

"A világ egyik legrangosabb tudományos kiadványa, a Science a TTK Kémiai Intézete munkatársainak cikkét közölte március 18-i számában.

A hidratált elektron tulajdonságainak fontos következményei vannak a kémia, fizika és biológia széles területein. A hidratált elektron szerkezetének hagyományos modelljét kritizálták Larsen és munkatársai a Science 2010. július 2-i számában. Cikkükben egy újonnan levezetett pseudopotenciált használtak molekuladinamikai szimulációikban.

A Science 2011. március 18-i számában Túri László és Madarász Ádám kvantummechanikai modellszámítások segítségével megmutatták, hogy a Larsen és munkatársai által használt potenciál hibákat tartalmaz, és így az ezen alapuló szimulációs eredményeket komoly fenntartásokkal kell kezelni. A potenciál kis korrekciójával visszakapható a hagyományos üregszerkezet, mely szerint a hidratált elektron megfelelően orientált vízmolekulák által körülvett üregben lokalizálódik."

[SCIENCE](#)