

Kapuy Ede (1928–1999)

PONGOR Gábor*

ELTE TTK Kémiai Intézet, Általános és Szervetlen Kémiai Tanszék



Kapuy Ede 1928. szeptember 21.-én született Győrött. Családi indíttatása a papi hivatás választására készíthette volna. Erre többek között nagybátyja ösztönözhetette, aki a helyi Czuczor Gergely Bencés Gimnázium pap-tanára volt. Így nem meglepő, hogy Kapuy Ede a Czuczor gimnáziumot végezte el.

A középiskola befejezése után – szülei javaslata ellenére – más pályát választott: beiratkozott a Pázmány Péter Tudományegyetem vegyész szakára. 1952-ben diplomázott az Eötvös Loránd Tudományegyetem (az egyetem neve időközben megváltozott) vegyész szakán.

Kapuy Ede első tudományos fokozatát (a kandidátusi címet) a fizika területén szerezte, Gombás Pál professzor intézetében, a Budapesti Műszaki Egyetemen. 1958-ban csatlakozott a Gombás Pál által vezetett Elméleti Fizikai Kutatócsoporthoz (utóbbit később az MTA Kvantumelméleti Kutatócsoportjának nevezték át). Kapuy Ede 1971-ben szerezte meg a fizikai tudományok doktora címet. Ezt követően előbb tudományos főmunkatárssá, majd 1977-től kezdődően a fizika professzorává nevezték ki. 1983-tól a szegedi József Attila Tudományegyetem tanszékvezető egyetemi tanára volt az Elméleti Fizika Tanszéken.

Kapuy Ede az MTA Fizikai Tudományok Osztálya Atom- és Molekulafizikai Bizottságának tagja, valamint a Magyar Kémikusok Társasága Kvantumkémiai Szakcsoportjának

elnöke volt. Ugyancsak tagja volt a World Association of Theoretically Oriented Chemists (WATOC) nemzetközi tudományos szervezetnek. 1981 és 1985 között a Journal of Molecular Structure (Theochem) nemzetközi szakfolyóirat szerkesztőbizottsági tagja.

Kapuy Ede fő hozzájárulása a kvantumkémia fejlődéséhez a szeparált elektron-pár elmélet kifejlesztése volt, amelyen a késői 50-es és korai 60-as években dolgozott. Érdeklődése ezután a lokalizált bázisú perturbáció-számítás eljárásai felé fordult. Ez utóbbi területen elért sikerét mutatja az a tény, hogy a szakirodalom az ún. Kapuy-féle partíció alapuló, lokalizált molekulapályák bázisán végzett nagy pontosságú perturbációs eljárást KMP2 számításnak nevezi, ahol a „K” betű a Kapuy névre utal. 66 közlemény szerzője angol nyelvű nemzetközi, és 13 közleményé magyar nyelvű folyóiratokban. Négy szakkönyvnek szerzője vagy társszerzője, köztük a magyar nyelven talán legkiválóbb munkájának („Az atomok és molekulák kvantumelmélete”, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1975, Török Ferenc társszerzőségével), mely az Akadémiai Kiadó nivódíjában is részesült, s amely a nemzetközi szakirodalom területén is méltó elismerést szerezhetett volna, ha angol nyelvű fordítása elkészül. Vendégprofesszora volt Anglia, Németország és Kanada vezető egyetemeinek. A kvantumkémia területén rendezett nemzetközi konferenciák szervezőbizottságában gyakran vett részt.

Kapuy Ede tudományos érdeklődése nem szorítkozott saját, szűkebb értelemben vett szakterületére, a kvantumfizikára, illetve a kvantumkémiaira. Tudása a fizika egész területén meglepően széles volt. Olvasottságát csak rendkívüli emlékezőképessége múlta felül: ha kijelentette, hogy nem olvasott semmit egy speciális problémáról, szükségtelen volt a szakirodalom áttekintése. Másrészt, ha olvasott valamit az adott területről, képes volt megjelölni a folyóirat nevét és a publikáció évét is (vagy a könyv címét és lelőhelyét a könyvtárban).

Kapuy Ede kedvenc időtöltése a történelem és a földrajz volt. Ezeken a tudományterületeken is olyan figyelemreméltó tudást szerzett, hogy – szakmabeliek által is – elismert szakértőnek tartották.

Végezetül álljon itt egy idézet Kapuy Edétől: „A múltban a kvantumkémikusok azt tekintették fő feladatuknak, hogy olyan közelítő módszereket dolgozzanak ki, amelyekkel pontosan mérhető fizikai mennyiségek jól reprodukálhatók. Az új módszerek ellenőrzésére természetesen mindig szükség lesz, de a fő feladat egyre inkább az, hogy olyan (elvileg mérhető) fizikai mennyiségeket számítsunk ki, amelyek gyakorlatilag nem hozzáférhetőek (pl. rövid

* Dr. Pongor Gábor egyetemi docens, 1117 Budapest, Pázmány sétány 1A, pongor@chem.elte.hu

élettartamú képződmények tulajdonságai). Egyre inkább a gazdaságosság dönti el, hogy egy adott fizikai mennyiséget számítással, vagy méréssel határoznak-e meg.” (Kapuy Ede: „Molekulák elektronszerkezetének kvantum mechanikai vizsgálata”, Magyar Kémikusok Egyesülete – Fizikai-Kémiai Szakosztálya, Budapest, 1969, VI. old.). Az eltelt, mintegy négy évtized nagymértékben igazolta Kapuy Ede jóslatát.

Kapuy Ede jelentősebb publikációi:

1. Kapuy, E.; Török, F. *Az atomok és molekulák kvantumelmélete*, Akadémiai Kiadó: Budapest, **1975**.
2. Kapuy, E. "Diamagnetic susceptibility of perturbed systems", *Acta Phys. Hung.* **1959**, 9, 475.
3. Kapuy, E. "Configurational interaction for wave functions built up from orthogonal two-electron orbitals", *Acta Phys. Hung.* **1961**, 12, 351.
4. Kapuy, E. "Configurational interaction for wave functions built up from orthogonal many-electron group orbitals", *Acta Phys. Hung.* **1961**, 13, 345.
5. Kapuy, E. "On a localised group model for N-electron systems", *Physics Letters* **1962**, 1, 205.
6. Kapuy, E. "On the Connection between the Alternant Molecular Orbital Method and the Separated-Pair Theory", *Theoret. Chim. Acta (Berl.)* **1965**, 3, 379-383.
7. Kapuy, E. "Applicability of Almost Strongly Orthogonal Geminals in Many-Electron Wavefunctions", *J. Chem. Phys.* **1966**, 44, 956-962.
8. Kapuy, E. "Extension of the Separated Pair Theory", *Theoret. Chim. Acta (Berl.)* **1966**, 6, 281-291.
9. Kapuy, E.; March, N.H. "Two-body orbitals for one-dimensional Fermion gas with application to repulsive-function interactions", *J. Math. Phys.* **1967**, 8, 1915.
10. Kapuy, E. "Application of the Extended Separate Pair Theory to the π -Electron of Trans-Butadiene without ZDO Approximation", *Theoret. Chim. Acta (Berl.)* **1968**, 12, 397-404.
11. Kapuy, E. "Calculation of the π -Electron Correlation Energy of Butadiene Using the Extended Separated Pair Theory", *Chem. Phys. Letters* **1969**, 3, 43-44.
12. Kapuy, E.; Kozmutza, C.; Stephens, M.E. "Moment Characterization of Localized Orbitals", *Theoret. Chim. Acta (Berl.)* **1976**, 43, 175-184.
13. Daudel, R.; Stephens, M.E.; Kapuy, E.; Kozmutza, C. "Limits on the Localized Interpretation of Molecular Orbital Wavefunctions", *Chem. Phys. Letters* **1976**, 40, 194-198.
14. Kapuy, E.; Szondy, T. "Determination of Molecular Properties by the Method of Moments", *Theoret. Chim. Acta (Berl.)* **1976**, 42, 261-271.
15. Daudel, R.; Kapuy, E.; Kozmutza, C.; Goddard, J.D.; Csizmadia, I.G. "Theory of Lone Pairs. A Relationship between Orbital Energy Contributions and the Second Moments of Localized Orbitals in Ten-Electron Hydrides", *Chem. Phys. Letters* **1976**, 44, 197.
16. Kapuy, E. "A Rigorous Justification of the Electron Pair Concept in Organic Chemistry" (in: "Progress in Theoretical Organic Chemistry", Ed. by I.G. Csizmadia), Vol. 2, Elsevier: Amsterdam, **1977**, pp. 546-555.
17. Strausz, O.P.; Kozmutza, C.; Kapuy, E.; Robb, M.A.; Theodoroukopoulos, G.; Csizmadia, I. "Vertical Proton Affinities of CH_2O and CH_2OH^+ in Their Ground Singlet, Excited Triplet and Ionized Doublet States", *Theoret. Chim. Acta (Berl.)* **1978**, 48, 215-221.
18. Kapuy, E.; Kozmutza, C.; Ozoróczy, Zs.; Pipek, J. "Dependence on the Geometry and on the Basis Set of Localized Orbital Energy and Moment contributions. I. Energy quantities.", *Acta Phys. Acad. Sci. Hung.* **1979**, 46, 333-340.
19. Kapuy, E.; Kozmutza, C.; Ozoróczy, Zs.; Pipek, J. "Dependence on the Geometry and on the Basis Set of Localized Orbital Energy and Moment contributions. II. Interaction energies.", *Acta Phys. Acad. Sci. Hung.* **1979**, 47, 303-312.
20. Daudel, R.; Kapuy, E.; Kozmutza, C.; Stephens, M.E. "Transferability of Some Properties of Molecular Orbitals 1. Energy Quantities", *Theoret. Chim. Acta (Berl.)* **1979**, 53, 147-157.
21. Kapuy, E.; Csépes, Z.; Kozmutza, C. "Application of the Many-Body perturbation Theory by Using Localized Orbitals", *Int. J. Quantum Chem.* **1983**, 23, 981-990.
22. Kapuy, E.; Bartha, F.; Bogár, F.; Csépes, Z.; Kozmutza, C. *Int. J. Quant. Chem.* **1990**, 38, 139.
23. Kapuy, E.; Bogár, F.; Kozmutza, C. *J. Mol. Struct.* **1993**, 297, 365.
24. Kapuy, E.; Bogár, F.; Tfirst, E. *Int. J. Quant. Chem.* **1994**, 52, 127.