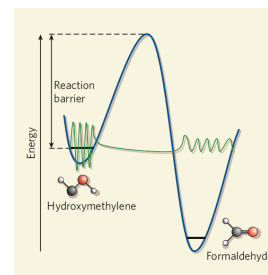


## Mátyus Edit: Alagúteffektus a kémiában

Előadásom első felében egy több évtizeden át keresett egyszerű karbén, a transz-hidroximetilén molekula ( $t$ -HCOH) előállításáról, azonosításáról és jellemzéséről fogok beszélni. A molekula egy érdekes tulajdonsága, hogy nemesgáz mátrixokban 10–20 K hőmérsékleten körülbelül két órás felezési idővel formaldehiddé alakul át, amelyetől az elméleti számítások alapján egy közel 30 kcal/mol magasságú energiagát választja el. Ezt a klasszikus mechanika alapján nem várt átrendeződést alagúteffektussal, azaz az atommagokra vonatkozó kvantummechanikai effektusokkal magyaráztuk. Hasonló alapon értelmezhető, hogy az említett kísérleti körülmények mellett a  $t$ -HCOD molekula esetén átrendeződés nem tapasztalható. Az előadás második felében a transz-hidroximetilén molekula átrendeződésének egyszerűbb, de kvalitatíve jól működő elméleti modelljeit ismertetem. Végezetül, ezen egyszerű modellek kiterjesztéseként, röviden beszélek az atommagok mozgásának pontos kvantummechanikai leírásáról molekularezgések és reakciók esetén.



- ◇ P. R. Schreiner, H. P. Reisenauer, F. C. Pickard IV, A. C. Simmonett, W. D. Allen, E. Mátyus, and A. G. Császár, *Nature* **453**, 906 (2008).
- ◇ E. Mátyus, G. Czakó, and A. G. Császár, *J. Chem. Phys* **130**, 134112 (2009).