



## Válogatás

Az MTA Kémiai Tudományok Osztálya által kiválasztott aktuális két publikáció közül az első egy új CCMD- (Coupled Cluster Molecular Dynamics) eljárást mutat be, amely a gépi tanuláson és a lokális korrelációs módszereken alapul. A második közleményben a szerzőknek kvantummechanikai számításokkal sikerült felfedni a  $\text{HHe}^+_3$  molekulakomplex esetében az atommagok nagymértékű delokalizációját.

**Perczel András**

osztályelnök, az MTA rendes tagja

## Coupled cluster-molekuladinamika tömbfázisú rendszerekre géptanulás-alapú potenciálok segítségével: referenciaszámítás a folyadékfázisú vízre

*Physical Review Letters*, 2022

<https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.129.226001>

János Daru<sup>1,2</sup>, Harald Forbert<sup>3</sup>, Jörg Behler<sup>4</sup>, Dominik Marx<sup>1</sup>

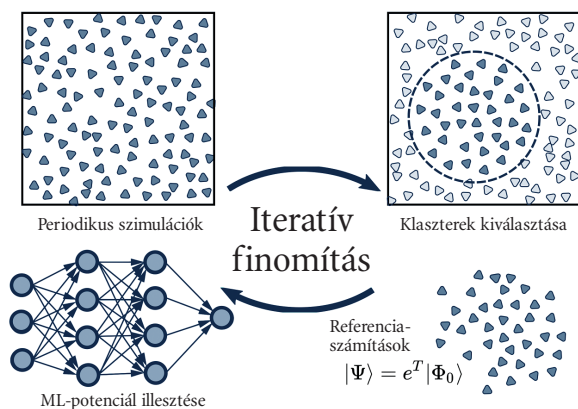
<sup>1</sup> Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Ruhr-Universität Bochum, 44780 Bochum, Germany

<sup>2</sup> Eötvös Loránd University, Department of Organic Chemistry, Budapest, Hungary

<sup>3</sup> Center for Solvation Science ZEMOS, Ruhr-Universität Bochum, Bochum, Germany

<sup>4</sup> Universität Göttingen, Institut für Physikalische Chemie, Theoretische Chemie, Göttingen, Germany

A közlemény azt az új CCMD-eljárást mutatja be, amely a gépi tanuláson és a lokális korrelációs módszereken alapul. Az eljárás segítségével tömbfázisú rendszerek (folyadékok, oldatok, szilárd anyagok) esetén is lehetővé vált olyan pontos leírás, ami korábban csak gázfázisú molekulák esetén volt elérhető. A CCMD-t a szoba-hőmérsékletű vízre alkalmazva sikerült ennek a komplex rendszernek minden fontosabb kísérleti eredményét visszakapni, tisztán elméleti úton.



## Atommagok kvantummos delokalizációja és annak rezgési-forgási ujjlenyomatai

*Angewandte Chemie International Edition*, 2023

<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/full/10.1002/anie.202306744>

Irén Simkó<sup>1,2</sup>, Christoph Schran<sup>3</sup>, Fabien Briec<sup>3</sup>, Fábri Csaba<sup>1</sup>, Oskar Asvány<sup>4</sup>, Stephan Schlemmer<sup>4</sup>, Dominik Marx<sup>3</sup>, Attila G. Császár<sup>1</sup>

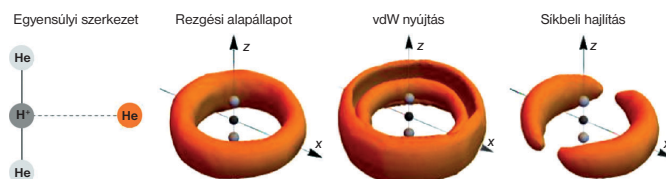
<sup>1</sup> ELTE Eötvös Loránd Tudományegyetem, Kémiai Intézet és MTA-ELTE Komplex Kémiai Rendszerek Kutatócsoport

<sup>2</sup> ELTE Hevesy György Kémia Doktori Iskola

<sup>3</sup> Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Ruhr-Universität Bochum

<sup>4</sup> I. Physikalisches Institut, Universität zu Köln

A kvantumkémia egyetemi tananyagot képező törvényei szerint a molekulákban lévő atommagok lokális mozgást végeznek egy ún. egyensúlyi szerkezet kis környezetében. Ez a közlemény az atommagok nagymértékű delokalizációjára mutat példát a  $\text{HHe}^+_3$  molekulakomplex esetében: míg a komplex egyensúlyi szerkezete T alakú és planáris (kétdimenziós), addig a valódi szerkezet térbelivé (háromdimenzióssá) válik, a szolvatól He-atom magssűrűsége nagy kiterjedésű tóruszal jellemezhető. A vizsgálat bemutatja azt is, hogy a delokalizáció miképpen változik a komplex rezgéseinek függvényében: a magssűrűséget jellemző tórusz megmarad, de különböző mértékben, jól értelmezhetően felhasad.



## Az MTA Fenntartható Fejlődés Elnöki Bizottságának állásfoglalása a Magyarországon jelenleg működő, telepítés alatt álló és jövőben telepítendő akkumulátorgyárak ügyében

A fenntartható fejlődés elveivel ellentétben a már megvalósult, illetve megvalósítás alatt álló fejlesztéseket nem előzte meg széles körű társadalmi tájékoztatás és egyeztetés, amely megfelelő stratégiai hatásvizsgálatokon alapulna, illetve az érintettek számára nem volt mód esetleges kételyeik, ellenérveik érdemi artikulálására, a fejlesztések valamennyi fenntarthatósági aspektusának a megismerésére. A fenntarthatóság szempontrendszerét leegyszerűbben egy háromlábú székhez szokták hasonlítani; ha bármelyik lába sérül, az egész maradandó károkat szenvedhet, kifejezve ezzel azt az üzenetet, hogy a gazdasági, a társadalmi és a környezeti szempontok egyaránt nélkülözhetetlenek, és ezek harmóniája, integrált szemlélete a legjobb megoldás. Az MTA Fenntartható Fejlődés Elnöki Bizottsága sem mentes a sokakat foglalkoztató aggodalmaktól, ezért – kiváltképpen a megnyugtató rendezés érdekében – észrevételeket és ajánlásokat tett a döntéshozóknak.

Ezek a cím alapján megkereshetők, illetve megtalálhatók itt: <https://mta.hu/fenntarthato-fejlodes/az-mta-fenntarthato-fejlodes-elnoki-bizottsaganak-ffeb-allasfoglalasa-a-magyarorszagon-jelenleg-mukodo-telepites-alatt-allo-es-jovoben-telepitendo-akkumulatorgyarak-ugyeben-113218>