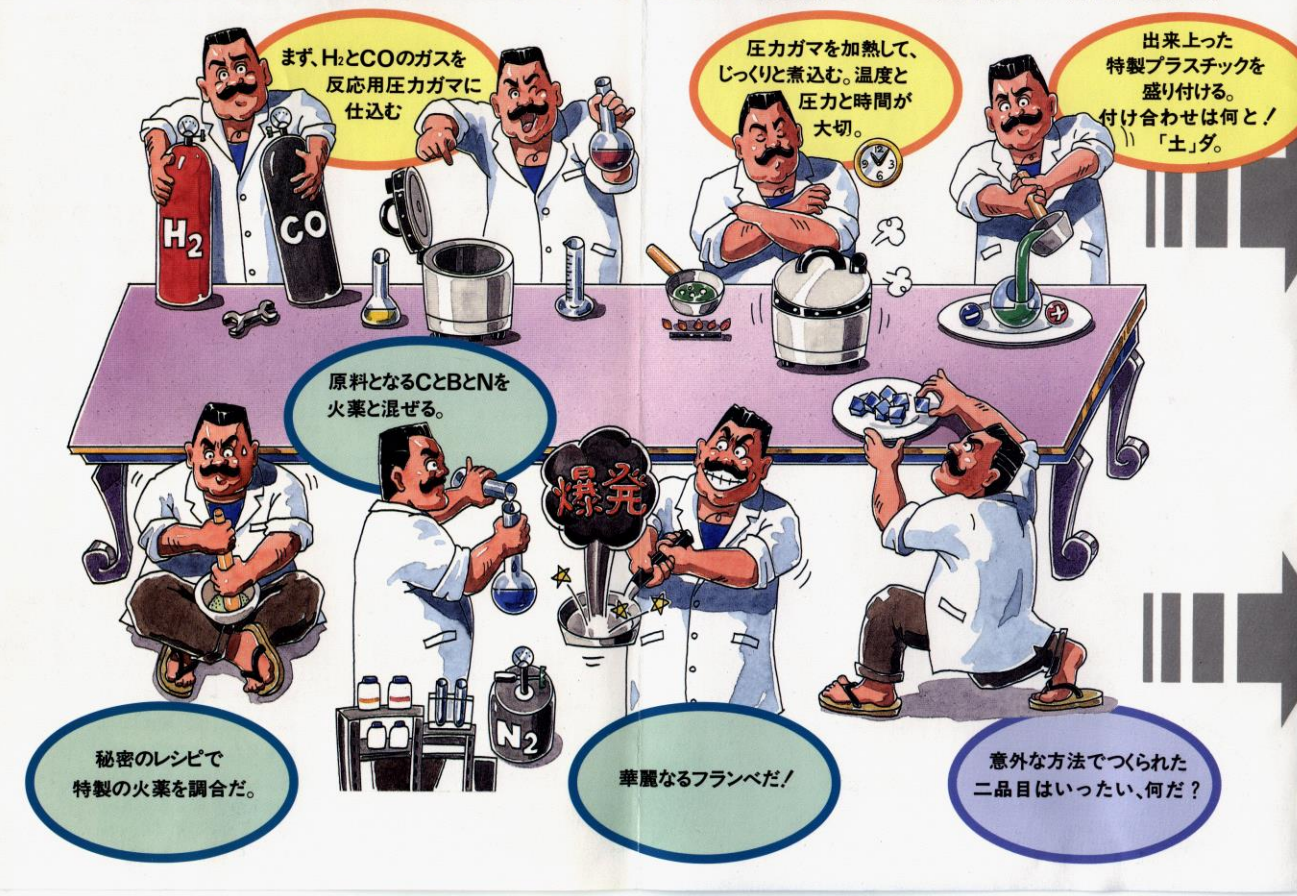


MAGYARORSZÁG MEGÚJUL



A projekt az Európai Unió támogatásával,
az Európai Szociális Alap
társfinanszírozásával valósul meg.

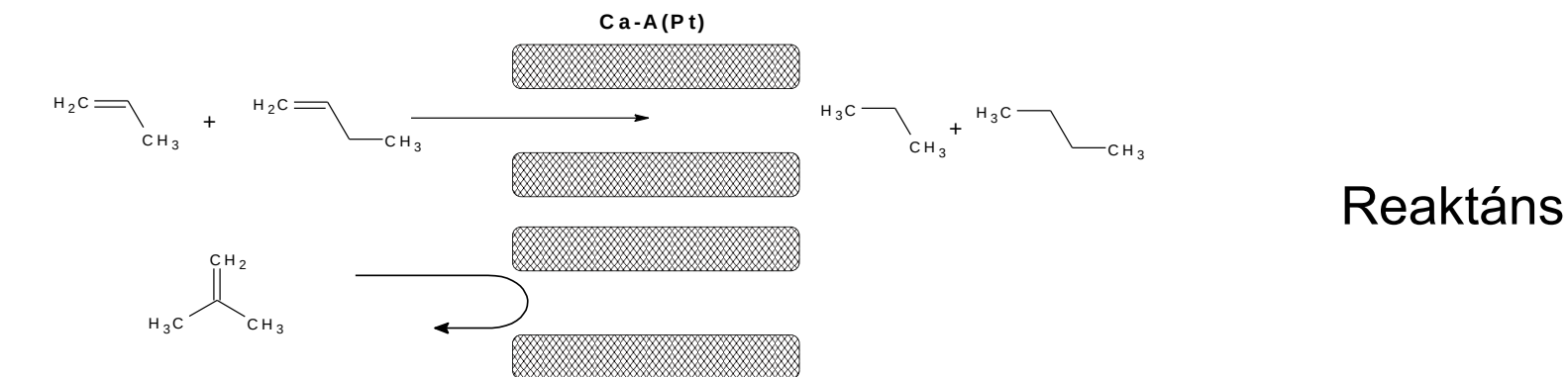
私の自慢の調理場で何が生まれるか？ 秘伝の腕前をトクと見物してくれたまえ。



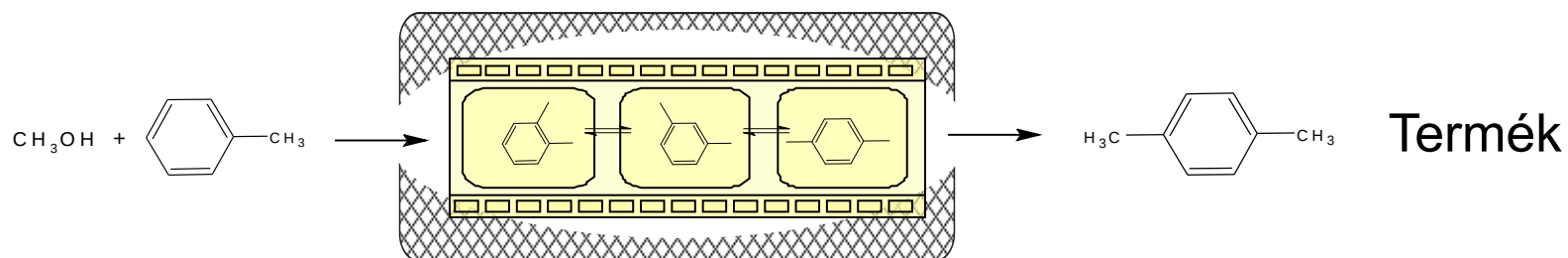
Molekulák alakja és mérete: alakszelektív katalízis



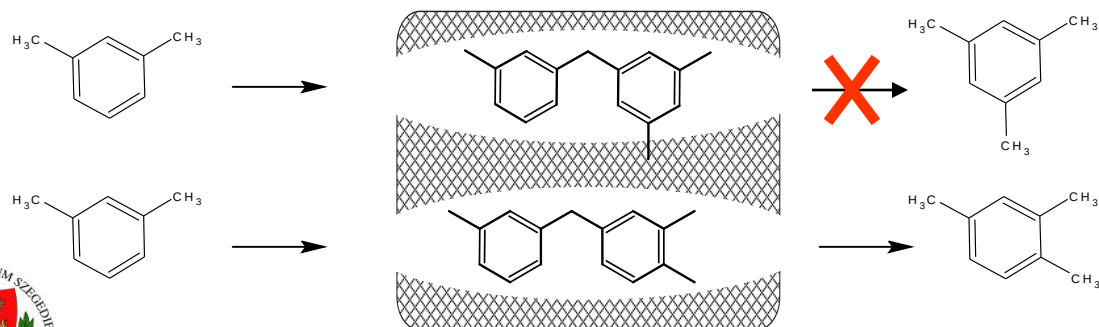
Alakszelektív reakciók



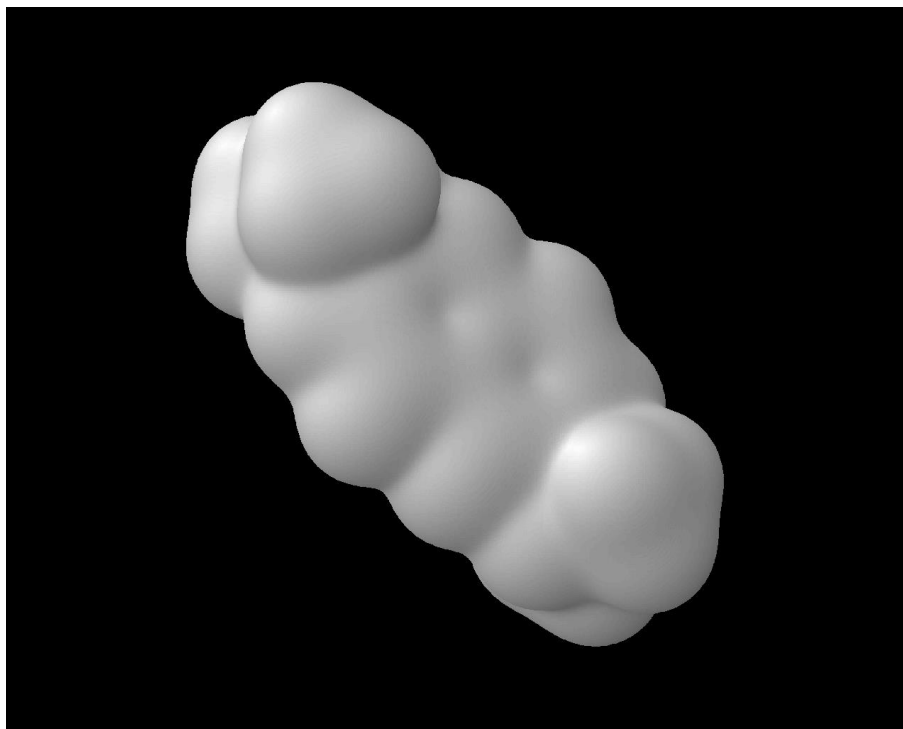
Reaktáns



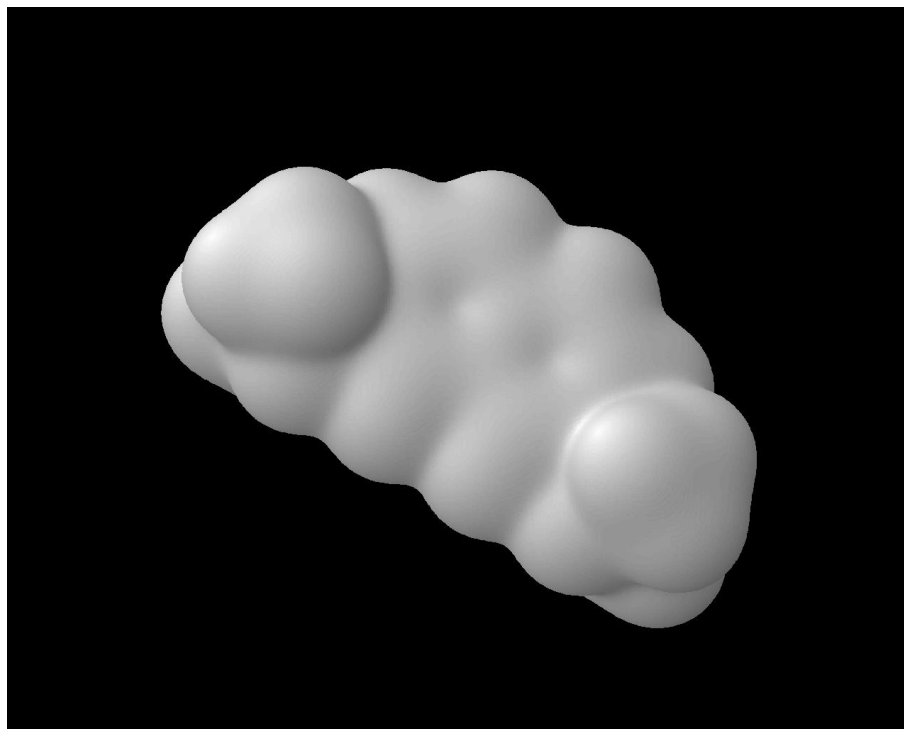
Termék



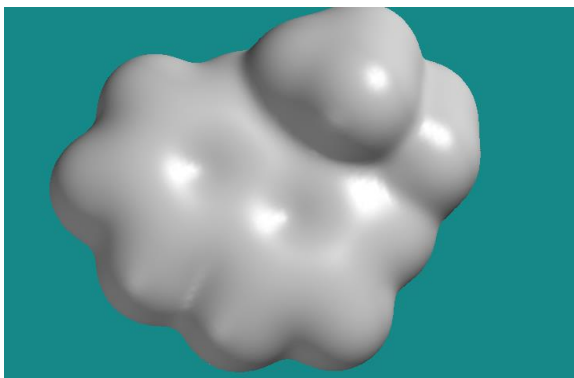
Átmeneti állapot



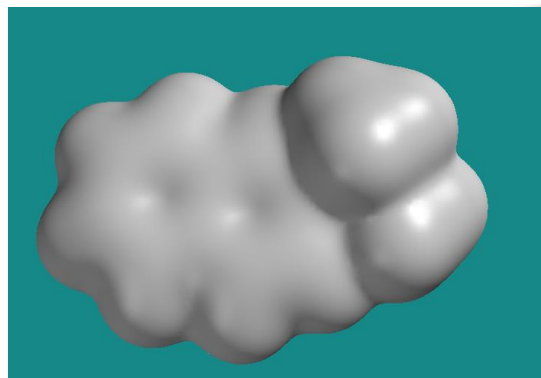
2,6-DIPN



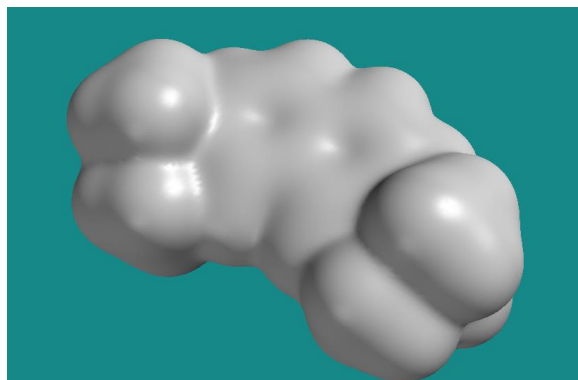
2,7-DIPN



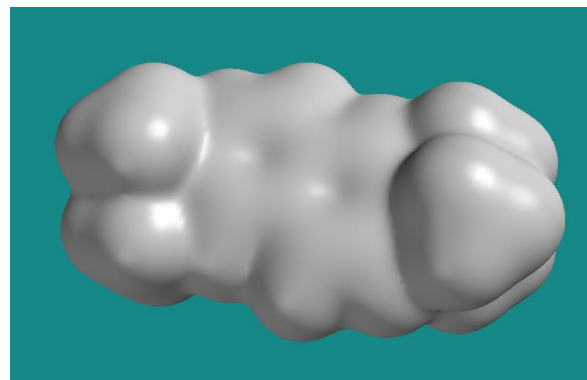
1-TBN



2-TBN



2,7-DTBN



2,6-DTBN

Molecular Electrostatics, Energetics, and Dynamics of the Alkylation of Naphthalene: ... Journal of Physical Chemistry A, 2000. **104**: p. 1337-1345.

Positional Isomerization of Dialkylnaphthalenes: A Comprehensive Interpretation of the Selective Formation of 2,6-DIPN over HM Zeolite. Journal of Physical Chemistry A, 2001. **105**: p. 6513-6518.

Molecular shape, dimensions, and shape selective catalysis. THEOCHEM, 2003. **666-667**: p. 69-77.

Preparation of monodispersed Pt nanoparticles in MCM-41, catalytic applications. Catalysis Communications, 2008. **9**: p. 762-768.

Comment on "Shape-selective diisopropylation of naphthalene in H-mordenite: Myth or reality?" Journal of Catalysis, 2011. **279**: p. 229-230.

Molekulák konformációs analízise

Scaled effective one-electron method based on G2-theory: results for aliphatic alkane molecules. J. Chem. Inf. Comput. Sci., 1998. **38**(4): p. 632-638.

Enumeration of the conformers of unbranched aliphatic alkanes. J. Phys. Chem. A, 1998. **102**(39): p. 7698-7703.

Quantum algebraic-combinatoric study of the conformational properties of n-alkanes. I. J. Math. Chem., 1999. **25**: p. 55-64.

Quantum algebraic-combinatoric study of the conformational properties of n-alkanes. II. J. Math. Chem., 2000. **27**(3): p. 191-199.

Similarity analysis of the conformational potential energy surface of n-pentane. Computational and Theoretical Chemistry, 2011. **963**: p. 378-383.



Teljes variációs ab initio kvantumkémiai számítások atomokra és molekulákra

Hartree-Fock-limit energies and structures with a few dozen distributed Gaussians. Chemical Physics Letters, 2007. **438**: p. 139.

An extension of the virial theorem for general wave functions. Chemical Physics Letters, 2007. **449**(1-3): p. 221–226.

Energy decomposition based on the extended virial theorem: Hartree-Fock and second-order Møller–Plesset results. International Journal of Quantum Chemistry, 2009. **109**(11): p. 2599–2605.

*An improved small Pople-type basis set (MP6-31G**) for aromatic hydrocarbons.* Chemical Physics Letters, 2012. in preparation.

Electronic structure computations with distributed Gaussians. Journal of Chemical Theory and Computation, 2012. in preparation.

Ab initio termokémia

The Origin of Systematic Error in the Standard Enthalpies of Formation of Hydrocarbons Computed via Atomization Schemes. ChemPhysChem, 2006. **7**: p. 1664-1667.

Proton Affinity and Enthalpy of Formation of Formaldehyde. International Journal of Quantum Chemistry, 2009. **109**(11): p. 2393–2409.

High-Accuracy Theoretical Study on the Thermochemistry of Several Formaldehyde Derivatives. J. Phys. Chem. A, 2010. **114**: p. 13213–13221.

High-accuracy theoretical thermochemistry of atmospherically important sulfur-containing molecules. J. Phys. Chem. A, 2011. **115**: p. 7823–7833.

Benchmarking experimental and computational thermochemical data: the case study of butane conformers. Journal of Chemical Theory and Computation, 2012. accepted for publication.

Mérési adatok precíz kiértékelése: a hibaterjedés számítása

Analytical and Numerical Computation of Error Propagation of Model Parameters. Journal of Mathematical Chemistry, 2011. **49**: p. 1322–1329.

Linearizálni vagy nem linearizálni: paraméterek hibaterjedésének analitikus és numerikus számítása. Magyar Kemikusok Lapja, 2011. **46**(12): p. 383-388.

Tasi, G., Matematikai Kémia (*Mathematical Chemistry*). 2009, Szeged: JATEPress.

Tasi, G., Számítógépes Kémia (*Computational Chemistry*). 2010, Szeged: JATEPress.

Bevezetés a kvantumkémiaiába, Kvantumkémia, Kvantumkorszakok,
Fizikai-kémia



Köszönöm a figyelmet!

