

Jelen OTKA pályázat valójában két pályázat együttese, hiszen az eredeti, K72885-ös számú, „Teljes rezgési-forgási színeképek meghatározása” című pályázat kiegészült egy IN77954-es számú, „Potential energy and property hypersurfaces” című, Prof. Wesley D. Allen-nel (University of Georgia, Athens, GA, USA) közös pályázattal.

A K72885-ös pályázat egyik kijelölt bírálója a pályázat értékelésekor azt írta, hogy „amennyiben a kifejtett számos alapkutató feladatpont megvalósul, de még részleges teljesítés esetén is, ez a pályázat fontos nemzetközi jelentőségű eredményeket ígér.” Egy másik bíráló pedig azt írta, hogy „a kutatási terv alapján nem várok \*alapvetően új\* tudományos felfedezéseket a projektől”. A két bírálat kapcsán annyit jegyeznek meg most, a pályázat lezárása után, hogy véleményem szerint az eredeti munkatervben kitűzött alapkutató feladatok döntő része megvalósult (véleményem szerint annál több is), valamint az alapkutató feladatok megvalósítása során több olyan eredményt is elértünk, mely jelentősen átalakíthatja a kvantumkémiai magmozgás számítások felhasználását például a molekulaszpektroszkópiában, kiterjeszti azt egzotikus jelenségek vizsgálatára (alagúthatás, rezonanciák), valamint a spektroszkópiai hálózatok fogalmának bevezetésével új paradigma született a nagy felbontású spektroszkópiai adatok kezelése kapcsán. Kulcsszószerűen a tématerületek, ahol alapkutatói eredményeket közöltem az OTKA támogatásával, s melyek az alábbi összefoglalás vázát adják: kvantumkémia, variációs alapú magmozgás számítások, számítógépes nagyfelbontású molekulaszpektroszkópia, alkalmazott kvantumkémia, *ab initio* termokémia és szerkezetkutatás.

Természetesen a pályázatban megfogalmazott kutatási célok eléréséhez szükséges munkát egyedül nem tudtam volna elvégezni. Így már a pályázatban is szerepeltek azok a magyar hallgatók, akiknek kiváló munkája nélkül a kutatási célkitűzéseim nem valósulhattak volna meg. A kutatómunkában több jelenlegi vagy volt magyar PhD hallgatóm vett részt, nevük a cikkekben ismételtelen megjelenik. Szerencsére – az előzetes terveknek megfelelően – nemzetközi együttműködések is segítettek a munkámat, itt is külön kiemelő a Prof. Allen-nel megvalósult, az OTKA által is támogatott együttműködés. Fontos eredménynek tekintem, hogy a projekt során magyar (és részben külföldi) hallgatók képzése valósult meg különböző témákban, azaz lehetőség szerint az érdeklődésüknek és adottságaiknak megfelelően. Kutatói eredményeim egy részének széles körű hasznosulását segíti elő, hogy két IUPAC által finanszírozott kutatói programban is közreműködtem az OTKA pályázat megvalósulásának ideje alatt. Az elvégzett munka is hozzájárult ahhoz, hogy beválasztottak az IUPAC Division I vezetésébe a 2012-13-as évekre Associate Member (AM) kategóriában.

A pályázat ideje alatt az OTKA említésével összesen 38 angol nyelvű és egy magyar nyelvű közleményem jelent meg, előbbieket a szakma vezető folyóirataiban. Egy cikk jelent meg a *Nature*-ben (2008), egy-egy a *Chem. Eur. J.* (2010) és a *Phys. Rev. Lett.* (2012) folyóiratokban, és sok közleményünket jelentette meg legszűkebb szakterületem legelismertebb folyóirata, a *J. Chem. Phys.* A közlemények összesített impakt faktora több mint 100, a közleményekre már eddig is több mint 250 hivatkozás érkezett az ISI szerint (ezek kb. 2/3-a független hivatkozás).

Itt kívánom megjegyezni, hogy a Természet Világa szerkesztőinek felkérésére 2009-ben közleményt jelentettem meg a folyóiratban „A földi üvegházhatás” címmel. Ez az ismeretterjesztő cikk az utóbbi években elért egyes kutatói eredményeim alapján kísérletet tett arra, hogy bemutassa a kvantumkémiai számítások alkalmazását egy gyakorlati szempontból is kiemelkedő fontossággal bíró tématerületen.

A munkám keltette érdeklődésnek és a főszerkesztő felkérésének eleget téve, megírtuk a magok mozgására vonatkozó eredményeinket taglaló összefoglaló (‘Perspectives’) cikket a *Phys. Chem. Chem. Phys.* periodika számára, mely 2012-ben jelent meg és mindjárt a folyóirat második legtöbbet letöltött cikkévé vált. Ebben az összefoglalóban definiáltuk a kvantumkémia negyedik korszakát.

Az elmúlt évek során komoly előrelépést értünk el az elméleti módszerfejlesztésekben a magmozgásoknak a kvantumkémia eszköztárával történő számítása területén. Következzen itt fontosabb eredményeim vázlatos felsorolása:

(1) Kifejlesztettünk egy új, minden eddigi próbálkozásnál hatékonyabb magmozgás számító technikát, melyet **GENIUSH**-nak neveztünk el az alábbi rövidítés alapján: GEneral rovibrational code with Numerical, Internal-coordinate, User-Specified Hamiltonians. Több közleményünk számol be az algoritmus fejlesztéséről és a rezgési-forgási mozgások pontos, numerikusan egzakt számításáról (kiemelten *J. Chem. Phys.* **2009**, *130*, 134112 és **2011**, *134*, 074105). Elkészült a programrendszer hatékonyabbá tétele bizonyos szimmetria tulajdonságok figyelembe vételével. Az első számítások döntő része a nagyamplitúdójú mozgást mutató NH<sub>3</sub> molekulára vonatkozik. Mindazonáltal a programrendszer használható tetszőleges molekulára, tetszőleges belső koordinátákkal és tengelyrendszer beágyazottsággal, tetszőleges redukció mellett (így tetszőleges, nagy amplitúdójú mozgást mutató molekulák redukált dimenziós kezelésére is egyszerű lehetőség adódik). A programrendszer a világban a többatomos molekulák magmozgásainak számítására rendelkezésre álló lehetőségek közül a legjobbnak tekinthető és alkalmas teljes rezgési-forgási színeképek számítására.

(2) Jelentősen továbbfejlesztettük a szingularitások effektív kezelését lehetővé tevő algoritmusainkat és programunkat, melyet most már **D2FOPI**-nak nevezünk (*Phys. Chem. Chem. Phys.* **2010**, *12*, 8373 és *J. Math. Chem.* **2012**, *50*, 636), a korábbi OTKA kutatások eredményeként létrejött DOPI algoritmusra és programra utalva. Így manapság már a lényegi szingularitások okozta nehézségek elkerülésével tudunk teljes rezgési-forgási színeképet számítani háromatomos rendszerekre, ami komoly előrelépés.

(3) Az előző OTKA pályázat keretei között hatékony eljárást és C++ nyelvű számítógépes programot fejlesztettünk ki a kísérletileg mérhető átmenetekből ún. aktív mért rezgési-forgási energiaszintek (Measured Active Rotational-Vibrational Energy Levels) előállítására. Az eljárás neve **MARVEL**. Jelen pályázat keretei között sor került az algoritmus szinte teljes átdolgozására, melynek eredményeként több nagyságrenddel gyorsabban futtatható program készült (*J. Quant. Spectr. Rad. Transfer* **2012**, megjelenés alatt) és most már nincs méretbeli korlát a kísérleti adatok számát illetően. Minthogy az atomok száma tekintetében a MARVEL eljárás korlátot továbbra sem tartalmaz, így várható, hogy felhasználása a közeljövőben jelentősen bővülni fog.

(4) Az előző OTKA pályázat keretében kidolgoztuk a **DEWE** (Discrete Variable Representation – Eckart-Watson Hamiltonian – Exact Inclusion of PES) algoritmust és programot. Jelen pályázat keretében befejeződött az algoritmusok (pl. egyes bázis kontrakcióval forgásilag erősen gerjesztett állapotok számítását lehetővé tevő eljárást fejlesztettünk ki) és a kapcsolódó program finomítása, alkalmassá tettük a DEWE-t a forgó mozgás kezelésére (*J. Chem. Phys.* **2009**, *131*, 074106 és **2011**, *135*, 094307). A programrendszer most már lehetővé teszi nagyobb méretű félmerev molekulák rezgési-forgási színeképek szinte automatikus számítását. Ehhez ki kellett próbálnunk jelentős számú iteratív diagonalizáló technikát és kiválasztani az adott feladattípusnak leginkább megfelelőt. Úgy tűnik, hogy a kvantumkémia-ban általánosan alkalmazható iteratív diagonalizáló eljárást nem lehet megadni.

(5) A nagyfelbontású molekulaszpektroszkópiát segítő magmozgás számítások hagyományosan egyik legnagyobb problémája volt, hogy a variációs alapon meghatározott hullámfüggvények kvalitatív jellemzésére alkalmas közelítő címkéket nem tudott szolgáltatni. Ezt a feladatot oldottuk meg az **NMD** (Normal Mode Decomposition) és **RRD** (Rigid Rotor Decomposition) protokollok bevezetésével, melyek közelítő normál módus és merev rotátor címkéket rendelnek hozzá a számított hullámfüggvényekhez.

(6) Részleteiben is definiáltuk az általunk bevezetett spektroszkópai hálózatok (SN, spectroscopic network) fogalmát és a nagyfelbontású molekulaszínképek adatbázis alapú felhasználásának alapjává tettük (*J. Mol. Spectrosc.* **2011**, *266*, 99 és *J. Mol. Struct.* **2012**, *1009*, 123). Várható, hogy ez a gráfelméleti megközelítés széles körben el fog terjedni a kísérleti eredmények feldolgozása és kiértékelése során.

(7) Elkészült az első változata annak a programnak, mely az egy-foton abszorpciós és emissziós molekulaszínképek összes vonalának intenzitását variációs alapon számítja ki (*Phys. Chem. Chem. Phys.* **2009**, *11*, 10385). A program jelenleg csak a DEWE algoritmus esetében működik, de a kibővítést lehetővé tevő fejlesztői és programozói munka jelenleg is folyik.

(8) A variációs alapú magmozgás számítások segítségével előálló hullámfüggvények lehetőséget biztosítanak molekulák hőmérsékletfüggő, rezgésileg-forgásilag átlagolt szerkezetének pontos meghatározására. Ezt az új és érdekes szerkezetkutatási lehetőséget a víz és az ammónia molekulák példáján mutattuk be (*J. Phys. Chem. A* **2009**, *113*, 11665 és **2012**, megjelenés alatt). Ezzel közelebb jutottunk a kvantumkémia általunk definiált negyedik szakának (*Phys. Chem. Chem. Phys.* **2012**, *14*, 1085) célkitűzéseire, azaz kísérleti eredmények direkt, pontos számításához.

(9) Az *ab initio* termokémia területén kidolgoztuk a **NEAT** (Network of computed reaction Enthalpies leading to Atom-based Thermochemistry) eljárást (*Chem. Eur. J.* **2010**, *16*, 4826). Lényege, hogy számított képződési entalpiákat tartalmazó termokémiai hálózat segítségével finomítjuk a képződéshőket a MARVEL eljárás kapcsán már kidolgozott technika segítségével. A finomított adatok kiválóan egyeznek a legjobb kísérleti adatokkal, bizonyítva, hogy csupán pontos számítási eredmények is segíthetnek kísérletileg nehezen tanulmányozható molekulák (pl. rövid élettartamú specieszek, gyökök) képződéshőjének meghatározásában. A legnagyobb hibaforrás a kvantumkémiai számításokban a zérusponthoz tartó rezgések hatásának figyelembe vétele, ezen a ponton kapcsolódik ez a kutatási irány a rezgési-forgási színképek számításához.

(10) Az általunk korábban kidolgozott, ún. adiabatikus Jacobi korrekció (**AJC**) felhasználásával vizsgáltuk a nem-adiabatikus hatásokat a  $H_2^+$  molekulaion (és izotopológjai) rezgési állapotaira (*J. Chem. Phys.* **2009**, *130*, 134314). Megállapítottuk, hogy a nemadiabatikus hatás a szokásos nagyfelbontású spektroszkópiában sokkal inkább tömeghatás, mint az elektronállapotok kölcsönhatásának eredménye. Ez a megalapozó jellegű elméleti eredmény fontos a  $H_3^+$  molekulaion spektroszkópiájának most is intenzíven folyó *ab initio* vizsgálatában.

A pályázat munkatervével teljes összhangban az elmúlt években is folytattam vizsgálataimat prototipikus háromatomos molekulák (különös tekintettel a  $H_3^+$ -ra, mely a legfontosabb speciesz az asztrokémiában), potenciális energia hiperfelületeivel (PES), dipólusmomentum felületeivel (DMS), valamint az ezekből variációs alapon (azaz elméletileg végtelenül pontosan) származtatható rezgési–forgási energiaszintekkel és színképekkel kapcsolatban. Ezirányú kutatási eredményeimet több közlemény tartalmazza. Hosszabb távon is valószínűleg fontos a  $H_3^+$  adiabatikus PES-eit leíró *Phys. Rev. Lett.* közleményünk (**2012**, *108*, 023002), mely egy minden eddiginél pontosabb empirikus tömegfüggő PES előállításáról (is) szól. Tervezzük ennek a PES-nek a további javítását, kiterjesztését az első disszociációs határig és alkalmazását a  $H_3^+$  és izotopológjai teljes spektroszkópiájának megértése céljából. Ez az első olyan PES (és DMS), mely lehetővé teszi a nagyfelbontású spektroszkópiai mérések eredményeinek azonnali értelmezését, hiszen a nemadiabatikus korrekciókat is figyelembe vevő számítások pontossága nagyjából azonos a mérésekével.

A kidolgozott algoritmusok és számítógépes programok segítségével nagyszámú alkalmazás vált lehetővé mind a molekulaszpektroszkópia, mind az *ab initio* termokémia területén. Ezen a területen az alábbi fontosabb eredményeket értem el az OTKA támogatásával:

(1) Kiszámítottuk a víz molekula esetében az összes kötött rezgési állapotot és egy részük kvalitatív jellemzésére közelítő kvantumszámokat is megadtunk egy új PES kidolgozása után (*J. Quant. Spectr. Rad. Transfer* **2010**, *111*, 1043). Ezzel minden eddiginél pontosabb és teljesebb jellemzését adtuk a víz energiaszintjeinek, segítve ezzel az ezek megismerésére irányuló kísérleti munkákat.

(2) Kiszámítottuk a  $\text{H}_3^+$  molekulaion összes kötött rezgési állapotát (*Phys. Chem. Chem. Phys.* **2010**, *12*, 8373). Az új számítási eljárás lehetővé tette például, hogy az első disszociációs határ közelében új rezgési állapotot találjunk, mely fontos lehet az eddig nem értelmezhető kísérleti eredmények megértésében.

(3) Az összes kötött (rezgési) állapot ismerete lehetőséget biztosít a nem-kötő, rezonancia állapotok számítására. Itt jelentős eredmény a víz molekula egyes rezonancia állapotainak általunk elvégzett számítása (*Chem. Phys. Lett.* **2011**, *507*, 48), mely jelentős segítséget nyújtott a vonatkozó sok-fotonos kísérletek eredményeinek értelmezésében. Az egzotikus rezonancia állapotok vizsgálata jelenleg is jelentős erővel folyik csoportomban, hiszen nagyszámú mérési eredmény érhető el, melyek értelmezését az elmúlt 30 évben nem sikerült megvalósítani.

(4) A MARVEL eljárás továbbfejlesztése lehetőséget biztosított a víz izotopológiai rezgési-forgási energiaszintjeinek pontos meghatározására. Nemzetközi együttműködés keretében, kísérleti kollégákkal is együttműködve végeztük el ezt a feladatot és adtuk meg az eddigi legteljesebb, validált jellemzését az átmeneteknek és energiaszinteknek a  $\text{H}_2^{17}\text{O}$ ,  $\text{H}_2^{18}\text{O}$ ,  $\text{HD}^{16}\text{O}$ ,  $\text{HD}^{17}\text{O}$  és  $\text{HD}^{18}\text{O}$  molekulákra (*J. Quant. Spectr. Rad. Transfer* **2009**, *110*, 573 és **2010**, *111*, 2160).

(5) Köszönhetően a variációs alapú kvantumkémiai számítási eredmények (DEWE és GENIUSH) és az aktív adatbázis alapú (MARVEL) kísérleti eredmény feldolgozásnak, az új szemléletmódú analízis lehetőséget biztosított számunkra a kétén rezgési-forgási színeképek minden eddiginél pontosabb értelmezésére, új asszignációk meghatározására (*J. Chem. Phys.* **2011**, *135*, 094307). Az alkalmazott eljárás további molekulák színeképeinek feldolgozására is kiválóan alkalmas, tervezzük ennek az iránynak a továbbvitelét.

(6) Elkészültek a protonaffinitási skála két végének rögzítésére szolgáló számításaink, melyek a CO és az  $\text{NH}_3$  molekulákra és protonált származékaikra vonatkoztak, és a *J. Chem. Theory Comput.* folyóiratban kerültek közlésre (**2008**, *4*, 1220). A képződési entalpiákat először sikerült teljeskörű (az elektron- és magmozgásokra is vonatkozó) *ab initio* eljárás segítségével meghatározni, így a cikk metodológiai mérföldkőnek is tekinthető.

(7) Minden eddiginél pontosabban határoztuk meg a formaldehid képződéshőjét és proton affinitását (*Int. J. Quant. Chem.* **2009**, *109*, 2393), az általunk korábban kifejlesztett focal-point analysis (FPA) módszer segítségével.

(8) A pontos magmozgás számítási algoritmusaink segítségével megtaláltuk a NCCO gyök rezgési spektroszkópiai ujjlenyomatait, így elősegítettük a gyök kísérleti infravörös színeképek értelmezését és egyes korábbi irodalmi adatok hibás voltának felismerésében kijavítását (*Phys. Chem. Chem. Phys.* **2009**, *11*, 10385).

(9) A bután konformerei relatív energiáját is sikeresen meghatároztuk az FPA módszer segítségével (*J. Chem. Theory Comput.* **2012**, *8*, 479). A számítási pontosság új szintjének elérésével újabb „effektusok” figyelembe vételére is szükség volt.

Az elmúlt OTKA időszakban is folytatódtak az aminosavak és származékaik szerkezetére és egyes tulajdonságaira vonatkozó pontos elméleti vizsgálataink. Ezt egészítették ki egyes nem biológiai fontosságú, de más szempontból érdekes molekulákra vonatkozó szerkezeti vizsgálataink. Megjegyzem, hogy ilyen irányú kutatási eredményeinket is összefoglalja az a tankönyv, melynek szerkesztésében és írásában is aktívan részt vállaltam (*Equilibrium Molecular Structures*, CRC Press, **2011**). Legfontosabb kutatási eredményeim az elmúlt évekből ezen a területen:

(1) Meghatároztuk a szabad alanin legstabilabb konformerjeinek pontos molekulaszervezetét (*J. Chem. Theory Comput.* **2010**, *6*, 3066). Ezzel tovább nőtt azon aminosavak száma, melyek pontos szerkezetét az elmélet és kísérlet együttes alkalmazásával sikerült megismerni.

(2) Meghatároztuk a szabad treonin (*Mol. Phys.* **2009**, *107*, 761) és cisztein (*J. Chem. Theory Comput.* **2009**, *5*, 1511) aminosavak összes lehetséges konformerének szerkezetét és energetikáját pontos kvantumkémiai számítások segítségével.

(3) Elvégeztük olyan heterociklusos molekulák szerkezetének meghatározását, melyek eddig nagy kihívást jelentettek a spektroszkópusok számára, minthogy nem volt világosan érthető, hogy mi okozza a pontos szerkezetmeghatározás során a problémákat. Ezt a kérdést a szubsztitúciók hatására bekövetkező tengelyforgási effektussal megválaszolva pontos „semi-experimental” (SE) szerkezeteket határoztunk meg több heterociklusos molekulára (*J. Phys. Chem. A* **2011**, *115*, 14078).

(4) Vizsgáltuk a belső forgás hatását molekulák egyensúlyi szerkezetének meghatározására, mégpedig a cisz-metilformát példáján (*J. Mol. Spectrosc.* **2010**, *259*, 70). Megmutattuk, hogy bizonyos óvatos kezelés esetén a belső forgás jelenléte nem okoz megoldhatatlan problémákat és pontos szerkezetet tudunk meghatározni ezekre a molekulákra is.

(5) Jelentős számú, a CO szerkezeti egységet tartalmazó molekulát vizsgáltunk meg illetve határoztuk meg az SE egyensúlyi szerkezetét. Vizsgáltuk továbbá az egyensúlyi CO kötéshossz változásának trendjét és ezen változások értelmezési lehetőségeit (*J. Mol. Struct.* **2012**, megjelenés alatt).

Megjegyzem továbbá, hogy egy korábbi munkámra alapozva és a folyóirat szerkesztői felkérésének eleget téve összefoglalót írtam az anharmonikus erőkterek kvantumkémiai számításáról (*WIREs Comp. Mol. Sci.* **2012**, *2*, 273).

Wesley D. Allen professzorral összesen 6 közös publikáció született, egyenletesen eloszlva 2008-2010 között. Közös munkánkat lényegesen segítette az OTKA (IN77954) támogatása. Tervezem az együttműködés folytatását a jövőben is.

Összességében megállapítható, hogy az OTKA pályázat 3.5 éve alatt a kvantumkémia, a molekulaszpektroszkópia, az *ab initio* termokémia, valamint a kis és közepes méretű molekulák szerkezetkutatása területén jelentős számú publikációban közöltük új, többnyire jelentős érdeklődést kiváltó, alapkutatási jellegű eredményeinket. Szinte minden, az előzetes munkatervben kitűzött célunkat teljesítettük, illetve túlteljesítettük. Itt most csak azon pár pontot sorolom fel a Munkatervre visszautalva, ahol nem teljesültek az előzetes tervek: (a) nem készült el a C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> molekula pontos PES-e illetve DMS-e, (b) letettünk az RRGGM algoritmus alkalmazásáról magmozgás számításokra, (c) nem fejeződött be a HNC<sub>2</sub>O molekula nagyfelbontású színeképének vizsgálata, (d) nem fejeződött be az általános rezgési-forgási intenzitás számítási protokoll beprogramozása, (e) nem fejeződött be az intenzitás információ alkalmazásának lehetővé tétele a MARVEL eljárás keretein belül, (f) nem készült el a metán MARVEL analízise, valamint (g) más irányú eredményes fejlesztések miatt letettünk az RPH és a DEWE összekapcsolásáról. Meggyőződésem, hogy a kutatások hozzájárultak nemcsak a magyar elméleti kémiai iskola nemzetközi hírnevének öregbítéséhez, hanem a területet választó és abban remélhetően továbbra is sikeresen tevékenykedő hallgatók képzéséhez is.

Végezetül álljon itt az elért eredményeket taglaló közleményeim visszhangjának rövid összefoglalása:

(1) Két cikkem (E. Mátyus, J. Šimuněk, and A. G. Császár, On Variational Computation of a Large Number of Vibrational Energy Levels and Wave Functions for Medium-Sized Molecules, *J. Chem. Phys.* **2009**, *131*, 074106 és M. Grechko, O. V. Boyarkin, P. Maksyutenko, T. R. Rizzo, N. F. Zobov, S. V. Shirin, L. Lodi, J. Tennyson, A. G. Császár, and O. L. Polyansky, State-Selective Spectroscopy of Water up to Its First Dissociation Limit, *J. Chem. Phys.* **2009**, *131*, 221105) 2009. augusztusában illetve decemberében bekerült a *J. Chem. Phys.* folyóirat 20 legtöbbet letöltött cikke közé.

(2) Egy további *J. Chem. Phys.* cikk (E. Mátyus, G. Czakó, and A. G. Császár, Toward Black-Box-Type Full- and Reduced-Dimensional Variational (Ro)Vibrational Computations, *J. Chem. Phys.* **2009**, *130*, 134112) került kiválasztásra a *Virtual Journal of Biological Physics Research* által mint “frontier research” közlemény.

(3) Különösen nagy érdeklődésre tartott számot *Nature* (**2008**, *453*, 906) közleményünk, melyre a megjelenése óta eltelt időszak alatt közel 60 hivatkozás érkezett és láthatóan új frontvonalat nyitott a reaktív karbének vizsgálata területén. Közleményünk eredményeire külön cikkben hívta fel a figyelmet a *Nature*, a *Chemistry World*, a *Chem. Eng. News*, a *Chem. Unserer Zeit*, az *Angew. Chem.*, valamint a *Frankfurter Allgemeine Zeitung*.

(4) A spektroszkópiai hálózatokról szóló cikkünk (A. G. Császár and T. Furtenbacher, Spectroscopic Networks, *J. Mol. Spectrosc.* **2011**, *266*, 99-103) 2011. áprilisa és júniusa között bekerült a folyóirat „Top 25 hottest articles” kategóriájába. Ugyanezen cikk kapcsán jelent meg méltatás a munkánkról a *Műszaki Magazin* 2011. novemberi számában.

(5) A *Phys. Chem. Chem. Phys.* folyóirat számára készített „*Perspectives*” összefoglalónk a főszerkesztő felkérésére egy külön e célból készített ábrával az újság címlapjára került. 2011. decemberében ez a közleményünk a második legtöbbet letöltött cikke volt a PCCP-nek, további adat a letöltöttségről nem áll rendelkezésre.

(6) Az „*Equilibrium Molecular Structures*” c. (tan)könyvünket a következőképpen méltatta Dr. James G. Speight a *Petroleum Science and Technology* 2011. júniusi számában: “The book contains many references, examples, and exercises and includes a CD with additional examples which make the book ideal for class instruction as well as for reader self-instruction. The book will be useful for newcomers to the field and also for experienced spectroscopists who want to expand their area of knowledge.”