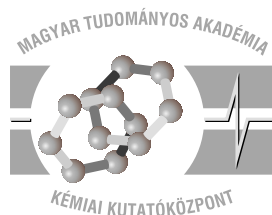


## **INTÉZETI KRÓNIKA**

MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
KÉMIAI KUTATÓKÖZPONT  
KÉMIAI INTÉZET

*29. évfolyam  
2003. október*



Felelős kiadó:  
Magyar Tudományos Akadémia  
Kémiai Kutatóközpont  
Pálinkás Gábor, főigazgató

Szerkesztette:  
Solti Magda  
Pályázati & Kommunikációs Iroda vezetője  
e-mail: [msolti@chemres.hu](mailto:msolti@chemres.hu)

design: **dART studio**

## TARTALOMJEGYZÉK

HÍREK .....	5
ÚJ NAGYMŰSZEREK A KÉMIAI KUTATÓKÖZPONTBAN .....	7
ELŐADÁSOK ÉS RENDEZVÉNYEK .....	15
TUDOMÁNYOS ÉRTEKEZÉSEK VITÁI .....	20
KÜLFÖLDI ELŐADÓK .....	20
ÉRTEKEZLETEK .....	24
PUBLIKÁCIÓS ADATOK .....	25
GAZDASÁGI ADATOK .....	28
MELLÉKLET .....	29
SAJTÓSZEMLE .....	41



## HÍREK

### Általános hírek

- Vékey Károlyt a Mass Spectrometry Reviews szerkesztőbizottsági tagjául kérték fel.
- Héberger Károlyt a Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems folyóirat meghívott szerkesztőjének kérték fel.
- A Texas A&M és F. Albert Cotton professzor **Cotton-díjjal** tüntette ki Somorjai Gábor professzort a kémiai kutatások terén elért kiváló eredményeiért. Somorjai professzor a Kutatóközpont Nemzetközi Tudományos Tanácsadó Testületének elnöke.
- **2003. május 25-én** az MTV Delta című műsorában elhangzott hír: „A mai csípőprotézisek nem jelentenek végleges megoldást a csípőízületi problémákkal küszködőknek. Ezeket a protéziseket ugyanis 5–10 évente ki kell cserélni. Az MTA Kémiai Kutatóközpontjában olyan kísérleteket folytatnak, melyek a polipropilén felületek kopásállóságának fokozására irányulnak. Plazmatechnika alkalmazásával nagy erejű töltésekkel erősítik meg a műanyagot, így az új protézis felülete szinte nem is kopik, míg többi része rugalmas marad. Bertóti Imre az új protézis feltalálója szerint ez az anyag sokkal hosszabb élettartamú, így akár 20–30 évig is a szervezetben maradhatnak az implantátumok.”
- **2003. június 18-án** a Francia Intézetben *Dominique de Combes de Nayves*, Franciaország budapesti nagykövete és *Kálmán Alajos* professzor meghívására az 1987-ben kémiai Nobel-díjat kapott *Jean-Marie Lehn* professzor tartott előadást. Az előadás címe: Az anyagtól az életig: a kémia?!
- **2003. június 21-én** a Debreceni Egyetem díszdoktorává fogadta Oláh György Nobel-díjas kémikust.
- A Warwick Effect Polymer Ltd. **2003 augusztusában a hét cikkének** választotta az alábbi közleményt: Schulze U, Fónagy T, Komber H, Pompe G, Pionteck J, Iván B: Synthesis of poly(propene-g-styrene) graft copolymers by metallocene catalyzed copolymerisation of propene with allyl-terminated polystyrene macromonomer obtained via quasiliving atom transfer radical polymerisation and the effect of the grafts on blending polypropene with polystyrene  
MACROMOLECULES 36 (13): 4719-4726, 2003
- **2003. június 13–14.** Lendvai György szervezésében az Intézetben zajlott a COST D23 program találkozója.

### Szervezeti változások

- **2003. január 1-jével** a Kémiai Kutatóközpontban szervezeti változások történtek.

### Kitüntetések, díjak

- *Kálmán Alajost* a Cseh és Szlovák Kémikusok Egyesületének 54. konferenciáján **Hanus-éremmel** tüntették ki.
- **Akadémiai Ifjúsági Díjat** nyert *Fábián László* „Szupramolekuláris jelenségek vizsgálata kristályokban” című publikációjával.
- *Kalló Dénesnek* a Magyar Mérnöki Kamara Vegyész-mérnöki Tagozata **Péceli Béla emlékérmét** adományozott.
- *Tompos András* **Bolyai János Kutatási Ösztöndíjat** nyert.
- *Héberger Károlynak* az egyesületben végzett munkájáért a Magyar Kémikusok Egyesülete Intéző Bizottsága **Kiváló Egyesületi Munkáért Oklevelet** adott.

### OTKA-támogatást nyertek

- *Margitfalvi József*: Fémion-fémnanoklaszter aktívhely együttesek, képződésük, szerkezetük és katalitikus sajátságuk felderítése
- *Lukovits István*: Nanocsövek előállítása, szerkezete és tulajdonságai
- *Simon Ágnes*: A központi idegrendszer validált célfehérjéi: a funkcionálisan aktív konformációk modellezése
- *Kalló Dénes*: Többfunkciós nemesfém/zeolit-katalizátorok szerepe motorhajtó anyagok minőségjavításában
- *Pajkossy Tamás*: Elektrokémiai adszorpcióval kapcsolatos vizsgálatok

- *Bertóti Imre*: Szénelapú nano-kompozitok előállítás
- *Vékey Károly*: Új tömegspektrometriás módszerek kifejlesztése és alkalmazása a peptid- és fehérjekutatásban
- *Mayer István*: Energiakomponensek számítása molekulákban és reagáló rendszerekben
- *Bérces Tibor*: Égésekben szerepet játszó OH-gyök- és H-atom-reakciók kinetikája
- *Czugler Mátyás*: Szilárd fázisú szupramolekuláris reakciók
- *Emri Zsuzsanna*: Szinaptikus moduláció és a  $\gamma$ -hidroxivajsav hatása a nucleus accumbensben és a ventriális tegmentális area sejtjeiben
- *Valyon József*: Adszorpció és katalitikus vizsgálatok DRIFT spektroszkópiai módszerrel
- *Borkó László*: Metánaktiválás új módszere: nemesfémvel promoteált Ga-HZSM-5 katalizátor alkalmazása  $N_2O$  jelenlétében

## ÚJ NAGYMŰSZEREK A KÉMIAI KUTATÓKÖZPONTBAN

### Heterociklusos kémiai csoport

#### *Unicam UV 500 nagyfelbontású kétfényutas UV-látható spektrofotométer*

A készülék rutin UV-spektrumok felvételére alkalmas (190–1100 nm, 2 Å sáv szélesség, 1 Å mintavételezés) mind szilárd minták, mind folyadékok esetében. A készülékhez csatlakoztatott számítógép segítségével az adatok egyszerűen kiértékelhetők és tárolhatók.

A spektrofotométer a Szerves és műszeres analitikai csoport (1.23) műszeres laboratóriumában (IV. épület 324. szoba) van elhelyezve. A műszer a nap bármely időszakában, mágneskártya-belépővel, önkiszolgáló módon vehető igénybe.

### Szerves katalízis csoport

#### *QMS 200 kvadrupol tömegspektrométer*

A tömegspektrométert gázminták összetételének minőségi és mennyiségi elemzésére használjuk. A tömegspektrumokban általában a komponensek moltömegeihez, illetve fragmenseihez tartozó csúcsok jelennek meg. A készülék alkalmas 0–200 mol-számtartományt végigpásztázni (200 ms/u – 60 s/u). Ebben az alkalmazásban a fragmensek detektálása egymást követően történik. A hagyományos tömegspektrumon kívül, fel lehet venni előre megadott tömegszámokhoz tartozó intenzitásértékeket is. Ekkor a különböző fragmenseket egyszerre vizsgáljuk (10 ms – 60 s). Ez az alkalmazás akkor kerülhet előtérbe, ha a gázelegy minőségi összetétele már ismert és csak a pontos mennyiségi összetételre vagyunk kíváncsiak, ami a detektált intenzitás adatok segítségével számolható ki. A berendezés 64 csatornás, de a gyakorlatban legfeljebb 4–10 ismert alkotóelem mennyiségének párhuzamos detektálása a célunk. Osztályunkon a tömegspektrométert a kombinatorikus heterogén katalízisben alkalmazzuk.

A készülék egy nagy áteresztőképességű katalizátortesztelő rendszerbe lett beépítve. A reaktor 16 katalizátor párhuzamos vizsgálatára szolgál. Rendszerint azonban egy csatornába csak inert anyagot (kvarcúzelék) teszünk. Ez biztosítja a referenciautatót, így lehetőség nyílik a gázelegy reakció előtti és utáni összetételének kvázi egyidejű mérésére. A reaktor 16 csatornájából távozó 16 gázelegyből egy 16 állású szelep választja ki ez elemzésre kerülő csatornát. A kiválasztott gázelegy folyamatos áramban speciális mintavevő szelep előtt halad el. A mintavevő szelep a gázelegynek csak csekély mennyiségét ereszt be a nagy vákuumtérbe, ami nem zavarja meg a folyamatos gázáramot és nincs hatással a vákuumtér nyomására sem. A gázminta komponenseit a volfrámkatód ionizálja és elemzésre a fragmensek kerülnek be a tömegspektrométerbe.



#### *Syncore Reactor (Büchi) és katalizátorpreparáló robot*

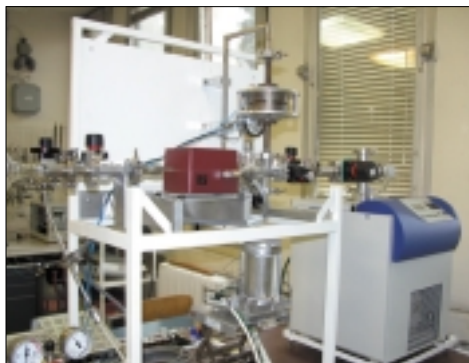
A syncore reaktor része az alap, egy 24 mintás állvány a hozzá tartozó 24 reakcióedénnyel, egy refluxáltató feltét, egy inertgáz-feltét, valamint egy kondenzáltató hűtő a hozzá tartozó szedőlombikkal. Ez a berendezés 24 különböző kémiai szintézis egyidejű megvalósítására alkalmas akár folyadék, akár szilárd fázisban. A szintézisek alatt lehetőség van refluxáltatásra inertgáz-atmoszférában. A reakcióedények legfeljebb 30 ml folyadékkal tölthetők meg, az állvány 150 °C-ig fűthető. A keverést horizontális forgatás biztosítja, amelynek maximális fordulatszáma 600 rpm. A forgatás excentrikussága állítható, az állvány a terhelésnek megfelelően kiegyensúlyozható.



A robot a 24 mintás állványba helyezett reakcióedényekbe osztja szét a katalizátorok preparálásához szükséges folyadékot. A tér három dimenziójában elmozdítható karok tartják és mozgatják a fecskendőket, amely a kiindulásianyag-tartályokból szívja fel a szükséges mennyiségű folyadékot és juttatja el a kívánt reakcióedénybe. A fecskendő dugattyújának mozgását a negyedik tengely végzi.

### Mikropórusos és mezopórusos anyagok csoport

#### Frekvenciaválasz készülék



A modern vegyipar hatékonyságának növelése, a „zöld kémia” érvényesülése szempontjából nagy jelentőségű a gáz–szilárd felületi kölcsönhatások vizsgálati módszereinek fejlesztése. Jelentős ugrás következett be ezen a téren a különböző spektroszkópiai módszerek fejlődésével. A spektroszkópiai vizsgálatok azonban zömmel statikus jellegűek és túlnyomórészt anyagszerkezeti információkat szolgáltatnak. A különféle heterogén katalitikus, illetve az azokat követő vagy megelőző adszorpciós technológiák kulcskérdése azonban a részfolyamatok dinamikájának ismerete. Igen fontos tehát az anyag- és hőtranszportot meghatározó tényezők minél több részletre kiterjedő, minél pontosabb megismerése.

Egy egyensúlyi vagy állandósult állapotú rendszer valamely jellemzőjének megváltoztatása hatására a rendszer állapotának jellemzői egy új egyensúly felé mozdulnak el. A folyamatot leíró függvény, amit nevezhetünk válaszfüggvénynek is, tartalmazza mindazon információkat, melyek alkalmasak a rendszerben végbe menő fizikai és kémiai folyamatok kinetikájának leírására.

Az ezen az elven alapuló, ún. tranzien vizsgálati módszerekkel – a számottevő kísérleti nehézségek ellenére – nagy hatékonyság érhető el, ha a gáz–szilárd rendszer valamely jellemzőjét harmonikus függvény szerint moduláljuk és egymás után több modulációs frekvenciát alkalmazunk. Ez ugyanis lehetővé teszi a különböző időállandókkal jellemezhető párhuzamos folyamatok megkülönböztetését. Ebben rejlik a frekvenciaválasz módszer, az ún. „sebesség-spektroszkópia” hasonlósága a valódi spektroszkópiákhoz, illetve előnye más tranzien módszerekkel szemben. A modulációs frekvencia változtatásával letapogatunk egy frekvenciatartományt, és ha létezik egy adott frekvenciának megfelelő időállandójú folyamat a vizsgált rendszerben, a válaszfüggvény amplitúdója és fáziskésése kirívóan nagy lesz ennél a frekvenciaértéknél, azaz mondhatjuk, hogy a moduláció és a részfolyamat között rezonancia lép fel. A rezonancia frekvenciájából, azaz időállandójából alkalmas elméleti modell alapján meg lehet határozni a szorpciós folyamat sebességi állandóját.

A frekvenciaválasz módszer előnyeit már nagyon régen felismerték, azonban alkalmazása gáz–szilárd rendszerek vizsgálatára csak az elmúlt század hatvanas éveiben kezdődött az USA-ban, és azóta is igen döcögösen halad. Ennek oka egyrészt az épített berendezések tökéletlensége volt, másrészt az elméleti háttér hiánya. Az utóbbi évtizedben L. V. C. Rees munkásságának köszönhetően döntő mértékű technikai fejlődés következett be. 1994-ben ebbe a fejlődési folyamatba kapcsolódtak be intézetünk munkatársai. Az intézetünkben kiinduló témák integrálásával a kutatási módszer alkalmazása nagymértékben bővült. Hozzájárulásunk a szakterület fejlődéséhez a következőkben összegezhető: (i) Rámutattunk, hogy a frekvenciaválasz módszer gyors és igen hatékony az adszorbens, illetve katalizátorszemcsékben lejátszódó makro-, ill. mezopórusos diffúzió meghatározására. (ii) Eredményesen foglalkoztunk mikropórusos rendszerek diffúziós problémáinak felvetésével és megválaszolásával. (iii) A frekvenciaválasz módszert zeolit katalizátorok aktív centrumainak, savas és redox tulajdonságainak jellemzésére alkalmaztuk.

Az elmúlt évek tapasztalatai hozzájárultak az ilyen típusú vizsgálati igények rohamos növekedéséhez. A intézetünkbe telepített frekvenciaválasz készülékkel folytatni szeretnénk a zeolitok és különféle gázok közötti kölcsönhatások tanulmányozását. Kutatási területünket szélesíteni kívánjuk nanoméretű szénecsövek vizsgálatával. Aktív szenekre vonatkozó korábbi eredményeink alapján úgy látjuk, hogy jó esélyünk van arra is,



hogy a fokozott érdeklődéssel övezett szén nanocsövekben lejátszódó transzportfolyamatok dinamikájának tanulmányozása terén úttörő szerepet játszhatunk ezzel a berendezéssel, nem kizárva azonban ezen új technika bevetését más ígéretes területeken sem.

## Felületspektroszkópai csoport

### *Moduláris felületanalitikai mérőrendszer*

A Kémiai Kutatóközpontban egy jelentős, modern kutatási irány – határfelületi jelenségek nemlineáris optikai módszerekkel történő in situ vizsgálata – meghonosításán dolgozunk. Ennek első fontos lépéseként 2002 januárjában egy összegfrekvencia-keltési (az angol Sum Frequency Generation név szokásos rövidítésével: SFG) spektrométer került felállításra. Ahhoz, hogy az SFG spektroszkópia nyújtotta lehetőségeket a kontrollált gáztérben történő mérések esetében is a legmesszemenőbbben kiaknázhassuk, szükségessé vált egy teljes mintapreparációs és analitikai háttérrel rendelkező UHV/nagynyomású egység felállítása.

Az ábrán látható Omicron Nanotechnology gyártmányú moduláris berendezés három fő kamrából áll. Az analitikai kamrában jelenleg lehetőség van elektronsugaras vékonyréteg-leválasztásra, ionsugaras mintakezelésre, valamint röntgen- és ultraibolya fotoelektron-spektroszkópai mérésekre. A kamra kialakítása lehetővé teszi további felületanalitikai eszközök, illetőleg egy pásztázószondás mikroszkóp későbbi csatlakoztatását is. A két nagyméretű  $\text{CaF}_2$  betekintőablakkal felszerelt SFG mérőkamrában széles nyomástartományban (ultranagy vákuumtól a légkörit meghaladó nyomásokig) lehet méréseket végezni. A kamrához katalitikus méréseket lehetővé tevő kiegészítéseket (gázbeeresztő manifold, gázkromatográf és tömegspektrométer) lehet csatlakoztatni, amelyek beszerzése a közeljövőben várható. A berendezés felszereléséhez tartozik még egy kiegészítő, mintapreparációs eszközök fogadására alkalmas előkezelő kamra és egy gyors mintacserét biztosító load-lock rendszer. A minta mozgatására két precíziós manipulátor szolgál.



#### *Főbb műszaki paraméterek:*

- szivattyúrendszer: iongetter-szivattyú, titánszublimációs szivattyú és turbomolekuláris szivattyú kombinációja. Az elérhető vákuum: jobb, mint  $5 \times 10^{-10}$  mbar;
- mintahőmérséklet:  $-130$  °C-tól  $+600$  °C-ig;
- energiaanalizátor: 125 mm-es félgömb analizátor, 5 channeltron detektorral. Elért felbontás: jobb, mint 110 meV (UPS, Ag Fermi-él);
- röntgenforrás: Mg- és Al-katóddal, teljesítmény: 300 W;
- ionágyú: 0,1–5 keV ionenergia, 10 mm  $\times$  10 mm pásztázható terület.

Az UHV/nagynyomású berendezés beszerzésével lehetővé válik a következő, kontrollált gáztérrel igénylő kémiai, illetve anyagtudományi jellegű kutatási témák művelése:

- fejlett katalizátorrendszerek tudományos tervezéséhez szükséges ismeretek megszerzése: modell katalizátorok, egykristály felületek, nanorendszerek tanulmányozása felületspektroszkópai eszközökkel, beleértve az SFG spektroszkópiát is. Katalitikus alapreakciók felderítése. Adsorbátumok kölcsönhatásainak, felületi konformációjának tanulmányozása;
- nanométer méretű egy- és kétfémes fémrészecskék felületi elektronállapotainak tanulmányozása;
- koherens gerjesztésű felületi spektroszkópai módszerek alkalmazása vékonyrétegek és adszorbeált specieszek rezgési és konformációs állapotainak kinetikai vizsgálatára;
- opto-elektronikai rendszerek vizsgálata időfüggő impulzus módszerekkel.

### *Tektronix TDS 3502B Digitális oszcilloszkóp*



A Felületspektroszkópiai Laboratóriumban működő, a litván EKSPLA cég által gyártott SFG spektrométerben használt különböző hullámszámú lézerek sugárakat egy Nd:YAG lézer 1064 nm-es sugárzásának nemlineáris kristályokban történő módosítása révén állítjuk elő. A Nd:YAG lézer optimális működése alapfeltétele az SFG mérések elvégzésének. A Nd:YAG lézerrel szemben támasztott két legfontosabb követelmény a megfelelően nagy impulzusenergia és ennek időbeni stabilitása. Hogy ezeknek a követelményeknek megfelelhessen, a lézer megfelelő időközönkénti rendszeres karbantartására van szükség.

A karbantartási munkálatok során (pl. az alkalmazott telíthető elnyelő festék havonta esedékes cseréje esetén) vagy esetleges hibák elhárításakor szükséges a lézerben keletkező impulzusvonalat nyomon követése, amihez egy nagy sávszélességű, nagy mintavételezési sebességű digitális oszcilloszkópra van szükség. Jelenleg laboratóriumunkban a TDS 3502B oszcilloszkópot főként az említett feladatok ellátására használjuk. A készülék természetesen alkalmas bármilyen időben változó elektromos jel megjelenítésére, rögzítésére és analizálására, így használható a laboratóriumban felállított UHV/nagynyomású felületanalitikai berendezés karbantartási és hibaelhárítási munkálatai során is.

#### *Főbb paraméterek:*

- sávszélesség: 500 MHz;
- mintavételezési sebesség: 5,0 GS/s;
- csatornák száma: 2;
- színes foszforképernyő;
- 3,5" lemezmeghajtó.

### **ESR laboratórium**

#### *ELEXSYS E500 Elektron Spin Rezonancia Spektrométer (Brucker Analytik GmbH)*

#### *Főbb műszaki paraméterek:*

- rezonanciafrekvencia: X-sáv, 9,2–9,8 GHz;
- érzékenység: 10° spin/G;
- a nagy jóságú tényezőjű rektanguláris rezonanciaüreg a lapos mérőcellával alkalmas vizes közegű minták érzékeny vizsgálatára is;
- modulációs frekvencia 100 Hz és 100 kHz között változtatható;
- mágneses tér-sweep: 0–14 000 G (1,4 T), 8 mG hosszú idejű stabilitás;
- a digitális rekorder időfelbontása 100 ns;
- LINUX munkaállomás, CPU: Pentium IV, 1700 MHz;
- programozható hőmérséklet-szabályozás 100 és 370 K között 0,1 K hőmérséklet-stabilitással;
- programozható goniométer egykristály vizsgálatokhoz;
- frekvencia- és NMR térmérő g-faktor mérésekhez.



## Infravörös és Raman spektroszkópiai laboratórium

### Többfunkciós reflexiós mintakezelő egység (FT-IR spektrométerhez)

Típus: GS 19650 Monolayer/Grazing Angle Accessory (Specac, Orpington, Kent, Anglia).

Sík felületek, ill. felületi vékonyrétegek spekuláris reflexiós és reflexiós-abszorpciós mérésére szolgáló, a spektrométer mintaterébe helyezhető optikai feltét, amely nagy fényerő mellett az IR mérősugár beesési szögének széles tartományban (5–85°) való állíthatóságát biztosítja. Szubmikronos vékonyrétegek vizsgálata esetén a mérés érzékenysége a feltét által létrehozható súrlószögű megvilágítás, valamint nagy érzékenységgű MCT-detektor és polarizált fény alkalmazásával növelhető.

### Gázkromatográf és GC/IR interface rendszer (FT-IR spektrométerhez)

Típus: Thermo Finnigan Trace GC (Thermo Finnigan Italia S.p.A., Milano, Olaszország), ill. Thermo Nicolet (Madison, USA) gyártmányú Nexus CG/IR interface.

A meglévő Nicolet Magna 750 típusú FT-IR spektrométert egészítettük ki korszerű gázkromatográfiás kapcsolattal a dedikált interface segítségével. Ennek megvalósítására szereztünk be egy Thermo Finnigan Trace gázkromatográfot (két általános használatra való kolonnával), valamint egy fűthető, fényvezető kapilláris gázküvetét és nagy érzékenységgű MCT-detektort tartalmazó Nexus CG/IR interface modult. Az utóbbit fűtött átvezető csatorna köti össze a gázkromatográfval, míg az interface-szel az optikai kapcsolatot a spektrométer házába kiegészítőleg beszerelt Passport optikai rendszer biztosítja. Az új CG/IR berendezés üzembe állítása jelentős előrelépést jelent intézetünkben a keverékek (szennyezett anyagok, reakciótermékek, metabolitok stb.) IR spektroszkópiai elemzése és komponenseik azonosítása terén. Az új műszeregyüttes 2–3 nagyságrenddel nagyobb érzékenységgű, mint elődje, így erős IR-elnyelő anyagok esetén valódi kapilláris GC-felbontás mellett 10 ng-nál kisebb mennyiségű komponensek detektálására van lehetőség.



## Plazmakémiai csoport

### Száloptikás, CCD-detektoros optikai spektrométer

Az AKKL Plazmakémiai csoportja OM műszerpályázat támogatásával 2002 szeptemberében helyezett üzembe egy száloptikás, CCD-(Charge Coupled Device)-detektoros optikai spektrométert plazmadiagnosztikai célokra.

Főbb paraméterek:

- TRIAX 550 leképező spektrométer 0–1500 nm névleges hullámhossztartományra;
- fókusztávolság: 55 cm, korrigált Czerny-Turner elrendezés;
- forgatható tartóegységen három (300 gr/mm, 1200 gr/mm, 1800 gr/mm) diffrakciós rács. 1200 gr/mm ráccsal a felbontás 0,025 nm, diszperzió 1,55 nm/mm;
- expozícióként 41,2 nm hullámhossztartomány emissziójának egyidejű detektálása lehetséges;
- a belépőrés és a ráccstartó egység számítógépes vezérléssel mozgatható;
- automatikus szűrőbeállítás 280 nm-es és 550 nm-es szűrőkkel;
- kompakt, levegőhűtésű CCD-detektor;



- a készülék ún. „open electrode” kialakítású, amely a 200–400 nm tartományban 30% körüli kvantumhatásfokú;
- a megfelelő térbeli és spektrális felbontást biztosító szenzor 1024×256 pixel (1 pixel: 26 μm × 26 μm) méretű; zajszintje alacsony;
- 6 optikai szálból álló köteg, és adapter a monokromátorhoz. A szálköteg pozicionálására, mozgatására alkalmas mechanika;
- a spektrométer üzemeltetése (rácstartó egység forgatása, belépő- és kilépőrések állítása), az adatgyűjtés és a spektrumok feldolgozása speciális, Windows operációs rendszer alatt futó szoftverrel történik.

### Polimer kémiai és anyagtudományi osztály

#### *Wyatt miniDAWN lézerefényszóródás-detektor*

A fényszóródásmérést a múlt század ötvenes éveitől kezdve alkalmazzák nagyméretű molekulák (polimerek, aggregátumok, szupramolekuláris objektumok stb.) tömegének és méretének meghatározására. A módszer igen nagy előnye, hogy nem igényel sem kalibrációs eljárást, sem bármilyen feltételezést a molekula alakjáról. Más szóval, a fényszóródásmérés a molekulatömeg meghatározásának abszolút módszere. Ráadásul ez a módszer precíz és pontos, amennyiben tökéletesen pormentes körülmények között történik a mérés. Utóbbi feltétel azonban nagymértékben megnehezítette a módszer alkalmazását. Részben ennek is köszönhető, hogy a kalibráción alapuló gélpermeációs kromatográfiás (GPC) módszer több évtizede a makromolekuláris anyagok molekulatömeg-eloszlásának és átlagos molekulatömeg-értékeinek a meghatározására szinte kizárólagosan alkalmazott módszerre vált.

Régóta elfogadott, hogy a GPC-hez kapcsolható fényszóródásos detektor a fent említett két módszer egyidejű alkalmazását teszi lehetővé, és a mért oldat pormentesítése nem okoz nehézséget, mert a kromatográfiás rendszer több szűrőjén és oszloprendszerén áthaladó eluens eleve pormentes. Erre alkalmas, megbízható mérési pontosságot biztosító mérőműszerek azonban csak az utóbbi években jelentek meg. A Polimer kémiai és anyagtudományi osztályon (4.21) az Iván Béla vezetésével folyó kutatások egyfajta nemzetközi elismerésének tekinthető, hogy a fényszóródás-detektorok gyártói között világszerte vezető cégnek tartott Wyatt Inc. (Santa Barbara, USA) kezdeményezte egy, az osztályon működő – az utóbbi években saját erőből jelentősen fejlesztett és bővített – GPC-készülékhez kapcsolható lézerefényszóródás-detektor (miniDAWN) anyagi ellenszolgáltatás nélküli üzembe helyezését. Ezzel vállaltuk, hogy Közép-Európa referencialaboratóriumává válunk az ilyen típusú polimer analízisek tekintetében.

A Wyatt cég által kifejlesztett átfolyós cellának köszönhetően a miniDAWN detektorral „on line” regisztrálható a kromatográfiás oszlopról kilépő frakcionált polimer oldat fényszóródása három különböző szög irányában. A cella három fix helyzetű fényérzékelőnek a látókörében helyezkedik el, amely fényérzékelők a cellán áthaladó lézersugár irányához képest 45, 90 és 135 foknál mérik a szórt fény intenzitását. Ennek köszönhetően egyszerűen alkalmazható az ismert Rayleigh-összefüggés, amely összekapcsolja a szórt fény intenzitását a szórásszöggel és a molekula méretével.

A fényszóródási mérések eredményei alapján információt lehet kapni a makromolekulák alakjáról is. Az abszolút molekulatömeg és a polimermolekulák alakjának meghatározása, valamint ismerete különösen jelentős az osztályon intenzíven kutatott új típusú elágazásos polimerek esetében.

A miniDAWN készülék 690 nm hosszúságú lézerefénysugárral működik. A koncentráció meghatározása az elúciós térfogat függvényében egy kiegészítő műszerrel, interferometriás refraktométerrel történik (Wyatt Optilab DSP), ennek fényforrása azonos hosszúságú hullámot kibocsátó lézer. Ezen túlmenően ez a refraktométer olyan polimerek és kopolimerek esetében nélkülözhetetlen berendezés, melyeknél a törésmutató-inkrementum ismeretlen, és ezt külön meg kell határozni.

A lézerefényszóródás-detektort tehát szintetikus polimerek gélpermeációs kromatográfiás analíziséhez használjuk. Jelenleg kizárólag tetrahidrofurant használunk eluensként. A megbízható eredmények elérése érdekében az eluens gyakori cseréje nem ajánlatos. Különösen káros lehet vizes oldatok használata, mert ez a cella beszennyezéséhez vezethet. Az eddigiek azt mutatják, hogy a polimerek analízise terén a miniDAWN

készülékkel jelentősen bővültek lehetőségeink, és egyúttal olyan újszerű polimer szerkezetek kutatása terén is végezhetünk nemzetközi színvonalú vizsgálatokat, amelyeket ezen nagy értékű detektoregyüttes nélkül nem volna lehetséges az intézetben kivitelezni.

## Katalízis és nyomjelzés-technikai csoport

### *Mössbauer mérésvezérlő- és adatgyűjtő rendszer*

A berendezés KFKI-fejlesztésű, felújított CAMAC-modulos rendszer. Jelen kiépítésében is önálló, teljes Mössbauer-mérőrendszer. Pillanatnyilag szobahőmérsékletű Mössbauer-spektrumok felvételére alkalmas – NaI szcintillációs detektorral kiegészítve elsősorban  $^{57}\text{Fe}$ , ill.  $^{119}\text{Sn}$  mérésekre. Amplitúdóanalizátor üzemmódban kiválasztható a mérésre használni kívánt energiatartomány, sokcsatornás analizátor üzemmódban regisztrálhatók a spektrumok. A berendezést az MTA Kémiai Kutatóközpont, Izotóp és Felületkémiai Intézet Katalízis és nyomjelzés-technikai csoportja üzemelteti.

A későbbiekben várható, hogy a berendezés a folytonos neutron sugár gerjesztésű, in beam Mössbauer-mérőrendszer egyik mérőállomása lesz. Az in beam módszerrel a vizsgált Mössbauer magok köre bővíthető – de a mérésekhez általában igen alacsony hőmérséklet (cseppfolyós hélium) szükséges.



## Neurokémiai csoport

### *Gyors folyadékadagoló rendszer*

A Neurokémiai Osztályon ebben az évben üzembe helyezett gyors folyadékadagoló rendszer segítségével a folyadékcsere kis területen, <1 ms alatt megvalósítható. A berendezés használata lehetővé teszi, hogy lokálisan és gyorsan kicserélhessük az extracelluláris folyadékot, amely sejtfelszíni receptorok farmakológiai vizsgálata során elengedhetetlen feltétel.

A rendszer alapvetően három részből áll, amelyek együtt és külön-külön is használhatóak. A legfontosabb elem egy számítógép által (is) vezérelhető, ún. szolenoid szelepszor (Automate Scientific). A számítógép által kiadott jelnek megfelelően a szelepvezérlő a megfelelő szelepeket 100  $\mu\text{s}$  alatt nyitja, illetve zárja. Az oldatcsere a holtterekben történő keveredés miatt valójában ennél valamivel lassúbb, fokozatosabb. Összesen nyolc szelep van, amelyek egymástól függetlenül vezérelhetők.

Az egyre szűkülő csövek végül egy elosztó segítségével közös kifolyóban végződnek, amely általában egy vékonyra kihúzott, letört végű üveg mikrokapilláris. A folyadék áramoltatását nagynyomású nitrogén alkalmazásával oldjuk meg.

A sejtmembránból kiszakított egyedi receptorok funkcionális vizsgálata során még ennél is gyorsabb oldatcserére lehet szükség. Ennek oka, hogy a sejtfelszíni receptorok az agonista jelenlétében gyorsan deszenzitizálódhatnak. Ennek elkerülése érdekében használjuk a rendszer harmadik elemét, amelynek fő része egy kétosztatú, ún. Teta-cső. A cső egyik feléből a kontrollfolyadék áramlása a receptorra irányul. A számítógép által adott jelre a cső elmozdul és a megadott időtartamra, a cső másik feléből áramló, agonistát tartalmazó folyadék éri a mozdulatlan receptort. Ezzel a módszerrel 100  $\mu\text{s}$  alatt kicserélhető a receptor folyadékkörnyezete.

## Nukleáris kutatások csoport

### *DSA-2000 Digitális Spektrum Analizátor*

A DSA-2000 digitális adatfeldolgozási technikán (DSP) alapuló, nagy hatékonyságú többcsatornás analizátor, melybe minden, a spektrumfeldolgozáshoz szükséges alegység integrálva van: digitális jelfeldolgozó, többcsatornás adatgyűjtő memória, nagyfeszültségű tápegység, digitális stabilizáló, 16K csatornás MCA-memória és Ethernet hálózati csatlakozó. A készülék minden gamma-spektroszkópiai és a legtöbb röntgen-spektroszkópiai detektortípushoz alkalmazható.

#### *Főbb paraméterek:*

- háromszög és trapéz digitális szűrő funkciók;
- kiváló számlálási sebesség és felbontás;
- kivételes beütésszám- és hőmérséklet-stabilitás;
- automatikus ballisztikus deficitkorrekció;
- pulzusmagasság-analízis (PHA) és többcsatornás mérés (MCS) együttes alkalmazásának lehetősége;
- 100%-os komputervezérlés, nagy rendszer- és mérésbiztonság;
- közvetlen mintaváltás-vezérlés;
- külső start/stop bemenet;
- asztali vagy keretbe szerelhető konfiguráció.

### *Canberra 2060 Digitális Jelfeldolgozó*

A 2060 Digitális Jelfeldolgozó Egység a csúcstechnikát jeleníti meg a gamma-spektroszkópiás jelfeldolgozásban.

#### *Főbb paraméterek:*

- háromszög és trapéz digitális szűrő funkciók;
- adatfeldolgozási idő 0,8–76  $\mu$ s;
- digitális alapvonal-visszaállítás és pileup elnyomás;
- csökkentett adatfeldolgozási idő következtében javított felbontás nagy számlálási sebességnél;
- 100 kcps-t meghaladó teljesítmény;
- megnövelt stabilitás és digitálisan tárolt beállítás;
- a ballisztikus deficit automatikus mérése és korrekciója;
- alapértelmezett és felhasználó által is választható beállítások;
- 16K csatornás felbontás;
- kompatibilis a Loss Free Counting rendszerrel;
- széles erősítési tartomány: kétszerestől 1536-szorosig;
- a holtidő, az átviteli teljesítmény és a bejövő beütésszám vizuális kijelzése;
- interface-ek a meglévő és a korábbi Canberra MCA-khoz.

## ELŐADÁSOK ÉS RENDEZVÉNYEK

- **2002. szeptember 1–4. között** a szicíliai Taorminában zajlott a **2. FEZA (Federation of the European Zeolite Association) Konferencia**, melyen a Kutatóközpont itt felsorolt munkatársai is részt vettek: *Kiricsi Imre, Valyon József, Onyestyák György, Kalló Dénes, Lázár Károly, Lónyi Ferenc, Pálné Borbély Gabriella*.
- **2002. szeptember 30. és október 1. között** zajlott az **MTA Gyógyszerkémiai és Gyógyszer-technológiai Munkabizottságának** éves ülése, melyen a Kutatóközpont részéről *Újváry István* a fragmentum alapú hatóanyag-tervezésben a bioizosztéria első felhasználásával elért eredményeket ismertette.
- Folytatódott a sikeres **Szerves Kémiai Szemináriumok** című előadás-sorozat *Hajós György* vezetésével, melyen a következőkben felsorolt előadások hangzottak el:
  - 2002. szeptember 23.** Nagy Ildikó: Új hetaril-diének, hetaril-azadiének szintézise és reakciókészsége  
*Vakulya Benedek*: Szubsztituált vinilén-karbonátok előállítása és reakciói
  - 2002. október 7.** *Besenyei Gábor*: A szerkezet–reakciókészség kapcsolat megjelenése aromás szulfonamid származékok, arénszulfonil-azidok és benzoészav-azidok egyes reakcióiban  
*Rákó János*: Heparin oligoszacharidok szintézise uronsav tioglikozidok alkalmazásával
  - 2002. október 28.** *Barabás Péter*: Olefinek enantioszelektív oxidációja  
*Kövér Péter*: Heteroaromás ikerionok
  - 2002. november 18.** *Jablonkai István*: A Mitsunobu reakció és alkalmazása biológiailag aktív vegyületek előállítására
  - 2002. december 9.** *Kaleta Zoltán*: Naftolok reakciói cikloalkadiénekkal  
*Gróf Csilla*: Új ikerionos triazinszármazékok előállítása és cikloaddíciójuk
  - 2003. február 3.** *Keserü György*: Elméleti és preparatív modellek a gyógyszerkémiaiában: a nitrogén-monoxid-szintézis vizsgálata
  - 2003. február 24.** *Temesváriné Major Eszter*: Kísérletek 8-oxo-ergolén totálszintézisére  
*Vakulya Benedek*: Olefin metatézis alkalmazása szerves szintézisekben
  - 2003. március 31.** *Vékey Károly*: A szerves tömegspektrometria lehetőségei és alkalmazása  
*Czinege Erzsébet*: Egy heparin triszacharid előállítása
  - 2003. június 23.** *Kovács Péter*: Hidrokinonszármazékok új szigmatróp átrendeződési reakciói
- A **Röntgendiffrakciós Szemináriumok** keretében az alábbi előadások hangzottak el:
  - 2003. április 23.** *Kosztolányi Tamás*: Metanolban oldott kalcium-klorid vizsgálata molekuláris dinamikai szimulációval
  - 2003. június 4.** *Fábián László*: Hidrogénkötések és szimmetriák
- A **Neurokémiai szemináriumok** keretében az alábbi előadások hangzottak el:
  - 2002. október 7.** *Nyikos Lajos*: Szinkronizáció és rekurrencia in vitro epilepszia-modellben.  
*Kovács Richárd*: A mitokondriális Ca<sup>2+</sup>-felvétel – elméleti és metodikai aspektusok.
  - 2002. november 8.** *Barabás Péter*: Tranziens és tartós kémiai és elektromos fényválasz emlősretinában.  
*Juhász Gábor* (MTA TKI Neurobiológiai Kutatócsoport): Fényaktivált mátrix metalloproteáz aktiváció a retinában, fiziológiai, proteinkémiai és proteomikai eredmények.
  - 2002. december 6.** *Lasztóczy Bálint*: Elektrográfias rohamok vizsgálata extra- és intracelluláris elektródokkal  
*Héja László*: Ergolinszármazékok GABAerg és GLUerg vizsgálata
  - 2003. március 7.** *Prof. Simon István* (Fehérjeszerkezet Kutató Csoport, MTA SZBK Enzimológiai Intézet): Transzmembrán fehérjék topológiája
  - 2003. április 4.** *Dr. Ábrahám István* (MTA-ELTE Neurobiológiai Kutatócsoport): Az ösztrogén gyors, nem- genomiális hatásai a központi idegrendszerben
  - 2003. május 9.** *Prof. Spät András* (Élettani Intézet, Semmelweis Egyetem Budapest): Ca<sup>2+</sup> jelátvitel a citoplazmából a mitokondriumba endokrin sejtekben.

- **2002. november 6. A Magyar Tudomány Napja** alkalmából a kutatóközpont egész napos programot szervezett az ELTE Radnóti Miklós Gyakorló Gimnázium és az ELTE Trefort Ágoston Gyakorló Gimnázium 11. és 12. évfolyamra járó középiskolás diákjai részére, melyen a kutatóközpontban folytatott szerves és biomolekuláris kémiai kutatásokat mutattuk be. Délelőtt a diákok az alábbi előadásokat hallgatták meg:

*Vinkler Péter*: A Kémiai Kutatóközpont bemutatása  
*Hajós György*: N-N kötés kialakítása heterociklusos vegyületeknél  
*Soós Tibor*: C-C kötés fémorganikus reagensekkel  
*Dörnyei Gábor*: Természetes szerves vegyületek szintézise és gyógyszerkémiái vonatkozásai  
*Zsila Ferenc*: Optikai aktivitás a kémiában és a biológiában  
*Nyikos Lajos*: Kémiai jelátvitel a központi idegrendszerben

Délután a diákok a kutatóközpont néhány laboratóriumával ismerkedtek meg.
- **2002. december 18. IX. Anyagszerkezet-kutatási konferencia.** A konferencia programján 12 fiatal kutató 15-15 perces előadással mutatkozott be. A programot *Sohár Pál* nyitotta meg. A kutatóközpont részéről az alábbi előadások hangoztak el:

*Drahos László, Ron M. AS. Heeren és Vékey Károly*: Fourier-transzformációs tömegspektrométeren végzett kísérletek modellezése a MassKinetics program segítségével  
*Bacsik Zoltán és Mink János*: Légköri szennyezők FT-IR spektroszkópiái detektálása  
*Bombitz Petra, Czugler Mátyás, Luigi Nassimbeni és Kálmán Alajos*: Sztérikus és elektrosztatikus kölcsönhatások szerepe spontán rezolválódásban
- **2003. február 28. Az MTA Katalízis Munkabizottság** ülésén a kutatóközpont részéről a következő előadások hangoztak el:

*Wootsch Attila*: Szén-monoxid preferenciális oxidációja hidrogén jelenlétében  
*Pálné Borbély Gabriella*: Zeolitok szintézise és kémiai módosítása rétegszilikátok átkristályosítása, valamint szilárd fázisban végbemenő reakciók révén  
*Onyestyák György*: Nátrium-azid reakciók zeolitok mikropórusaiban
- **2003. április 11-én** „Modern Synthetic Methodologies in Heterocyclic Chemistry” címen, meghívott előadókkal, a **Center for Biomolecular Chemistry Európai Uniós projekt** keretében lebonyolított előadói ülés zajlott a kutatóközpontban.
- **2003. április 12-én Mayer István 60. születésnapja alkalmából** ünnepi szimpózium zajlott. A szimpóziumon több külföldi előadó mellett az alábbi hazai kutatók előadásai hangoztak el:

*Simonyi Miklós*: Supramolecular chirality  
*Lukovits István*: Constructive enumeration of chiral isomers of alkanes  
*Surján Péter* (ELTE, Elméleti Kémiai Tanszék): Multiconfiguration perturbation theory  
*Vibók Ágnes* (Debreceni Egyetem, Elméleti Kémiai Tanszék): A survey of ab initio conical intersections for the H+H<sub>2</sub> system  
*Lendvay György*: Changes of bond orders and energy contributions in chemical reactions  
*Hamza Andrea*: Energy partitioning

*Külföldi előadókat lásd a Külföldi előadók fejezetben.*
- **2003. április 24. Az MTA Koordinációs Kémiai Munkabizottsága** szervezésében tartott előadóülésen az alábbi előadások hangoztak el:

*Jakabné Tóth Éva* (Swiss Federal Institute of Technology, Institute of Molecular and Biological Chemistry, Lausanne, Svájc): Gd(III) és Eu(II) komplexek a mágneses rezonanciás képalkotásban. Hatásmechanizmusuk és fejlesztésük főbb irányai (tervezett MTA-doktori értekezés anyagának bemutatása)  
*Gajda Tamás* (SZTE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék): Proteinek fémkötőhelyeinek szerkezeti és funkcionális modellezése (tervezett MTA-doktori értekezés anyagának bemutatása)



*Gyurcsik Béla* (SZTE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék): Hisztidintartalmú oligopeptidek és peptid-típusú vegyületek réz(II)-komplexei

- **2003. április 25.** A **Magyar Toxikológusok Egyesülete Gyógyszertoxikológiai szekciója** „Kockázatbecslés a korai humán fázisvizsgálatokban preklinikai adatok alapján” címmel rendezett tudományos ülést. A tudományos ülés programja:  
*Vereczkey László*: Kockázatbecslés  
*Monostory Katalin*: Izolált májsejtek alkalmazása a preklinikai vizsgálatok során  
*Gachályi Béla*: Milyen ismeretekkel kell rendelkeznie egy klinikai farmakológusnak a vizsgálatok megkezdéséhez?
- **2003. április 23–26.** A **3<sup>rd</sup> Baltic Conference on Electrochemistry** (Gdańsk, Lengyelország) rendezvényen *Kálmán Erika* vitaindító előadása hangzott el „New potential inhibitors for copper corrosion” címmel.
- **2003. április 29–31.** között került sor Királyréten a Kémiai Kutatóközpont **VI. Doktori Kémiai Iskolájára**. A rendezvény főszervezője *Riedl Zsuzsanna* volt. A DOKI-n az alábbi előadások hangzottak el:  
*Csíki Zsuzsanna*: A heparin- és heparán-szulfát biológiai jelentősége  
*Tatai János*: Új szintézisstratégia heparin oligoszacharidok szintézisére  
*Czinege Erzsébet*: Az ortogonális védőcsoport-stratégia kiterjesztése magasabb tagszámú heparin oligoszacharidok szintézisére  
*Matola Tünde, Jablonkai István*: Kémiai szerkezet és glutation S-transzferáz izoenzimek indukciójának összefüggése haloacetálok, ketálok és amidok körében  
*Gróf Csilla, Hajós György, Riedl Zsuzsanna, Egyed Orsolya, Csámpai Antal*: Új azometiniminek szintézise és továbbalakítása  
*Vakulya Benedek, Soós Tibor*: Triének regioselektív gyűrűzáró metatézise  
*Schubert Gábor*: Átmenetifém-komplexek szerkezetének és reaktivitásának elméleti vizsgálata  
*Schlosser Gitta, Pócsfalvi Gabriella, Mercedes de Frutos, Vékey Károly*: Ellenanyagkomplexek tömegspektrometriás vizsgálata  
*Héja László, Kovács Ilona, Szárics Éva, Incze Mária, Temesváriné-Major Eszter, Dörnyei Gábor, Peredy-Kajtár Mária, Gács-Baitz Eszter, Szántay Csaba és Kardos Julianna*: Újonnan szintetizált szekeorgolinszármazékok GABA és glutaminsav uptake gátló hatása  
*Bíró Tímea, Maksay Gábor*: Glicinreceptorok allosztérikus szabályozása hatékonyabb parciális, mint teljes agonistákkal  
*Farkas Orsolya, Héberger Károly, Jakus Judit*: Változóselektálási módszerek alkalmazása retenciós indexek és sebességi állandók előrejelzésére  
*Besenyei Gábor*: Az egyetemi oktatással kapcsolatos egyes szavaink eredete
- **2003. május 5.** Az **Utrechti Egyetem** végzős kémia szakos hallgatóinak egy csoportja látogatta meg a kutatóközpontot. A hallgatók tudományos programon vettek részt, melynek első felében előadásokat hallgattak meg, majd délután néhány laboratóriumi bemutatót vettek részt. Az elhangzott előadások:  
*Vereczkey László*: Studies on drug interactions by using in vitro methods  
*Jakus Judit*: Measurement of free radicals in chemical and biological systems  
*Vidóczy Tamás*: What can we learn from the short lifetime of excited states?  
*Iván Béla*: Nanophase separated smart amphiphilic conetworks  
*Drahos László*: Mass spectrometric research in the Chemical Research Center  
*Keresztúry Gábor*: Vibrational spectroscopy at the Chemical Research Center  
*Lendvay György*: Theoretical studies of chemical reactions at the Institute of Chemistry
- 2003. május 7-én az Intézet adott otthont a Mettler Toledo cég **Termoanalitikai szemináriumának**.

### Kutatóközponti Tudományos Napok

- Az MTA Kémiai Kutatóközpontban **2003. május 28–29.** között ötödször rendezték meg a **Kutatóközponti Tudományos Napokat**. 5 szekcióban 32 előadás hangzott el. A szekciók és az elhangzott előadások száma: Felületkémi és katalízis szekció: 6; Szerkezeti kémiai szekció: 9; Biomolekuláris kémiai szekció: 8; Izotópkémiai szekció: 3; Anyag- és környezetkémiai szekció: 6

A zárórendezvényen adta át a Kémiai Kutatóközpont főigazgatója – az Igazgatótanács javaslatát figyelembe véve – a kutatóközpontban, ill. annak jogelőd intézményeiben, a kémia tudományának hosszú időn át történő eredményes művelését, ill. az intézmények érdekében kifejtett jelentős tevékenységet elismerendően a 2003. évi „PRO ARTE CHEMICA” érmelet a következő kutatóknak:

*Bérces Tibor*, az MTA rendes tagja,

*Guczi László*, az MTA Doktora,

*Ötvös László*, az MTA Doktora,

*Veres Árpád*, az MTA Doktora.

- A tudományos rendezvényen elhangzott előadások alapján a felkért Bíráló Bizottság két kutatói díjat és hat fiatal kutatói díjat osztott ki az alábbiak szerint:

- **Kutatói díjban** és az ezzel járó 600 ezer Ft kutatási támogatásban részesültek:

*Beck Andrea*: AuPd nanorészecskék SiO<sub>2</sub>-hordozón és TiO<sub>2</sub>-hordozón: szerkezet és katalitikus aktivitás CO-oxidációban

*Iván Béla*: Nanoszerkezetű amfifil polimer kotérhálók

- **Fiatal kutatói díjban** és az ezzel járó 300 ezer Ft kutatási támogatásban részesültek:

*Bikádi Zsolt*: Antagonisták kötődésének vizsgálata 5HT<sub>3</sub>A-receptor modellen

*Héja László*: Újonnan szintetizált szekoergolinszármazékok  $\gamma$ -amino-vajsav és glutaminsav transzportgátló hatása

*Megyes Tünde*: Litium- és kalciumionok vizes és alkoholos oldatainak szerkezetvizsgálata

*Mihály Judith*: Mikrohullámú feltáróedények felületi degradációjának FTIR és FT-Raman spektroszkópiai vizsgálata

*ifj. Pukánszky Béla*: A határfelületi kölcsönhatás mechanizmusának vizsgálata polipropilén/rétegszilikát nanokompozitokban

*Tolnai Gyula*: Felületienergia-meghatározás: lokális és makroszkopikus megközelítés

*A díjazott előadások kivonatait lásd az I. mellékletben.*

- **Dicséretben részesültek:** *Dajka Katalin, Fábán László, Gál Loránd, Klébert Szilvia, Nagy Kornél, Schlosser Gitta*

### Nemzetközi Tudományos Tanácsadó Testület ülészsaka

- **2003. június 17–20.** között tartotta ülészsakát az MTA Kémiai Kutatóközpont **Nemzetközi Tudományos Tanácsadó Testülete**. A rendezvény első napján hangzott el Markó Istvánnak, a Testület tagjának „Novel methodology towards modern total synthesis” címmel tartott előadása. A kutatóközpont kutatói a következő előadásokkal szerepeltek:

*Hajós György*: Center of Excellence on Biomolecular Chemistry

*Soós Tibor*: Application and development of some homogeneous catalytic processes in organic chemistry

*Emri Zsuzsa*: Genuine model of neuronal signalling reveals state-dependent response dynamics

*Jenei Veronika*: Role of protein E3B1 and nitric oxide in cell adhesion and migration

*Fábán László*: Special cases of polymorphism and isostructurality controlled by antidromic hydrogen bond rings

*Schubert Gábor:* Theoretical studies on the mechanism of metal-assisted CO<sub>2</sub>-olefin coupling reactions

*Keresztes Zsófia:* Characterisation of nanostructured materials by surface energy mapping

*Tompos András:* Combined application of holographic research strategy and artificial neural networks for catalyst library optimisation

*Groh Werner Péter:* New possibilities for the synthesis of well-defined polyisobutylenes by quasilinging carbocationic polymerisation

*Pukánszky Béla:* Alteration of the interaction in PP/montmorillonite nanocomposites

*Nagy Kornél:* New approaches in clinical chemistry: application of mass spectrometry

*Mészáros Erika:* Thermal analysis of biomass materials

A rendezvény harmadik napja a Izotóp és Felületkémi Intézetben zajlott. Ekkor a következő előadások hangzottak el:

*Dajka Katalin:* The H atom addition to the conjugated double bonds as studied by pulse radiolysis

*Wootsch Attila:* Reactions of hydrocarbons on noble metal catalysts. Effect of surface components

*Belgya Tamás:* Perspectives and status of the in-beam Mössbauer spectroscopy project

- **2003. augusztus 23–28.** között a Debreceni Egyetem adott otthont a **28. International Conference on Solution Chemistry (ICSC)** rendezvénynek. A konferencia elnöke *Pálinkás Gábor* volt. Az ICSC rendezvénysorozat az oldatkémia különböző ágaival foglalkozó tudományos kutatók legátfogóbb fóruma.
- A Kémiai Intézet munkatársai **NATO Advanced Research Workshop on the Dynamics of Elementary Chemical Reactions** címmel konferenciát rendeztek Balatonföldváron **2003. június 8–12.** között. A Workshop szervezője *Lendvay György*, a helyi szervezőbizottság tagjai intézetünkben *Bencsura Ákos* és *Bene Erika* voltak. A szervezést a NATO Tudományos Programtól elnyert anyagi támogatás tette lehetővé. A műhely szakmai színvonalát jellemzi, hogy azon a terület legkiválóbb képviselői vettek részt, köztük a kémiai fizika legjobb 5 folyóiratának főszerkesztője és több akadémia tagjai.



Részletek a <http://www.chemres.hu/ARW> oldalon található.

- **2003. szeptember 28. és október 2.** között Budapesten, a Kongresszusi Központban került megrendezésre az **Eurocorr 2003** konferencia, amely az év legrangosabb eseménye volt a korróziókutatás területén. A konferenciát szervező intézmények:  
European Federation of Corrosion (EFC)  
Magyar Korróziós Társaság (HUNKOR)  
MTA Kémiai Kutatóközpont (MTA KK)  
Paint Research Institute (PRI)  
Diamond Congress Ltd.  
A tudományos és szervezőbizottság elnöke *Kálmán Erika* volt.  
A világ 43 országából érkeztek előadók; 22 szekcióban 329 előadás hangzott el.  
A konferenciával egy időben zajlott a Hungarocorr-Hungarocoat szakkiállítás, melyen közel 100 cég vett részt.



## TUDOMÁNYOS ÉRTEKEZÉSEK VITÁI

### PhD-értekezések

- **2002. november 13.** *Bikádi Zsolt*: Intra- és intermolekuláris másodlagos kölcsönhatások: az egyedi molekulától a szupramolekuláris rendeződésig
- **2002. december 20.** *Hamza Andrea*: Energiapartíciós módszerek molekuláris rendszerek vizsgálatára
- **2003. március 7.** *Czégény Zsuzsanna*: Polimerek hőbomlása műanyag hulladékokban
- **2003. március 20.** *Baranyai Péter*: Szingulett oxigén képződésének, detektálásának és kioltásának vizsgálata
- **2003. április 30.** *Bencsura Ákos*: Szabadgyökök elemi reakcióinak vizsgálata fotoionizációs tömegspektrometriával
- **2003. május 16.** *Mészáros Gábor*: A váltóáramú elektrokémiai mérés technika alkalmazásának egyes kérdései a korróziós kutatásban

### MTA-doktori értekezések

- *Lendvay György*: Elemi reakciók potenciálfelületének, kinetikájának és dinamikájának elméleti vizsgálata
- *Veres Zsuzsanna*: A szelenofoszfát bioszintézise és a szelénatom beépülése a sejtek makromolekuláiba
- *Vinkler Péter*: A kémia tudományos kommunikációs rendszereinek tudományometriai vizsgálata

### KÜLFÖLDI ELŐADÓK

- **2002. szeptember 18.** *Dr. Branko Ruscic* (Chemistry Division, Argonne National Laboratory, Argonne, Illinois, USA): A divertimento is thermochemistry: from photoionisation spectroscopy to active tablets
- **2002. szeptember 25.** *Prof. Ingmar Persson* (Uppsala): Formation of sulfuric acid in marine archeological wood
- **2002. október 3.** *Prof. Igor G. Zenkevich*: Actual problems of GC identification of organic compounds
- **2002. október 10.** *Dr. William J. Simonsick* (Dupont Marshal Research and Development Laboratory, USA): Application of Fourier transform mass spectrometry for the analysis of coatings and polymers
- **2002. október 17.** *Dr. Denis P. Curran* (Department of Chemistry, University of Pittsburgh, USA): An introduction to fluororous techniques for organic synthesis: from separating mixtures to making mixtures
- **2002. október 17.** *Dr. Katerina Meszarosova* (Institute of Macromolecular Chemistry, Academy of Sciences of the Czech Republic): Preparation of new chelating polymeric sorbents for the separation of specific immunoglobulin IgG1 by metal ion affinity chromatography
- **2002. október 21.** *Prof. Paul Tordo* (Université de Provence, Marseille, France): Alkoxyamine new initiators for controlled free radical polymerisation and for free radical chemistry

- **2002. november 14.** *Dr. Dana Iosip* (Institute of Macromolecular Chemistry, Romanian Academy of Sciences, Iasi, Romania): New aromatic polyimides containing pendant acetoxybenzamide groups
- **2002. november 21.** *Dr. Kroó Erik* (Advanced Fuel Research Inc., East-Hartford, USA): Composite structure of coal
- **2002. november 22.** *Prof. Hisasi Takemouti* (Université Pierre & Marie Curie, Paris, France): Corrosion inhibition of copper in presence of ammonia in chloride medium by triazole compounds
- **2002. november 25.** *Prof. Hisasi Takemouti* (Université Pierre & Marie Curie, Paris, France): Protection against the tarnishing of silver and copper-gold alloy by an electrochemically polymerised thin film
- **2002. november 25.** *Prof. Michael Keddan* (Université Pierre & Marie Curie, Paris, France): Frequency response of the double-layer capacitance in presence of Faradaic processes
- **2002. december 9.** *Dr. Bert U.W. Maes* (University of Antwerpen, Belgium): Synthesis of (aza)(benzo)carbolines via a tandem Pd-catalyzed approach
- **2002. december 12.** *Dr. Dusanka Janezic* (National Institute of Chemistry, Ljubljana, Slovenia): Symplectic molecular dynamics integration
- **2003. március 4.** *Dr. Christopher F. Rose* (Department of Cellular Neuroscience at Max-Delbrück Center for Molecular Medicine, Berlin) The implications of ammonia neurotoxicity and glutamatergic dysfunction in acute hepatic encephalopathy
- **2003. április 8.** *Prof. Dr. Frank Endres* (Technical University of Clausthal, Germany): Ionic liquids solvents for electrochemistry and electrochemical nanotechnology
- **2003. április 11.** **A Modern Synthetic Methodologies in Heterocyclic Chemistry** címmel tartott előadói ülésen a következő előadások hangzottak el:
  - Mikael Begtrup* (Royal Danish School of Pharmacy, Department of Medicinal Chemistry, Denmark): Manipulation with bases and metals by synthesis of heterocycles
  - Guy Quéguiner* (Université de Rouen – IUT – Dépt. Chimie, France): Synthesis of new organometallics of pyridines and diazines
  - Branko Stanovik* (Faculty of Chemistry and Chemical Technology, University of Ljubljana, Slovenia): 3-dimethylaminopropenoates: the synthesis and transformations of 3-aminoquinolizin- and azaquinolizin-4-ones and their azido analogues
  - Henk van der Plas* (Laboratory of Organic Chemistry Agricultural University of Wageningen, Holland): Oxidative dehydro substitution in azine
  - José Elguero* (Instituto de Quimica Medica [CSIC], Spain): Polymorfism and related topics in heterocyclic chemistry
  - Gottfried Märkl* (Universität Regensburg, Institut für Chemie, Deutschland): Monocyclic polyphosphanopolynes and dihydro-diphospha-tetraepoxyphyrines
- **2003. április 12.** Mayer István 60. születésnapja alkalmából tartott ünnepi tudományos szimpóziumon a következő, külföldi előadók által tartott előadások hangzottak el (a magyar előadókat lásd az Előadások és rendezvények fejezetben):
  - Suhai Sándor* (Department of Biophysics, German Cancer Research Center, Heidelberg, Germany): Light absorption and proton transfer in bacteriorhodopsin
  - Pierre Valiron* (Laboratoire d'Astrophisique of Grenoble, France): Towards a 9\_D PES for H<sub>2</sub>O-H<sub>2</sub> at cm<sup>-1</sup> accuracy: A challenge in support to the exploration of the molecular universe by the Herschel satellite

*János Ángyán* (Laboratory of Theoretical Chemistry, CNRS and University of Henri Poincaré, Nancy, France): An approximate dispersion energy functional using localised orbitals

*Robert Ponec* (Institute Chemical Process Fundamentals, Prague, Czech Republic): Electron reorganisation in chemical reactions from the analysis of BO profiles

*Paizs Béla* (Department of Biophysics, German Cancer Research Center, Heidelberg, Germany): Fragmentation pathways of protonated peptides: a meetingpoint for proteomics and theoretical chemistry

- **2003. április 16.** *Prof. Elisabeth Csöregi* (Lund University, Sweden): FP6 and Hungary, possibilities and reality
- **2003. április 28.** *Prof. Somogyi Árpád* (University of Arizona, USA): A tömegspektrometria alkalmazása proteinek azonosításában
- **2003. május 5.** *Dr. Linda Breci* (University of Arizona, USA): Gas-phase H/D exchange of peptides
- **2003. május 15.** *Prof. Peter J. Stang* (Department of Chemistry, University of Utah, USA): Nanoscale molecular architecture: design and self-assembly of metalocyclic polygons and polyhedra via coordination
- **2003. május 16.** *Prof. Thorsten Bach* (Lehrstuhl für Organische Chemie, Technische Universität München, Deutschland): Enantioselective photochemical reactions in solution
- **2003. június 5.** *Dr. E. E. Nikitin* (Technion, Haifa, Israel): High-precision control of molecular wave packet dynamics (experiment and theory)
- **2003. június 25.** *Prof. Jordi Martí* (Department of Physics and Nuclear Engineering, Technical University of Catalonia, Spain): The structure and dynamics of water confined in carbon nanotubes
- **2003. július 10.** *Dr. Fritz E. Kühn* (Anorganisch-chemisches Institut der Technischen Universität, München, Deutschland): Solvent stabilized transition metal(II) complexes as polymerisation
- **2003. július 29.** *Dr. Anne Millet* (University of Grenoble, France): Structures and reactivity of small HCl(H<sub>2</sub>O)<sub>N</sub> clusters: a theoretical study
- **2003. szeptember 2.** *Prof. Prókai László* (University of Florida, Gainesville, USA): Makromolekulák tömegspektrometriája: szintetikus polimerektől és fehérjéktől az agyukatásig
- **2003. szeptember 18.** *Prof. Joseph P. Kennedy* (University of Akron, USA) „Polymers for biological applications” címmel tartott előadást. Kennedy professzort Pálinkás Gábor köszöntötte 75. születésnapja alkalmából.
- **2003. szeptember 22.** *Prof. Osvaldo A. Scelza* (Univ. Nacl. Litoral, CONICET, Inst. Invest. Catalysis & Petroquim, Fac. Ingn. Quim., Santa Fe, Argentina): Metallic catalysts supported on granular and felts of activated carbon
- **2003. szeptember 25.** Pálinkás Gábor főigazgató meghívására érkezett a kutatóközpontba *Prof. Sir Harold Kroto* (Sussex Nanoscience and Nanotechnology Centre, University of Sussex Brighton, UK), a Nobel-díj 1996-os nyertese. „2010, NanoSpace Odyssey” címmel tartott nagy sikerű előadást.
- **2003. szeptember 26.** Az **Involvement of Free Radicals in Epilepsy Workshop** keretében az alábbi előadások hangzottak el:  
*Sylvia Pietri* (SREP-CNRS Marseille, France): Some ESR methods used for free radical detection in several biological models

*Uwe Heinemann and Oliver Kann* (Johannes Müller Institute for Physiology, Charité, Humboldt University, Berlin, Germany): Mechanisms of coupling of neuronal and metabolic activity

*Alexei P. Kudin, Nana-Yaw Bimpong-Buta and Wolfram S. Kunz* (Department of Epileptology, University Bonn, Medical Center, Bonn, Germany): Localisation of ROS producing sites in rat brain mitochondria

*Paul J. E. Smith<sup>1</sup>, Toju Lor<sup>2</sup>, Armando A. Gennazzani<sup>2</sup>, Ruth M. Empson<sup>1</sup>*: Damage or protection arising from interictal type epileptiform activity in organotypic hippocampal slice cultures from rat

<sup>1</sup>School of Biological Sciences, Royal Holloway University of London, UK

<sup>2</sup>Department of Pharmacology, University of Cambridge, UK

## **ÉRTEKEZLETEK**

### **A Tudományos Vezetői Tanács ülései**

#### **2002. október 14.**

*Napirend:*

1. Tájékoztató az intézet aktuális gazdasági helyzetéről és a 2002. évi béremelésről
2. Tájékoztató a kutatóközpont szervezeti átalakításáról
3. Egyebek

#### **2003. április 8.**

*Napirend:*

1. A Kémiai Intézet 2003. évi Működési Terve
2. A Kutatóközponti Kutatói Tanács újraszervezése
3. A Nemzetközi Tudományos Tanácsadó Testület soron következő ülése
4. A Kutatóközponti Tudományos Napok rendezvénye
5. Egyebek

### **Az MTA KK Igazgatótanácsának ülései**

#### **2002. szeptember 23.**

*Napirend:*

1. Tájékoztató a kutatóközpont első félévi gazdasági helyzetéről
2. A Kémiai Kutatóközpont Nemzetközi Tudományos Tanácsadó Testületének ajánlásai
3. A Kémiai Kutatóközpont tematikai és szervezeti átalakításának aktuális kérdései
4. Egyebek

#### **2002. december 20.**

*Napirend:*

1. Tájékoztató a kutatóközpont 2002. évi gazdálkodásáról és a 2003. évi tervekről
2. Egyebek

#### **2003. április 7.**

*Napirend:*

1. A kutatóközpont 2003. évi Működési Terve
2. A kutatóközpont üzemi általános és központi kiadásainak 2003. évi terve
3. A Kutatóközponti Kutatói Tanács újraszervezése
4. A Nemzetközi Tudományos Tanácsadó Testület soron következő ülése
5. A Kutatóközponti Tudományos Napok rendezvénye
6. Egyebek



**PUBLIKÁCIÓS ADATOK 2002.****Az 2000–2002. évi publikációs pontok szervezeti egységenként  
Idézetfigyelés**

Szervezeti egység száma, vezető neve		Pontszámok			
		2000	2001	2002	2000–2002
1.11.	Jablonkai I.	3,105	8,208	4,158	15,471
1.12.	Szammer J.	1,890	0,400	0,990	3,280
1.2.	Hajós Gy.	11,968	5,343	13,608	30,919
1.31.	Dörnyei G.	5,277	0,630	2,110	8,017
1.32.	Fügedi P.	0,384	4,754	0,000	5,138
1.4.	Simonyi M.	6,463	22,853	24,588	53,904
1.5.	Kardos J.	10,274	17,460	14,234	41,968
1.61.	Vereczkey L.	0,255	6,206	12,424	18,885
1.62.	Jakus J.	8,046	11,085	14,825	33,956
2.1.	Simándi L.	2,267	2,324	13,602	18,193
2.2.	Kálmán E.	22,729	20,844	9,484	53,057
2.3.	Margitfalvi J.	10,287	16,886	5,615	32,788
2.4.	Kiricsi I.	14,946	43,667	25,563	84,176
3.11.	Rockenbauer A.	5,007	6,395	3,517	14,919
3.12	Vidóczy T.	2,367	4,410	1,742	8,519
3.12.	Biczók L.	0,808	5,192	6,570	12,570
3.13.	Gács I.-né	3,406	2,982	4,403	10,791
3.14.	Keresztury G.	7,281	4,959	5,426	17,666
3.2.	Dóbé S. (Bérces T.)	10,188	7,699	1,748	19,635
3.31.	Kálmán A.	16,499	12,842	9,763	39,104
3.32.3.33.	Radnai T., Grósz T.	2,486	0,087	5,424	7,997
3.4.	Vékey K.	2,540	27,076	10,378	39,994
3.5.	Pápai I.	11,104	22,884	17,354	51,342
	Összesen:	159,577	255,186	207,526	622,289

*A 2002. évben 7, illetve több független idézetet kapott cikkek*

Dongré, A.R.; Jones, J.L.; **Somogyi Á.**, Wysocki, V.H.

Influence of peptide composition, gas-phase basicity, and chemical modification on fragmentation efficiency: evidence for the mobile proton model

JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY, 118: 8365-8374 (1996)

32 független idézet

Dongré, A.R.; **Somogyi Á.**; Wysocki, V.H.

Surface-induced dissociation: an effective tool to probe structure, energetics and fragmentation mechanisms of protonated peptides

JOURNAL OF MASS SPECTROMETRY, 31: 339-350 (1996)

20 független idézet

**Fülöp V.**; Moir, J.W.B.; Ferguson, S.J.; Hajdu J.,

The anatomy of a bifunctional enzyme, structural basis for reduction of oxygen to water and synthesis of nitric-oxide by cytochrome cd(1)

CELL, 81: 369-377 (1995)

15 független idézet

**Vékey K.**; Czira G.

Distinction of amino acid enantiomers based on the basicity of their dimers

ANALYTICAL CHEMISTRY, 69: 1700-1705 (1997)

11 független idézet

**Drahos L.; Vékey K.**

How closely related are the effective and the real temperature

JOURNAL OF MASS SPECTROMETRY, 34: 79-84 (1999)

11 független idézet

**Lendvay G.; Mayer I.**

Some difficulties in computing BSSE-corrected potential surfaces of chemical reactions

CHEMICAL PHYSICS LETTERS, 297: 365-373 (1998)

9 független idézet

Wu, G.; Schatz, G.C.; **Lendvay G.**; Fang, D.C.; Harding, L.B.

A new potential surface and quasiclassical trajectory study of  $H+H_2O(r)OH+H_2$

JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS, 113: 3150-3161 (2000)

9 független idézet

Gehrke. T.; **Telegdi J.**; Thierry, D.; Sand, W.

Importance of extracellular polymeric substances from Thiobacillus ferrooxidans for bioleaching

APPLIED AND ENVIRONMENTAL MICROBIOLOGY, 64: 2743-2747 (1998)

8 független idézet

**Héberger K.**; Lopata A.

Assessment of nucleophilicity and electrophilicity of radicals, and of polar and enthalpy effects on radical addition reactions

JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY, 63: 8646-8653 (1998)

8 független idézet

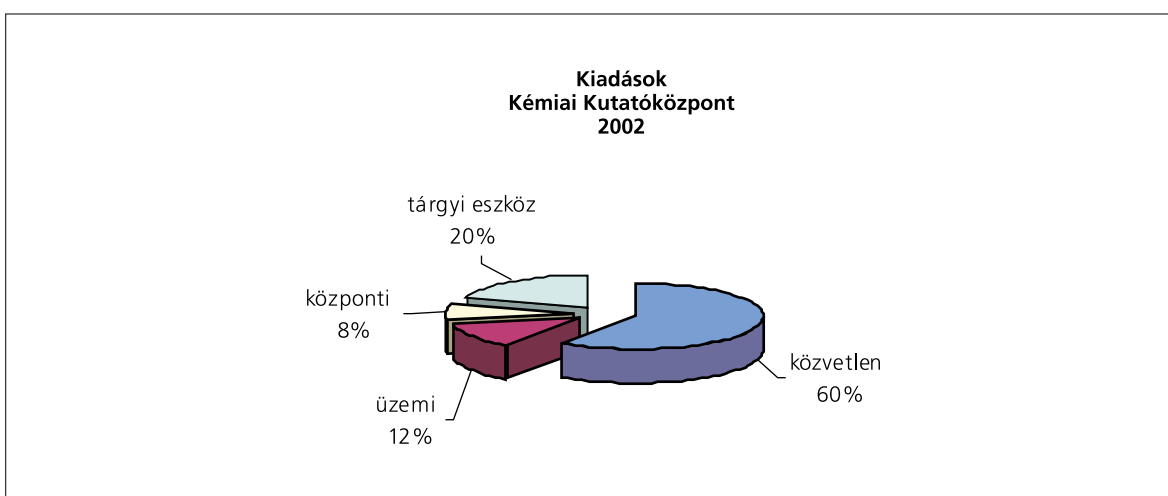
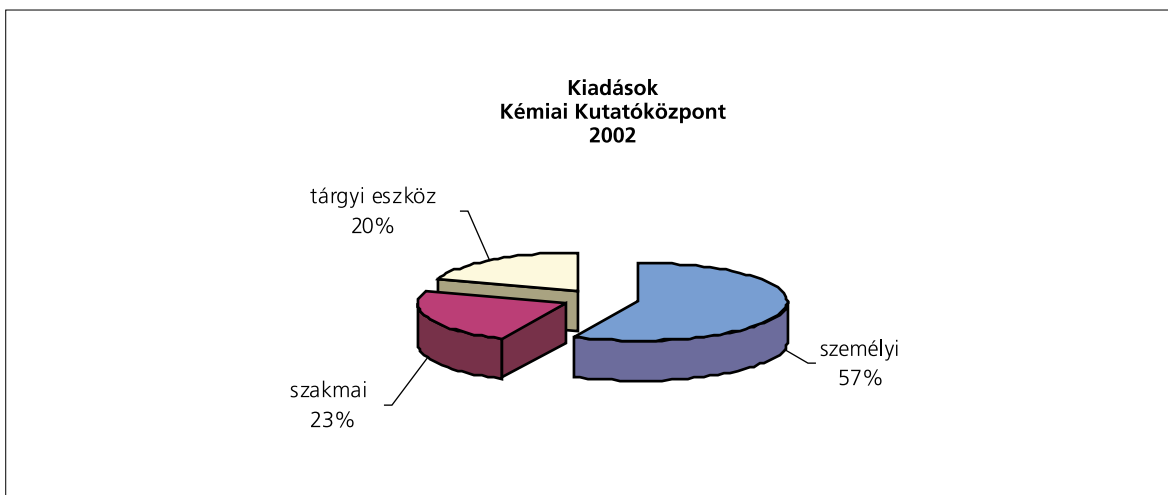
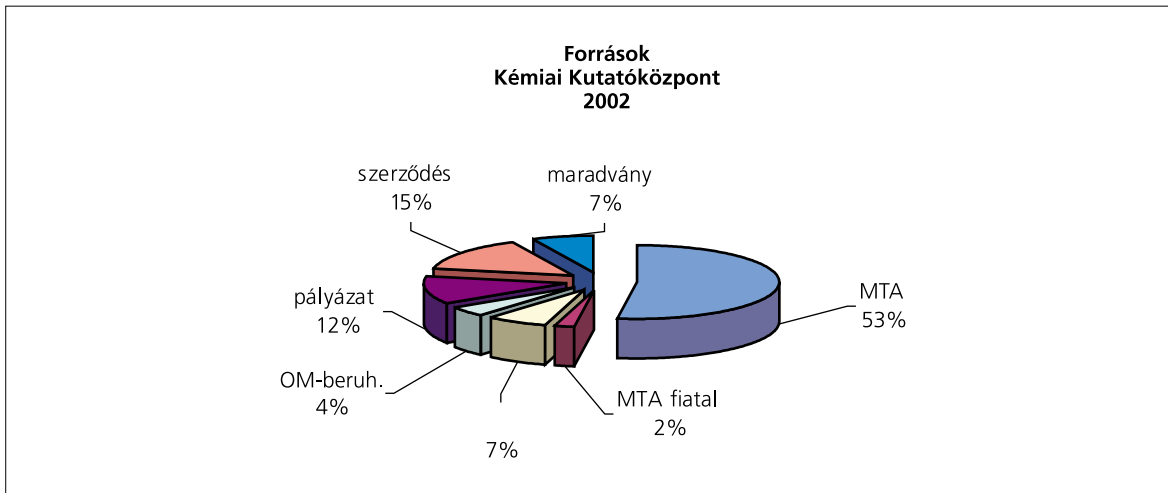
Malik M.A.; **Horányi G.**; Kulesza, P.J.; Inzelt G.; Kertész V.; Schmidt R.; Czirok E.  
Microgravimetric monitoring of transport of cations during redox reactions of indium(III) hexacyanoferrate(III,I)  
radiotracer evidence for the flux of anions in the film  
JOURNAL OF ELECTROANALYTICAL CHEMISTRY, 452: 57-62 (1998)  
8 független idézet

**Dóbe S.**; **Bérces T.**; Turányi T.; **Márta F.**; Grussdorf, J.; Temps. F.; Wagner, H.G.G.  
Direct kinetic studies of the reactions  $\text{Br} + \text{CH}_3\text{OH}$  and  $\text{CH}_2\text{OH} + \text{HBr}$ : the heat of formation of  $\text{CH}_2\text{OH}$   
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY, 100: 19864-19873 (1996)  
7 független idézet

Steren, C.A.; van Willigen, H.; **Biczók L.**; Gupta, N.; Linschitz, H.  
C60 as a photocatalyst of electron-transfer processes: reactions of triplet C60 with chloranil, perylene, and  
tritolylamine studied by flash photolysis and FT-EPR  
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY, 100: 8920-8926 (1996)  
7 független idézet

**GAZDASÁGI ADATOK**

**Források és kiadások 2002-ben**



## I. MELLÉKLET

AuPd kétfémes nanorészecskék SiO<sub>2</sub>-hordozón és TiO<sub>2</sub>-hordozón: szerkezet és katalitikus aktivitás CO-oxidációban

*Beck Andrea, Frey Krisztina, Venezia Anna Maria\*, Liotta Leonarda\*, Guzzi László*

Arany nanorészecskék megfelelő hordozón, mint például változó vegyértékű fém-oxidokon kiemelkedő katalitikus aktivitást mutatnak különböző, elsősorban oxidációs reakciókban, mint például a CO-oxidáció. Ezekben a rendszerekben mind a kis részecskeméretnek, mind az arany-hordozó kölcsönhatásnak meghatározó jelentősége van. Aranyak palládiummal mint egy másik aktív oxidációs katalizátorral való kombinálása lehetőséget adhat aktívabb katalizátor létrehozására. A két fém együttműködését SiO<sub>2</sub>-hordozós AuPd kétfémes részecskék esetén vizsgáltuk, mert ez esetben a hordozó inaktívnak tekinthető. AuPd/TiO<sub>2</sub> rendszer esetén három katalitikusan aktív komponens együttműködését tanulmányoztuk CO-oxidációban.

Egyfémes Au, Pd és különböző összetételű kétfémes AuPd nanorészecskéket állítottunk elő Au(III) és Pd(II) prekursor ionokból vizes oldatban. A SiO<sub>2</sub>-hordozós mintákat etanolos redukcióval állítottuk elő polivinilpirrolidon-stabilizátor és a szuszpendált hordozó jelenlétében. A TiO<sub>2</sub>-hordozós rendszerek esetén szűk méreteloszlású fémszolgat készítettünk Na-citrátos redukcióval cseresav jelenlétében, majd a fémrészecskéket adszorbeáltattuk a hordozón. A transzmissziós elektronmikroszkópiás (TEM) vizsgálatok szerint a fémrészecskék átmérője a 4–9 nm mérettartományba esett. A kétfémes mintákon röntgendiffrakciós (XRD) és EXAFS-mérések is igazolták a kétfémes részecskék jelenlétét. A minták nagy mennyiségű szerves, főképpen stabilizátormaradványokat tartalmaznak, amelyeket 400 °C-on végzett oxidációval távolítottunk el. A minták újraredukálása után TEM, XRD és CO kemiszorpciós eredmények tanúsága szerint a fémrészecskeméret megnőtt. CO-oxidációban a két fém ötvözése SiO<sub>2</sub>-hordozón csökkentette, TiO<sub>2</sub>-hordozón csekély mértékben növelte a katalitikus aktivitást ugyanolyan Au és Pd felületű egyfémes minták együttes aktivitásához képest (ld. 1. táblázat)

1. táblázat Katalitikus aktivitás CO-oxidációban

Minta	T <sub>reakció</sub> °C	Kezdeti reakciósebesség μmolmin <sup>-1</sup> g <sub>cat</sub> <sup>-1</sup>	TOF <sub>XRD</sub> min <sup>-1</sup>	TOF <sub>TEM</sub> min <sup>-1</sup>	TOF <sub>CO</sub> min <sup>-1</sup>
Au/SiO <sub>2</sub>	140	0,0	0	0	–
Pd/SiO <sub>2</sub>	140	9,3	0,59	0,53	0,56
Au/TiO <sub>2</sub>	60	12,1	0,84	1,35	–
Pd/TiO <sub>2</sub>	60	13,7	0,95	1,04	0,73
			A kétfémes mintáéval azonos koncentrációjú felületi Au- és Pd-atomot tartalmazó egyfémes mintakeverék számított kezdeti reakciósebessége, μmolmin <sup>-1</sup> g <sub>cat</sub> <sup>-1</sup>		
			r <sub>0,XRD</sub>	r <sub>0,TEM</sub>	r <sub>0,CO</sub>
AuPd/SiO <sub>2</sub>	140	3,6	8,6	6,0	5,6
AuPd/TiO <sub>2</sub>	60	22,9	13,6	15,2	22,1

\*Istituto di Chimica e Tecnologia dei Prodotti Naturali (ICTPN-CNR)

## Nanoszerkezetű amfil polimer kotérhálók

*Iván Béla, Domján Attila, Erdődi Gábor, Haraszi Márton, Szabó Sándor, Jonas Scherble\*, Ralf Thomann\*, Rolf Mülhaupt\*, Manfred Wilhelm\*\*, Hans W. Spiess\*\**

Az amfil kotérhálók olyan új típusú térhálós polimerek, amelyekben hidofil és hidrofób polimer láncok kovalens kötésekkel kapcsolódnak össze. Az egyébként egymással nem elegyedő komponensek az amfil kotérhálókban is külön fázisokban helyezkednek el, azonban jellegében egy teljesen új típusú anyag jön létre nanoméretű fázisseparatoráció következtében. Az amfi-

fil kotérhálók makroszkopikus tulajdonságait tekintve sem nevezhetők hétköznapi anyagoknak, ugyanis mind hidrophil, mind hidrofób oldószerekben egyaránt duzzadnak. Akár egyszerre is duzzaszthatók ilyen oldószerekben, különös módon „elegyítve” ezáltal egymással összeférhetetlen oldószereket.

Az amfifil kotérhálók előállításának legáltalánosabban alkalmazott módja az úgynevezett makromonomer módszer, amelyben egy telekelikus polimert (makromonomert) gyökös polimerizációval kopolimerizálunk egy választott ellentétes filicitású polimer monomérével. Számos esetben azonban problémát okoz, hogy nem található olyan közös oldószer, amelyben az amfifil kotérhálókat alkotó komponensek mindegyike oldható lenne. Ezt védőcsoportok alkalmazásával lehet kiküszöbölni, amelyre példákat mutatunk be.

Az amfifil kotérhálóban a komponensek szerkezeti elrendeződését széles összetétel-tartományban különféle módszerekkel tanulmányoztuk az utóbbi időben. Ezek között kitüntetett helyet foglal el a transzmissziós elektronmikroszkópia (TEM) és az atomerő

mikroszkópia (AFM), melyek segítségével elsőként a világon feltérképeztük ezen anyagok összetétel-függő morfológiáját. Megállapíthattuk, hogy az egymástól elkülönülő polimer fázisok átlagos mérete rendkívül kicsi, a 3–20 nm tartományba esik, és egy különleges, úgynevezett kofolytonos nanofázisokból álló szerkezet alakul ki széles összetétel-tartományban a legtöbb különböző anyagi összetételű amfifil kotérháló esetében. Kis szögű röntgenszórási (SAXS) és kis szögű neutronszórási (SANS) kísérletek, valamint spin diffúziós szilárdtest NMR-spektroszkópiai mérések rávilágítottak arra, hogy a látszólag rendezetlen szerkezetű morfológiákban megjelennek az alapvető, blokk-kopolimerekben pontosan leírt szimmetriák, azonban csak igen kis méretekben és erősen torzultan. A hagyományos térhálós polimer rendszerekhez hasonlóan az amfifil kotérhálók duzzadási és diffúziós folyamatai szintén rendkívül fontosak. Különböző oldószerekben történő duzzadásuknak, illetve néhány kismolekulájú anyag transzportfolyamatainak vizsgálatait is

elvégeztük, melyekből levont következtetések nélkülözhetetlenek a távolabbi jövőben várható, elsősorban gyógyászati és nanotechnológiai alkalmazások szempontjából.

\*University of Freiburg , Material Research Center and Institute of Macromolecular Chemistry, Freiburg, Germany

\*\*Max Planck Institute for Polymer Science, Mainz, Germany



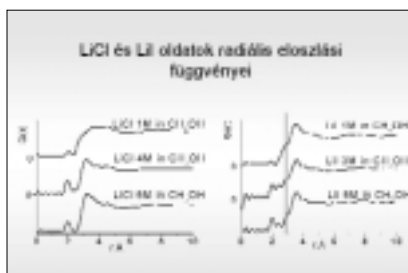
## Lítium- és kalciumionok vizes és alkoholos oldatainak szerkezetvizsgálata

### *Megyes Tünde, Grósz Tamás, Radnai Tamás, Pálinkás Gábor*

Az oldatok szerkezetvizsgálata már több évtizede folyik, azonban a mai napig kisszámú szerkezetet ismerünk elég részletesen, különösen a nem vizes oldatok területe felderítetlen. A szerkezetkutatások már korábban is elég sok információt feltártak mind a lítium-, mind a kalciumion oldatszerkezetéről, azonban a kutatások eredményei az ionoldószer-távolságokban és a koordinációs számokban egyaránt jelentős szórást mutatnak. Az egyszeres pozitív töltésű, de a  $Mg^{2+}$ ,  $Ni^{2+}$ ,  $Fe^{2+}$  ionokkal összevethető méretű  $Li^+$  ion különleges solvatációs képességei miatt a szerkezetkutatás kedvelt témája. A kation-oldószer elsőszomszéd távolság a lítiumion és a felsorolt ionok esetében közel azonos. Elsősorban a lítiumion kisebb töltése következtében azonban a solvatburok szerkezete jelentős eltérést mutat. A kalciumion élettani fontossága miatt az oldatokban lezajló biokémiai folyamatok nagy érdeklődésre számot tartó tárgya, valamint a víz keménységének fő okozója. A korábbi munkák izgalmas, a kétértékű kationok között egyedülálló megállapításokhoz vezettek (8 és 9-es koordinációs szám lehetősége egyedi szimmetriatulajdonságokkal, szelektív ionpároképzési és komplexképzési mechanizmus); egyes vizsgálatok (pl. tömény oldatokban) ugyanakkor nagyon hiányosak.

$LiCl$  és  $LiI$  különböző koncentrációjú metanolos oldatainak szerkezetvizsgálatát végeztük el (röntgendiffrakció, tömegspektrometria). Az egyes oldatok szerkezetét a röntgendiffrakciós vizsgálatból kapott párkorrelációs függvények elemzéséből nyert szerkezeti paraméterek és az oldatok sztöchiometriája alapján modelleztük. 1 M oldatban a lítiumion solvatburoka hat metanolmolekulából áll, a kloridiont hat, míg a jodidiont nyolc metanolmolekula veszi körül. A koncentráció növekedése a kation és a különböző anionok esetében egyaránt a koordinációs számok csökkenését eredményezi. Az ion-oldószer távolságok nem függenek a koncentráció változásától. Tömény oldatok szerkezetét oldott ionpárokkal és oldószerszeparált ionpárokkal, oldott sókiaszterekkel modelleztük.

A kalcium-kloridnak mind a vizes, mind a metanolos oldatát tanulmányoztuk széles koncentrációtartományban (1M-telítési koncentrációig). A röntgendiffrakciós mérésekből kapott szerkezeti függvény illesztésekor nyert paraméterek alapján a kalciumion első szférája maximum nyolc, második hidrátszférája 14 vízmolekulából áll. Metanolos oldatban a kalciumion solvatburoka oktaéderez szerkezetű, a második szféra 11 metanolmolekulát tartalmaz. A kloridion koordinációs száma mindkét oldószer esetében hat. Töményebb oldatokban  $Ca-Cl$  kontakcionpárokat és oldószerszeparált ionpárokat azonosítottunk.



## Mikrohullámú feltárodények felületi degradációjának FTIR és FT-Raman spektroszkópiai vizsgálata

*Mihály Judith, Silvana Sterkel\*, Hugo Ortner\*, Kocsis László, Hajba László\*\*, Mink János*

A nagynyomású feltárodények általában fluortartalmú polimerekből és nagy tisztaságú kvarcból készülnek. Ezeket az edényeket akár több száz feltárással is alkalmazzák, aminek következtében a belső falakon gyakran szabad szemmel is látható roncsolódás keletkezik. Ugyanakkor jól ismert tény, hogy mind a felületen történő adszorpció, mind pedig az anyag oldatba történő beolvadása jelentősen megnövekedésével. Ez különösen a ng/g vagy annál alacsonyabb kimutatási határok esetében kritikus, ahol az anyag és a feltárodény fala közötti kölcsönhatások korlátozhatják a mérések teljesítményét.

Politetrafluor-etilén alapú (TFE) mikrohullámú feltárodények felületi korrózióját követték nyomon reflexiós FTIR és FT-Raman technikákkal. Az edényekkel növekvő számú feltárást végeztünk (Multiwave rendszerben tejpont nyomás alatt salétromsavval tártunk fel). A mintákat 0 (új), 50, 100 és 200 feltárási ciklus után vizsgáltuk. A színek közötti kis különbségek azonosítására a használt edények spektrumaiból kivontuk az új edények színeit. Megadtuk a TFE alapú minták IR- és Raman-sávjainak részletes hozzárendelését. A használt TFE edények ATR FTIR különbségszíneket a polimer felületi degradációját igazolják. A felületen karbonátok keletkezését, szerves nitrátok lerakódását és  $\text{FNO}_3$  vegyület keletkezését azonosítottuk. A Raman-spektrumok kiértékelésével igazoltuk a polimerlánc felszakadását, erre utalnak a keletkező  $-\text{CF}_3$  végcsoportok sávjai.

Az FT-Raman spektroszkópiai módszert kvarc feltárodények esetében szintén sikerrel alkalmaztuk. A feltárással növekvő felület újrakristályosodását már jóval korábbi stádiumban tudtuk detektálni, mint arra a pásztázó elektronmikroszkóppal észlelt morfológiai változásokból következtetni lehetett. A rezgési spektroszkópiai mérésekkel kiegészített pásztázó elektronmikroszkópos felületi morfológiai vizsgálatok megfelelő módszernek bizonyultak a roncsolódott kvarcfelületek tanulmányozására.



\*Institute of Material Science, Darmstadt University of Technology

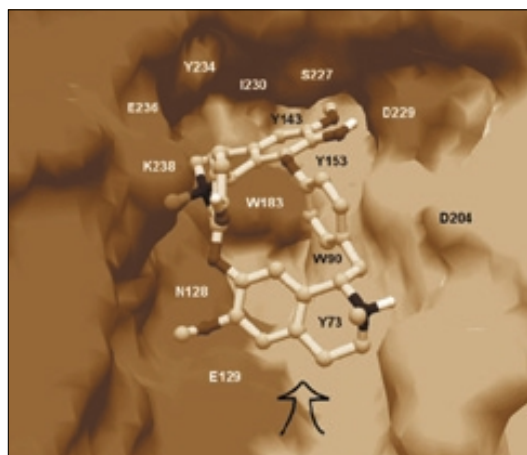
\*\*Veszprémi Egyetem, Analitikai Kémiai Tanszék és MTA Analitikai Kémiai Kutatócsoport

## Antagonisták kötődésének elméleti vizsgálata 5-HT<sub>3</sub>A-receptor modellen

*Bikádi Zsolt, Maksay Gábor, Simonyi Miklós*

Az 5-HT<sub>3</sub> típusú szerotoninreceptor a transzmitterek által szabályozott ioncsatornák családjába tartozik, hasonlóan a nikotinos-acetilcolin-, a GABA<sub>A</sub>-, GABA<sub>C</sub>- és glicinreceptorokhoz. Ezek közös szerkezeti tulajdonsága, hogy a fehérjealagságok pentamer struktúrát alakítanak ki. Az 5-HT<sub>3</sub> aktiválása  $\text{Na}^+$  és  $\text{Ca}^{2+}$  beáramlásához és a membrán depolarizációjához vezet. Antagonistái a kemoterápia és a sugárterápia okozta hányinger és hányás megelőzésében és kezelésében a leghatékonyabb vegyületek közé tartoznak. Egy acetilkolin-kötő fehérje kristályszerkezetének meghatározásával lehetővé vált az azzal mintegy 20 százalékos homológiát mutató ioncsatornák szerkezetének elméleti úton történő meghatározása, ami áttörést jelenthet ezen receptorok működésének megismerésében.

Homológiamodellezés segítségével elkészítettük az 5-HT<sub>3</sub>-receptor N-terminális, extracelluláris szakaszának modelljét. A receptor antagonistáinak (granisetron, tropisetron, ondansetron, dolasetron) automatizált dokkolása szerint a kötőhely két alegység határán található, ahol aromás aminosavak (W183, Y143, Y153, Y234) hidrofób zsebet alakítanak ki, míg ennek környezetében negatívan töltött oldalláncok (E236, E129) az antagonisták kvaterner nitrogénjeinek megkötésében játszhatnak szerepet. A setronok karbonilcsoportja az S227-tel alakíthat ki hidrogénkötést. Eredményeink összhangban vannak az 5-HT<sub>3</sub>R-antagonisták elfogadott farmakofor modelljeivel, és lehetővé teszik azok molekuláris szintű értelmezését, valamint új, hatásos antagonisták tervezését.

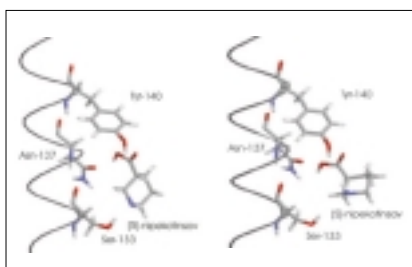


## Újonnan szintetizált szekoergolinszármazékok $\gamma$ -amino-vajsav és glutaminsav transzportgátló hatása\*

**Héja László, Kovács Ilona, Szárics Éva, Incze Mária, Temesváriné-Major Eszter, Dörnyei Gábor, Peredy-Kajtár Mária, Gács-Baitz Eszter, Szántay Csaba, Kardos Julianna**

Az epilepszia világszerte a népesség mintegy 1–2%-át érinti. Kezelése történhet mind a  $\gamma$ -amino-vajsav (GABA) által közvetített szinaptikus gátlás erősítése, mind a glutaminsav okozta szinaptikus serkentés csökkentése révén. Az epilepszia GABA hipotézisének értelmében a szinaptikus gátlás erősítése – melynek egyik lehetséges módja az extracelluláris GABA-koncentráció tartós növelése – lehetőséget nyújthat az epileptikus rohamok megelőzésére.

Célul tűztük ki 12 újonnan szintetizált szekoergolinszármazék [ $^3\text{H}$ ]GABA-transzportra gyakorolt hatásának vizsgálatát patkány-agyból izolált plazmamembrán vezikulákban. Megvizsgáltuk a vegyületek [ $^3\text{H}$ ]D-aszpartát transzportgátló tulajdonságát. A leg-hatékonyabb szekoergolinszármazék a maximális gátló hatás 50%-át 0,3 mM-os koncentrációban fejtette ki mindkét tesztrendszerben.



A szerkezet–hatás összefüggés értelmezésének céljából számítógépes modellezési vizsgálatokat végeztünk. A GABA-transzporter háromdimenziós szerkezetének hiányában egy egyszerűsített modellt állítottunk fel, melyet sikeresen teszteltünk különböző standard GABA-transzport-inhibitorok segítségével. A modell képes volt különbséget tenni egy ismert inhibitor funkcionálisan aktív és inaktív enantiomerje között (lásd az ábrát). A modellt továbbfejlesztve kísérletet tettünk a GABA-transzporter és a vele homológ szerotonin-, dopamin-, norepinephrintranszporterek transzmembrán régiói topológiájának meghatározására.

\*A munka az 1/047 NKFP MediChem és a QLK2-CT-2002-90436 Center of Excellence on Biomolecular Chemistry támogatásával készült.

## Polipropilén (PP)/rétegszilikát nanokompozitban

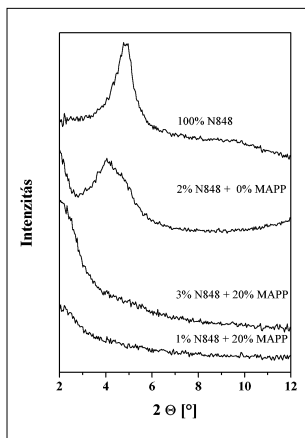
**Pukánszky Béla ifj., Százdai László Tamás, Pukánszky Béla**

A rétegszilikát nanokompozitok polimer mátrixban egyenletesen diszpergált elemi szilikátlemezekből (1 nm vastag, 100–300 nm átmérőjű) állnak. A kompozitokat felületkezelt montmorillonitlemezek feldolgozás közbeni delaminációjával, szétnyírásával állítják elő. A hagyományos töltőanyagokkal szemben a nanokompozitokban jelentős erősítő hatást várnak már kis töltőanyag-tartalomnál is. A nagyobb merevség mellett nő a hőalakítottság, lángállóság, valamint gázzáró képesség is. A legtöbb rétegszilikát polimer kompozitban azonban a szilárdság javulása gyakran elmarad a várakozásoktól; különösen vonatkozik ez a polipropilén nanokompozitokra, melyek tulajdonságai rendkívül gyengék.

Ezekben a kompozitokban a felületkezelt szilikát és a polimer mátrix közötti adhéziót funkcionalizált polimer vagy oligomer hozzáadásával módosítják. Az elképzelések szerint a maleinsav-anhidriddel ojtott oligomer (MAPP) poláris csoportjaival a rétegszilikát (MMT) felületéhez kapcsolódik, míg a PP-lánc interdiffúzióval kötődik a mátrix polimerhez. MMT/MAPP/PP rendszerekkel viszonylag sokan foglalkoznak az irodalomban, de még mindig nem tisztázott az MAPP pontos szerepe, hatásának mechanizmusa.

A maleinsav-anhidrid csoport nem tud kölcsönhatásba lépni a szilikát felületével, mivel a töltőanyag felülete már szerves kationokkal fedett. Másrészt, ha a módosított polimer mégis képes megkötődni a szilikát felületén, felmerül a kérdés, hogy mi történik a felületkezelő szerrel.

Munkánk célja az volt, hogy meghatározzuk a funkcionalizált PP hatásmechanizmusát, a módosított polimer és a töltőanyag közötti kölcsönhatás módját, erősségét. A munka során korábban megkezdett modellkísérleteinket folytattuk különböző kompatibilizálószerrel, illetve felületkezelt rétegszilikátokkal. Az eddig alkalmazott vizsgálati módszerek (DSC, FTIR) mellett röntgendiffrakcióval (WAXS) vizsgáltuk a kompozitok szerkezetét és szakító vizsgálattal a mechanikai tulajdonságokat. A WAXS-mérések szerint MAPP alkalmazásával nagyobb mértékű delaminációt érünk el (lásd az ábrát), de a mechanikai tulajdonságok javulása elmaradt a várakozásoktól.



MAPP hatása a kompozitszerkezetre



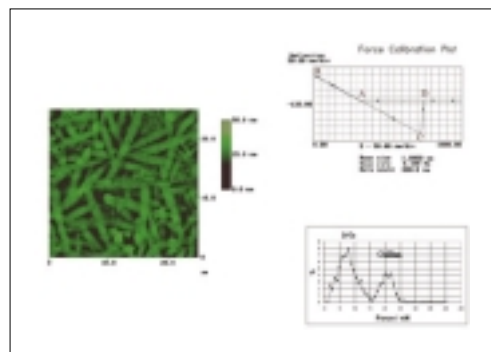
## Felületenergia-meghatározás: lokális és makroszkopikus megközelítés

*Tolnai Gyula, Keresztes Zsófia, Lucz Péter, Nagy Péter, Kálmán Erika*

Szilárd felületek energetikai szempontból történő jellemzésére az elmúlt évtizedben kifejlesztett pásztázószondás mikroszkópia alkalmazása révén új lehetőségek nyíltak: lehetővé vált a vizsgálatok nanométertartományban (lokálisan) történő megvalósítása. A mérőszonda felületének definiált módosításán keresztül pedig további új lehetőségek nyílnak specifikus, pl. hidrofób felületi kölcsönhatások nagyfelbontású és nagy pontosságú detektálására. Ennek révén lehetővé válik az anyagi jellemzők nanométertartományban történő meghatározása, amely a nanoszerkezetű anyagok fejlesztése és alkalmazása során kiemelt jelentőséggel bír.

Munkánk során célul tűztük ki az atomerő mikroszkópia módszerén alapuló lokális felületenergia-meghatározás metodikájának kidolgozását és hidrofób modellfelületeken végzett kísérletek során a makroszkopikus vizsgálati eredményekkel történő összehasonlítását. Ennek érdekében különböző felületi energiájú atomerő mikroszkóp szondákat állítottunk elő tiolgyületek monomolekuláris rétegeinek kialakításával. A modellként szolgáló különböző felületi energiájú, szilanizált üvegfelületeket nedvesedési vizsgálatokkal jellemeztük. Adhéziós felületi erőterképek detektálása révén vizsgáltuk a módosított szondák és a modellfelületek közötti kölcsönhatási energiát különböző szolvatációs képességű folyadékok közegében, majd ezt követően termodinamikai modellek felhasználásával meghatároztuk a szilárd fázisok lokális felületi energiáját.

A lokális és a makroszkopikus vizsgálatokból adódó felületenergia-értékek összehasonlító elemzése során meghatároztuk a mérési módszer alkalmazhatóságának korlátait.



## II. MELLÉKLET

### Genuine model of neuronal signalling reveals statedependent response dynamics

*Zsuzsa Emri<sup>1</sup>, Károly Antal<sup>1</sup>, Vincenzo Crunelli<sup>2</sup>*

<sup>1</sup> *Department of Neurochemistry, Institute of Chemistry, Chemical Research Center*

<sup>2</sup> *School of Biosciences, Cardiff University, Cardiff, UK*

As based on experimental data, genuine models are used to analyse and plan measurements as well as to make predictions. Taking the example of thalamocortical signalling we have constructed a detailed model of thalamocortical neurones, which incorporated their morphology, voltage- and ligand-gated currents.

Thalamocortical neurones have dual function. They relay sensory information towards the cerebral cortex during wakefulness and are involved in brain oscillatory activities during sleep. The most common thalamic dysfunction is the absence epilepsy characterised by synchronised oscillatory activities that interrupt the state of wakefulness. The transition from wakefulness to sleep or absence epilepsy is helped and prevented by neuronal hyperpolarisation and depolarisation, respectively. Thalamocortical neurones are hyperpolarised by inhibitory ligand-gated currents arriving from the neurones of another thalamic nucleus, the nucleus reticularis thalami (NRT). Inputs from sensory organs and from the cerebral cortex activate excitatory ligand-gated currents. In addition, the ligand-gated currents of cortical and NRT inputs consist of two components: a large and rapid ionic and a small and slow metabotropic component, while the sensory inputs has only ionic components. Since each neurone possesses 3000 to 5000 synapses allowing a huge number of possible combination of activated ligand- and voltage-gated currents, the planning and interpretations of experiments are difficult, in particular, when the function of the small, excitatory metabotropic glutamate-receptor gated components is to be addressed.

We used our model to study how the metabotropic component of the cortical input affects the flow of sensory inputs toward the cerebral cortex or how they are able to perturb the oscillatory activity. We found that a minute metabotropic component of the cortical input can effectively suppress action potential generation when the neurone is hyperpolarised but has little effect when the neurone is depolarised. The cortical metabotropic input also enhanced the perturbatory effect of inputs arriving to an oscillating cell. These results indicate a significant role for the metabotropic cortical inputs in the suppression of burst activity and the desynchronisation of thalamic oscillation and suggest the use of selective metabotropic agonists in the treatment of absence epilepsy.

## Special cases of polymorphism and isostructurality controlled by antidromic hydrogen bond rings

László Fábrián, A. Kálmán, Gy. Argay, G. Bernáth, Zs. Cs. Gyarmati

Crystal Diffraction Laboratory, Institute of Chemistry, Chemical Research Center

In the crystal structures of 2-hydroxy-cycloalkancarboxylic acids and carboxamides, hydrogen bonded homo- or heterochiral chains are assembled in antiparallel or parallel mode. The parallel assembly of the chains leads to the formation of 18-membered antidromic hydrogen-bond containing rings. Antidromic rings generate significant dipole, which can be compensated by appropriate layer stacking. In (1*R*\*,2*S*\*,5*R*\*)-5-*tert*-butyl-2-hydroxycyclopentanecarboxylic acid (**1**), subsequent layers are rotated through 180° around an axis perpendicular to the layers.

The polymorphism of *trans*-2-hydroxycycloheptancarboxylic acid (**2**) [5] and the structure of the analogous carboxamide (**3**) reveal two further forms of dipole compensation. **2**, depending on the solvent, crystallizes in two forms with virtually the same unit cell parameters. In both forms, the subsequent layers are rotated around an axis that is parallel to the plane of the layer. In form II, the rotation axis is perpendicular to the overall dipole generated in the antidromic rings, whereas the dipole vector and the rotation axis are parallel in form I. Thus, the dipoles in form I are compensated by the antiparallel stacking of crystal domains. The two forms are assembled from identical layers with different stacking sequences. This means, that half of the unit cells of form I and II are identical, while the other halves are related to each other by a rotation ( $\uparrow\uparrow\uparrow$  vs.  $\uparrow\downarrow\downarrow$ ).

A similar relationship exists between **3** and *trans*-2-hydroxycyclopentane carboxamide (**4**). The layer stacking of **3** is antiparallel, while the translation-related layers of **4** are parallel. The layers of **3** and **4** are isostructural, and every second layer in their respective stacking sequences has the same orientation. The structure of **4** suggests that the dipoles of antidromic rings may be compensated by the presence of other hydrogen bonds.

## New possibilities for the synthesis of well-defined polyisobutylenes by quasiling carbocationic polymerization

Werner Péter Groh<sup>1</sup>, Béla Iván<sup>1</sup>, Márta Szesztay<sup>1</sup>, Feike de Jong<sup>2</sup> and Teun Graafland<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Department of Polymer Chemistry and Material Science, Research Laboratory of Materials and Environmental Chemistry, Chemical Research Center

<sup>2</sup>Shell Internatinal Chemicals B.V., Amsterdam, The Netherlands

In recent years, significant developments have occurred in the field of polymers with well-defined molecular weights and architectures. Due to its remarkable chemical and physical properties, polyisobutylene (PIB) is an important chain segment in such polymer structures. PIBs with exact microstructure can be prepared by quasiling carbocationic polymerization (QLCCP) of isobutylene in the presence of nucleophilic additives. The synthetic applications of this polymerization technique have been intensively studied, but the mechanism of the polymerization process is still not clear in details.

In our studies, QLCCP of isobutylene induced by 2-chloro-2,4,4-trimethylpentane/TiCl<sub>4</sub> initiating system was investigated in the presence of chelating compounds, as a new class of nucleophilic additives in these polymerizations. According to our results, the different nucleophilic additives influenced the polydispersity and the structure of the resulting polymers differently. The molecular weight distribution (MWD) of the polyisobutylene prepared in the presence N,N,N'-tetramethylethylenediamine (TMEDA) is extremely narrow, its polydispersity is lower than the expected theoretical values. Our observations indicate that certain chelate complexes (e. g. Lewis-acid-TMEDA) effect the living-nonliving equilibrium and/or the reactivity of the carbocationic propagating chain ends by a specific way which is not explained by currently existing mechanistic considerations.

The QLCCP of isobutylene shows strong solvent effect. On the basis of this phenomenon, for the first time according to our knowledge, we have carried out carbocationic polymerization experiments in benzotrifluoride, an environmentally benign solvent, at elevated temperatures (-20...0 °C). The monomer conversions reached completion within short times. The molecular weights were close to the target values in conjunction with unimodal, narrow MWD. We have found that the widely used dichloromethane or its mixtures with n-hexane can be successfully replaced by less toxic benzotrifluoride in the QLCCP of isobutylene.

## Role of protein E3B1 and nitric oxide in cell adhesion and migration

**Veronika Jenei<sup>1,2</sup>, K. Dib2, G. Scita<sup>3</sup>, Judit Jakus<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> *Bio-oxidation Group, Institute of Chemistry, Chemical Research Center*

<sup>2</sup> *Division of Experimental Pathology, Lund University, University Hospital, Malmö*

<sup>3</sup> *Division of Experimental Oncology, European Institute of Oncology, Milan, Italy*

Several signal transduction pathways are involved in the regulation of cell attachment and migration, such as integrin and epidermal growth factor receptor (EGFR) signaling. Free radicals have also been shown to act as second messengers in these pathways. In our study, we focus on the role of nitric oxide and the function of protein E3B1 in EGFR signalling.

As a model we used a NIH3T3 fibroblast clone overexpressing EGF-receptor and protein E3B1. This protein forms a complex with eps8, Sos-1 and PI3K and thus participates in the EGF-induced signal transduction. In previous studies it was shown that overexpression of E3B1 inhibits cell growth and it has a possible effect on actin remodelling. In our study we examined the effect of E3B1 on cell adhesion to different extracellular matrices, on cell-cell adhesion and cell migration using cell adhesion and wound healing assays. We found that protein E3B1 inhibits cell-cell association and cell-matrix adhesion on fibronectin-, vitronectin- and laminin-coated surfaces, as well as cell migration. Furthermore, we investigated the activity of different small G-proteins using GST pull down-assays and showed that E3B1 affects EGF-induced Rac, as well as Rap activation. Since E3B1 is phosphorylated in the G1 phase of the cell cycle, we determined the level of endogenous \*NO during this period by EPR spectroscopy. In conclusion, our results suggest that, E3B1 affects cell adhesion, migration and also \*NO production, however, the determination of the exact role of \*NO in regulation of cell adhesion needs to be further addressed.

## Characterization of nanostructured materials by surface energy mapping

**Gy. Tolnai, Zs. Keresztes, P. Lucz, P. Nagy and E. Kálmán**

*Department of Surface Modification and Nanostructures, Institute of Chemistry, Chemical Research Center*

Material properties mapped in nanoscale has a huge importance in the development, characterization and application of nanostructured materials. Lately new approaches of surface characterization became feasible due to the development of scanning probe microscopes. These nanometer scale experiments offer new possibilities for the different aspects of local surface investigations. Surface modifications of the probes made the detection of specific and non-specific, e.g. the hydrophobic interaction possible with great resolution and accuracy.

Our aim was to develop a methodology based on atomic force microscopy based the detection of local surface energies and evaluate this method by comparison with macroscopic experiments carried out on model surfaces. Hydrophobic probes were fabricated by chemisorption and monolayer formation of methyl-terminated long-chain alkyl-thiols on metallized atomic force microscope probes. A series of silanized glass surfaces were used as model surfaces with defined hydrophobicity and were characterized by contact angle measurements.

Detection of adhesion maps between such hydrophobic modified probes and model surfaces in the environment of different solvents gave information about the energy of interactions, and the local surface energies of solid phases could be calculated according to thermodynamic models. Based on the evaluation of local and macroscopic surface energy values the application constrains of the developed nanoscale surface energy mapping has been also determined.

## Thermal analysis of biomass materials

**Erika Mészáros, Emma Jakab, Gábor Várhegyi**

*Thermolysis Group, Research Laboratory of Materials and Environmental Chemistry, Chemical Research Center*

Owing to environmental and economic reasons, the importance of renewable energy and raw material sources is gradually increasing. Biomass materials play a significant role among these resources. The application of materials of plant origin results in the reduced carbon dioxide production, which helps to achieve the aims of the Kyoto Protocol, namely the reduction in the emis-

sion of the gases responsible for the greenhouse effect. Besides the aforementioned treaty, several others have dealt with the problem of the increasing amount of carbon dioxide in the atmosphere. The European Union has also put great emphasis on the solution of the problems arising as a result of the use of fossil materials. In The Renewable Energy White Paper it is suggested that the amount of renewable energy sources should be doubled by 2010 to 12% from a total consumption of 6% in 1996.

Although extensive research has been carried out in the field of biomass materials, several characteristics of plants are not well understood due to the chemical and structural diversity of biomass and the complexity of the products. These facts justify the need for a thorough and in-depth study of plant materials.

The Thermolysis Group of the Chemical Research Center has already studied the thermal behavior of lignocellulosic biomass materials as parts of co-operations in several areas:

- possibilities for the environmental-friendly utilization of various wastes and by-products;
- basic research to develop new, high-yield charcoal production methods;
- basic research for the production of new sorts of activated carbons and other high value special carbons;
- studies for the energetic utilization of biomass materials.

In this presentation studies concerning the utilization of plant materials by combustion will be shown in detail. Poplar species, acacia, willow and *Miscanthus Sinensis* improved for energy production, cultivated in a short rotation forestry system have been studied. In case of direct combustion the first step is the formation of volatiles from the fuelwood, which is followed by the burning of the volatiles. At the last stage the previously formed char burns off. The formation of volatiles and the burn-off of the carbonaceous residue have been studied by thermogravimetry and thermogravimetry / mass spectrometry in inert and oxidative atmospheres.

In addition to the basic thermal characteristics of the samples, several other factors, which may have an influence on the thermal degradation properties, have been investigated. Thus, the effects of age, inorganic constituents and extractive components have been studied. The composition of the young shoots harvested in energy plantations differ from that of the traditional fuelwood: among others, the younger shoots contain higher amounts of bark than the older trees. As a consequence, a detailed analysis of the inner part and the bark has been carried out. The chemical composition of the ethanol extractives has been determined with gas chromatography / mass spectrometry. The results of the experiments have proven to be useful in the understanding of the thermal behavior of these types of fuels.

Kinetic analysis has been performed for the deconvolution of the complex DTG curves of the biomass samples. For these studies various temperature programs, composed of non-isothermal and isothermal sections, have been employed to gain information in a wide range of experimental conditions. Series of thermogravimetric experiments have been evaluated simultaneously by the method of least squares to establish complex models. In this way reliable information has been obtained on the thermal behavior of cellulose, hemicellulose and lignin in the biomass samples.

## **New approaches in clinical chemistry: Application of mass spectrometry**

***Kornél Nagy, Mária Bihari, Károly Vékey***

***Department of Mass Spectrometry, Institute of Chemistry, Chemical Research Center***

The introduction of soft and atmospheric pressure mass spectrometric methods opened a new horizon for qualitative and quantitative analysis of clinically important diagnostic compounds, such as small molecular weight amino acids, acyl-carnitines or even very high molecular mass biopolymers such as tumor marker glycoproteins. Thus, with the help of mass spectrometry early medical intervention, consequently avoidance of death, mental and physical retardation is possible. The relationship between the clinical diagnosis and the mass spectrometric results relies on the fact, that in the case of many illnesses (most metabolic disorders, cancer) the composition of body fluids reflects the clinical condition of the patients.

Applying mass spectrometry the sample requirements are very small. Amino acid and acyl-carnitine profiles can be obtained from the same 5  $\mu$ l blood, besides the analysis times can be reduced down to 2 minutes. Such capabilities make mass spectrometry suitable for the screening of a whole population. The scale of routinely measured compounds ranges from amino acids, acyl-carnitines, through bile acids, nucleosides, fatty acids to aldehydes. Nevertheless, further research and developments are in progress to extend the list of screenable illnesses and to merge the existing methods in order to decrease cost and enhance performance. Also the characterization of high molecular weight components of blood receives more and more attention mainly through the analysis of tumor marker glycoproteins to find relationship between the micro heterogeneities of these molecules and the status of the malignant diseases.

## Alteration of the interaction in PP/montmorillonite nanocomposites

**Béla Pukánszky**

*Department of Applied Polymer Chemistry and Physics, Research Laboratory of Materials and Environmental Chemistry, Chemical Research Center*

Recently the interest in nanocomposites increased enormously both in industry and academia. This new class of materials can be prepared by various routes resulting in composites with different structures. Layered silicate nanocomposites contain exfoliated clay particles. They can be prepared by intercalation and in-situ polymerization of a monomer in the galleries of the nanoclay or by the exfoliation of the layers during processing. This new class of composites claimed to have numerous advantages. The homogeneously dispersed thin clay layers increase stiffness and strength considerably already at very low filler contents. Contrary to traditional particulate filled composites, in nanocomposites efficient reinforcement can be achieved already at 3-5 wt% filler content. Further advantages of these materials are their low flammability, increased dimensional stability and HDT as well as decreased permeability. However, in spite of their potentials technical problems and relatively high price hinder the extensive application of these materials, further research is needed before a real breakthrough is achieved.

A major problem of nanocomposites prepared by exfoliation during processing is that their stiffness, but especially strength remains much below the expected value. The silicate must be surface treated, organophilized in order to increase the distance between its galleries and facilitate exfoliation. However, treatment leads to decreased surface tension and low interaction with the matrix. Since organophilization is a precondition for successful exfoliation and thus the preparation of nanocomposites, the problem is very difficult to circumvent.

Recently several attempts were made to improve adhesion between the organophilized silicate (OMMT) and the polymer matrix by the introduction of modified polymers both in polypropylene and polyethylene. The maleinated polymer (MAPP) is claimed to adhere to the surface of the silicate layer and improve intercalation through interdiffusion, the formation of entanglements. However, this explanation raises several questions. The maleic anhydride group cannot possibly react with the surface of the filler chemically. Moreover, the surface is covered already by the organic cation, usually a quaternary ammonium ion. Surface coverage is high, sometimes more amine is added to the filler than its theoretical ion exchange capacity. On the other hand, if the maleinated polymer adheres to the surface of the filler, it is a question what happens with the surfactant used for the treatment earlier. According to our knowledge these questions had not been investigated in detail or answered satisfactorily until now.

The goal of our study was to find an acceptable answer to the questions raised in the previous paragraph. Model reactions were carried out with maleinated polypropylene (MAPP) and various compounds used for the organophilization of layered silicates (long chain aliphatic amines, cetylpyridinium chloride). The reaction was followed by FTIR spectroscopy and DSC measurements. Organophilic montmorillonite was homogenized with the functionalized polymer and the interaction of the components was determined by the same techniques. Finally PP/OMMT/MAPP composites were prepared and their structure as well as properties determined as a function of composition. The results indicate that maleinated PP and the amine react with each other with the formation of imides. The effect of MAPP depends on its functionality and composition. The study continues in order to determine the mechanism of interaction between the modified polymer and the filler as well.

## Theoretical studies on the mechanism of metal-assisted CO<sub>2</sub>-olefin coupling reactions

**Gábor Schubert and Imre Pápai**

*Department of Theoretical Chemistry, Institute of Chemistry, Chemical Research Center*

Catalytic C-C coupling reactions between carbon dioxide and unsaturated hydrocarbons have been of considerable interest to synthetic chemistry in the past decades. Despite the enormous efforts put forth in developing preparative methods in this field, our knowledge about the mechanism of these reactions is still fairly limited. Recent advances made in the application-oriented quantum chemistry provide a complementary methodology along these lines.

Similar to our previous theoretical studies focusing on the reactions of bare transition metal atoms with CO<sub>2</sub>, we apply density functional theory to reveal the elementary steps of transition-metal-mediated CO<sub>2</sub>-C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> coupling reactions. Our main goal is to locate relevant stationary points on reliable model potential energy surfaces and relate them to possible reaction intermediates. Based upon the energy profile obtained from the energies of located minima and transition states we identify the lowest energy path towards the products. The electronic structure of intermediates of key importance is analyzed in terms of molecular orbital interactions.

The reaction we have first investigated is the formation of binuclear hydrido-acrylate complexes in stoichiometric reactions of CO<sub>2</sub> with bis(ethylene) complexes of Mo and W (*trans*-M(C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>)<sub>2</sub>(PMe<sub>3</sub>)<sub>4</sub>), which has been characterized experimentally in detail by Carmona et al. Our results clearly establish the intermediacy of a metalla-lactone species in the reaction and we show that this

intermediate is reached from a precursor complex that involves coordinated CO<sub>2</sub> and C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> ligands via a single low energy activation barrier. We follow the fate of the metalla-lactone intermediate along the route toward the hydrido-acrylate product and give a detailed account of the elementary steps of the entire reaction. The effect of the solvent medium on the relative energy of reaction intermediates and transition states is examined and found to be important to predict reliable energetics.

We also consider a few other transition metal complexes as active sites that may facilitate the CO<sub>2</sub>-C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> coupling reactions. An example is given where a metal-hydride complex is chosen to model the active metal center and the reaction give rise to coordinated acrylic acid.

## Application and development of some homogeneous catalytic processes in organic chemistry

**Tibor Soós**

*Organometallic Research Group, Institute of Chemistry, Chemical Research Center*

Our research program revolves around the theme of catalysis. Research goals include discovery of new reactions and catalysts, development of synthetic methods and techniques for catalyst immobilization.

**Method developments:** The large and varied number of oxacycles in natural products has fueled interest in the development for their construction. We have been investigating the olefin metathesis reaction of oxygen containing trienes which gives an easy access to oxacycles. In parallel with this investigation we initiated a complementary approach based on Kulinkovitsch reaction.

**Catalyst immobilization:** A second major focus of our group is the field of "fluorous chemistry". We are currently active in the synthesis of fluorinated pincer type catalysts for Suzuki and Heck reactions.

**Catalyst development:** An exciting new direction is the organocatalytic reactions. Simple organic molecules can replace metals in catalytic processes and do so in lower cost and environmentally friendly manner. We designed several chiral secondary amines for asymmetric Diels Alder reaction and aldol reactions.

## Combined application of holographic research strategy and artificial neural networks for catalyst library optimization

**András Tompos**

*Department of Organic Catalysis, Institute of Chemistry, Chemical Research Center*

We recently have described the "Holographic Research Strategy" (HRS) to design catalyst libraries. The new approach has been used for virtual preparation and testing of relatively large number of multi-component catalysts. On the other hand Artificial Neural networks (ANNs) has been used for information mining in different fields. Recently the use of ANNs has been applied for catalyst library optimization in combination with genetic algorithm.

In this contribution we describe the combination of ANNs for information mining and HRS for optimization via virtual catalytic experiments. Moreover, since the visualization ability of experimental spaces is an inherent property of HRS it can be exploited in data mining as well. In our study catalyst compositions generated during HRS optimization were virtually tested using ANNs and were presented and visualized in the form of two-dimensional holograms.

Experimental propane conversion values of a catalyst library containing catalysts with different composition were used as input data to create linearly combined neural networks. The formed ANNs were used as black boxes to establish the relationship between the catalyst composition and the conversion during the optimization phase. Thus, new catalyst compositions generated by HRS were virtually tested using the linearly combined neural networks. The best predicted conversion values were 54% and 89% at 100 °C and 150 °C, respectively. These values are higher than the highest conversions measured experimentally (37% and 84%, respectively).

## Perspectives and status of the in-beam Mössbauer spectroscopy project

**Tamás Belgya, G.L. Molnár, K. Lázár**

*Department of Nuclear Research and Department of Catalysis and Tracer Studies, Institute of Isotope and Surface Chemistry, Chemical Research Center*

Mössbauer spectroscopy provides information about chemical bonds, oxidation states, geometrical location and magnetic state of the Mössbauer isotope as influenced by its surrounding atoms.

The Mössbauer effect was observed on 82 isotopes of 44 elements, but only a few of them are used in practice. The  $^{57}\text{Fe}$  and  $^{57}\text{Co}$  pair is used in 80% of the cases, while  $^{119}\text{Sn}$  and all the others share the remaining 20% equally. The rare usage of the other Mössbauer nuclei is due to difficulty in their production or the short half-life of the exciting radioactive nuclei or their small abundance.

A way to increase the number of usable Mössbauer nuclei is to produce them in-beam. In 1965, Hafmeister and Shera demonstrated the Mössbauer effect of the 29.4-keV neutron capture gamma ray of  $^{40}\text{K}$  in a neutron beam of  $2.4 \times 10^6 \text{ cm}^{-2}\text{s}^{-1}$ . They concluded that the recoilless fraction is not greatly impaired by the displacement of the  $^{40}\text{K}$  atom due to neutron capture.

After the installation of the cold neutron source in the year of 2001, it became possible to widen our experimental possibilities at Budapest Neutron Center (BNC). From a number of possibilities; the in-beam Mössbauer spectroscopy has been selected. In 2002, we were selected by KMÜFA for construction of an in-beam Mössbauer spectrometer using neutron capture to produce the excited states of various Mössbauer nuclei at the cold neutron-beam facilities of the BNC.

The expected cold neutron flux will be about  $3 \times 10^8 \text{ cm}^{-2}\text{s}^{-1}$  at the target position. The quasi-parallel, focused neutron-beam will provide excellent experimental conditions with a specially designed He-cooled Mössbauer-cryostat. The target can be the emitting source or the absorber depending on the situation.

Prospective prompt-gamma nuclei for in-beam excitation are identified ( $^{40}\text{K}$ , Gd, Er, Dy, Yb,  $^{179}\text{Hf}$ ,  $^{188}\text{Os}$ ,  $^{201}\text{Hg}$ ). The short-lived continuously activated sources and the corresponding Mössbauer nuclei ( $^{153}\text{Er}$ ,  $^{166}\text{Er}$ ,  $^{175}\text{Lu}$ ,  $^{186}\text{Os}$ ,  $^{191,192}\text{Ir}$ ,  $^{195}\text{Pt}$ ,  $^{197}\text{Au}$ ) can also be used in beam. Longer half-life nuclei can be activated in the reactor and used during the reactor shutdown periods ( $^{141}\text{Pr}$ ,  $^{127}\text{I}$ ,  $^{129}\text{I}$ ,  $^{181}\text{Ta}$ ,  $^{182}\text{W}$ ).

Fields of application includes biological systems ( $^{40}\text{K}$ ), catalysis (Au, Pt), HTC superconductors (Pr), granite and magnetic layers (Gd, Er, Dy, Yb) or the chemical behavior of the nuclear waste of  $^{129}\text{I}$ .

The new in-beam Mössbauer spectrometer will provide unique experimental possibilities for the researchers of the Chemical Research Center and other Hungarian research institutions or universities. International access will be provided within the FP6 of the EU.

## The H atom addition to the conjugated double bonds as studied by pulse radiolysis

**Katalin Dajka, L. Wojnárovits, E. Takács**

*Department of Radiation Chemistry, Institute of Isotope and Surface Chemistry, Chemical Research Center*

The high-energy radiation initiated polymerization of acrylic and methacrylic acid esters have industrial importance in surface modification by electron beam induced curing. The acrylamide monomers are applied for producing thermoresponsive drug-delivery hydrogels for medical purposes.

At the Radiation Chemistry Department we apply pulse radiolysis technique with optical detection to study the reactivity of acrylic acid esters and acrylamide monomers. We carry out most of our investigations in dilute aqueous solutions, in these solutions the short-lived intermediates of water radiolysis (hydrated electron, H atom and OH radical) react with the monomers. The results on the reactions of hydrated electrons and OH radicals are now published. In our latest work we investigated the rate coefficients of the H atom addition to these conjugated double bonded compounds; here report on the newest results.

We record the kinetic curves (absorbance vs time) at different wavelengths in the UV-visible region in order to identify the intermediates.

The H atom adds to the  $\beta$ -carbon atom of the  $\text{C}^{\beta}=\text{C}^{\alpha}-\text{C}=\text{O}$  system and in the process short-lived  $\alpha$ -carboxyalkyl type H atom adduct forms. The rate coefficients of the addition ( $k_{\text{H,measured}}$ ) were calculated from the build-up curves taken at the  $\lambda_{\text{max}}$  of the adduct absorbance. The  $k_{\text{H,measured}}$  values ( $2 \times 10^9$ - $1 \times 10^{10} \text{ mol}^{-1} \text{ dm}^3 \text{ s}^{-1}$ ) are in the so-called near-diffusion-controlled region. The reactivity of the monomers becomes higher in the order crotonates ( $k_{\text{H,measured}} \approx 2.4 \times 10^9 \text{ mol}^{-1} \text{ dm}^3 \text{ s}^{-1}$ )  $\approx$  maleates  $<$  fumarates  $<$  acrylates  $\approx$  acrylamides ( $\sim 7 \times 10^{10} \text{ mol}^{-1} \text{ dm}^3 \text{ s}^{-1}$ )  $<$  metacrylates. We used semiempirical calculations to separate the chemical reaction rate coefficients ( $k_{\text{H,chem}}$ ) from the effect of the diffusion.

There is a relatively good correlation between the rate coefficients of the H addition and the reaction enthalpies.  $\Delta H_{\text{add}}$  is most exothermic for the H addition to the methacrylic acid esters ( $\sim 190 \text{ kJ mol}^{-1}$ ); less exothermic in the reaction of the crotonates ( $\sim 160 \text{ kJ mol}^{-1}$ ). The reactivity of the monomers is influenced by the substitution on the C=C double bond. The high rate coefficients measured for methacrylic acid esters are due to the stable tertiary type radical that forms in the reaction of the  $\alpha$ -methyl substituted monomers. The reactivity differences between fumarates and maleates are not easily understandable on the basis of the reaction enthalpy values.

The rate coefficients measured in the addition reactions of OH radicals ( $k_{\text{OH,measured}}$ ) and H atoms ( $k_{\text{H,measured}}$ ) for the same compound practically coincide. However the diffusion controlled rate coefficient for OH reactions,  $1.4 \times 10^{10} \text{ mol}^{-1} \text{ dm}^3 \text{ s}^{-1}$  is much lower than the value for the H atom reaction,  $3 \times 10^{10} \text{ mol}^{-1} \text{ dm}^3 \text{ s}^{-1}$ . After making a correction for the effect of diffusion, the rate coefficient of the chemical reaction appears to be approximately two times higher for the OH radicals than for the H atoms.

## Reactions of hydrocarbons on noble metal catalysts. Effect of surface components

**Károly Lázár, Zoltán Paál, Attila Wootsch, Dtere Teschner, Nóra Győrffy, Olga Pozdnyakova**  
*Department of Catalysis and Tracer Studies, Institute of Isotopes and Surface Chemistry, Chemical Research Center*

Skeletal reactions of hydrocarbons over noble metal catalysts have been in the focus of interest in our research group. A "catalytic system" is produced by the interaction between the active metal, the adsorbed reactants (intermediates) and the other surface components (such as carbonaceous deposits).

The effect of hydrogen is probably the most important feature during skeletal reactions of hydrocarbons. It is not "only" a reactant. Our profound studies on the kinetic parameters proved that the reaction mechanism of hexane transformation over supported and unsupported Pt is noticeable different in the region of positive and negative hydrogen order. Hydrogen also influences the amount and the structure of carbonaceous residues and the bulk phase of Pt, too.

The catalytic effect of carbonaceous deposits was examined by (i) reactions on intentionally carbonized Pt catalysts, (ii) hydrogenative removal of carbonaceous residues using protium or deuterium, and (iii) surface spectroscopic measurements after carbonization treatments analogous to those before the catalytic measurements. Carbonization reduced the activity and changed the selectivity pattern of the catalysts. Supported catalysts were less sensitive for deactivation, than Pt black, accordingly the H/C ratio was found to be 1.0-1.6 on Pt/SiO<sub>2</sub>, and 0.4-1 on Pt black [4]. Four types of deactivation degree can be distinguished: (i) *beneficial deactivation*: more than 85% of the original activity remained, isomer and fragment selectivity increased; (ii) *non-selective deactivation*: residual activity 30-85%, selectivities almost unchanged; (iii) *selective deactivation*: residual activity 10-30%, selectivity of isomer and fragment formation decreased, production of hexenes increased; (iv) *severe deactivation*: residual activity is less than 10%, only hexenes and benzene were produced. Three-dimensional carbonaceous deposits (including graphitic entities) caused the overall activity drop, "non-graphitic, hydrogen-poor" deposits changed the selectivity pattern, while single C entities had only minor effect on the catalytic properties.

Lately, our attention has been turned to the modification of active sites by addition of inactive metals. Germanium was selectively deposited on Pt/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> and Rh/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> by controlled surface reaction via organometallic compounds. Certain amount (about 1/8 monolayer) of germanium on Pt could selectively block the sites that chemisorb the C<sub>6</sub>-aromatic ring parallel to the metal surface. Accordingly, this catalyst resulted in high isomer and low benzene selectivity in hexane transformation. The results indicated that the addition of low amount of a second metal in a controlled way cause unique catalytic behavior, which may be of practical importance.

In the near future we shall focus on studying the role of hydrogen and carbonaceous deposits in transformation of hydrocarbons over bimetallic catalysts prepared by different methods.



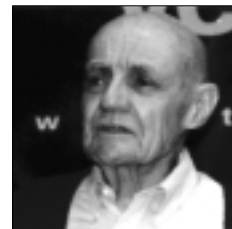
## SAJTÓSZEMLE

## Ionizált makromolekulák

Népszabadság • 2002. október 19. • Szerző: Ötvös Zoltán

**John B. Fenn amerikai, Tanaka Koichi japán és Kurt Wüthrich svájci tudósé az idei kémiai Nobel-díj. A tízmillió svéd koronás díj felén Fenn és Tanaka osztozik, a másik felét Wüthrich kapja. A három kutató a biológiai makromolekulák azonosítása és szerkezeti elemzése területén végzett munkájáért érdemelte ki az elismerést.**

**A nukleinsavak (DNS és RNS) és a fehérjék makromolekuláit nehéz tanulmányozni, mivel igen érzékenyek, könnyen elvesztik természetes, egyúttal rendkívül bonyolult szerkezetüket. Ma már több modern fizikai-biokémiai módszer is alkalmas a makromolekulák szerkezetének tanulmányozására.**



Penke Botond, a Szegedi Tudományegyetem professzora szerint J. B. Fenn korszakalkotó munkája ezek közül az elektropray-ionizáció (SI) felfedezése és bevezetése volt. Módszerének lényege, hogy a fehérjeminta kissé savas vizes oldata spray formájában egy vákuumos térbe kerül, ahol az oldószer java része gyorsan elpárolog, és az erős elektromos térben egy szabadon mozgó, töltésekkel rendelkező ion marad vissza. A folyadékcsepp tehát bekonztrálódik, és a végeredmény például egy „meztelen”, számos pozitív töltéssel rendelkező fehérjeion. Utolsó lépésként ez repül a detektorhoz. Ennek az ionnak a pontos molekulatömege, azután már különböző módszerekkel mérhető.

Tanaka Koichi, a Shimadzu műszergyár mérnöke más módon oldotta meg a biomolekulák „elpárologtatásának” problémáját. Az alapvető cél már az 1970-es években adott volt: a makromolekulát ionizált formában, gázfázisba kell hozni. Tanaka 1987-ben fedezte fel, hogy a fehérjemolekulák kis energiájú lézersugárral is gázfázisba hozhatók. Az elektropray és a lézer deszorpciós ionizáció módszerrel a fehérjék közötti kölcsönhatások tanulmányozhatók, a két eljárás emellett a sejtek jelrendszerének gyors és érzékeny vizsgálatára is alkalmas.



Kurt Wüthrich „az oldódó óriásmolekulák háromdimenziós szerkezeti azonosításában alkalmazható, mágneses magrezonancián (NMR) alapuló spektroszkopikus módszer kidolgozásáért” kapta az elismerést. Az idén 64 éves svájci kutató a nyolcvanas évek elején jött rá, hogy az NMR-rel a fehérjék láthatóvá tehetők. Három évvel később munkatársaival elkészítette az első ilyen felvételt. A módszert elsősorban a gyógyszerkutatásban alkalmazzák, segítségével a nagymolekulákról atomi szintű információkat kapunk. Az eljárás előnye: nincs szükség a vizsgálandó anyagok kikristályosítására, a szükséges adatokat az oldatok elemzésével nyerik. Az NMR-rel hazánkban Debrecenben, Szegeden és Budapesten foglalkoznak. Egy korszerű készülék 300–600 millió forintba kerül.



Perczel András, az ELTE kutatója szerint, annak ellenére, hogy a nagyon drága, sokszor egymillió dollárba kerülő tömegspektrométerek beszerzéséhez a hazai kutatótársadalom nemigen kapott támogatást, több laboratórium, anyagi erejét meghaladó erőfeszítésekkel elkezdte a munkát. Jó eredménnyel folynak itthon a kutatások, bár az olcsóbb és elavult tömegspektrométerek miatt csak lassan tudnak haladni a munkával.



## George A. Olah Award in Hydrocarbon or Petroleum Chemistry

*Chemical & Engineering News • 2003. február 3.*

*Sponsored by the George A. Olah Endowment*

There's an old saying: „When you want something done, ask a busy person.” By many accounts, **Peter J. Stang**, who is being honored for his pioneering research in hydrocarbon chemistry, exemplifies the adage.

Stang is editor of the *Journal of the American Chemical Society*, ACS's flagship journal, which publishes its 125<sup>th</sup> volume this year. Previously, Stang was an associate editor of *JACS* for 18 years and also served as editor of the *Journal of Organic Chemistry* in 2000–01.

His editorial duties are in addition to serving as distinguished professor of chemistry, director of a highly productive research group, and dean of the College of Science at the University of Utah; chairman of the ACS Committee on Nominations & Elections; and an adviser to numerous government and National Research Council panels.



All of this productivity comes from a person who spoke not one word of English when he came to the U.S. from Hungary in 1956. Stang's father was Hungarian; his mother, German. His parents met and lived in Paris, but when World War II broke out, his father went back to Hungary. Stang was born in Nürnberg, Germany, in 1941, but returned to Hungary as an infant.

Stang's interest in chemistry dates back to Hungary, where as a teenager he made his own chemistry set from store-bought chemicals. But although he got top marks in geometry and chemistry in his U.S. high school, he failed English and American history. The teachers gave him an IQ test: With his still-limited English ability and unfamiliarity with multiple choice exams, Stang had an IQ score of only 73. He says with a laugh that „probably no other member of the National Academy of Sciences [to which he was elected in 2000] can make that claim.”

He received a B.S. from DePaul University in Chicago in 1963; a Ph.D. from the University of California, Berkeley, in 1966; and did a two-year postdoc at Princeton University. He joined the faculty of the University of Utah in 1969 and has been there ever since. He is also a senior fellow of the Loker Hydrocarbon Research Institute at the University of Southern California.

In 1969, Stang was the first person to report the preparation of vinyl triflates and solvolytically generate vinyl cations, which are novel members of the family of carbocations. Carbocations are among the most important reactive intermediates in chemistry and play a vital role in petroleum refining and hydrocarbon chemistry. In 1979, Stang coauthored the definitive monograph in the field and in 1997 coedited an updated version. „Modern synthetic organic chemistry, hydrocarbon chemistry, as well as pharmaceutical and materials chemistry would be severely compromised and hardly imaginable without vinyl and aryl triflates,” a colleague notes.

Later, Stang shifted research interests, and his preparation of diverse alkynyliodonium salts was responsible for a renaissance in polyvalent iodonium chemistry. In the early 1990s, he turned his attention to supramolecular chemistry and self-assembly. He pioneered a novel paradigm by using coordination and metal-ligand dative interactions for the self-assembly of unique, metallacyclic polygons and polyhedra.

Stang was the first to report chiral nanoscopic assemblies; the self-assembly of a unique cuboctahedron and truncated tetrahedra; and nanoscopic dodecahedra (from 50 pre-designed components). These unique systems are stable microcrystalline solids that „have the potential to revolutionize zeolite-based petroleum refining in the 21st century,” a colleague says.

Stang is the author of more than 350 articles and numerous monographs. Among his awards are the Alexander von Humboldt Senior U.S. Scientists Award (1977), University of Utah Distinguished Research Award (1987), Governor's Medal for Science & Technology (State of Utah, 1993), and ACS James Flack Norris Award in Physical Organic Chemistry (1998).

So how does Stang manage to accomplish so much as researcher, teacher, editor, dean, and mentor? „There are two things I've learned,” he says. „One is that you need to delegate. The other is you need to focus. Hire the best people, then delegate and focus on what's important.”

The award address will be presented before the Division of Organic Chemistry.--MADELEINE JACOBS

## Nemzetközi elismerés

*Népszabadság • 2002. október 19.*

A heterogén katalízissal és a szilárd felületek kémiájával foglalkozó magyar kutatók, Gucci László budapesti professzor és Solymosi Frigyes szegedi akadémikus 70. születésnapja alkalmából – tudományos munkásságuk elismeréseként – két nemzetközi

folyóirat különszámot jelentetett meg. Az Applied Catalysis Gucci László, míg a Catalysis Today Solymosi Frigyes nemzetközi viszonylatban is jelentős kutatási eredményeit ismertette és méltatta pályafutásukat, a szakterület legjelesebb képviselői pedig dolgozataikkal tisztelegtek születésnapjukat ünneplő magyar kollégáik előtt.

## Programozott sejthalál

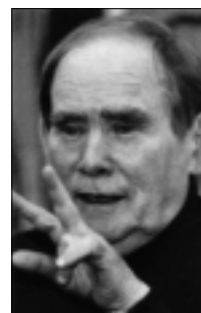
*Népszabadság • 2002. október 19. • Szerző: Ötvös Zoltán*

**Sydney Brenner brit, illetve John E. Sulston és H. Robert Horvitz amerikai kutatók nyerték el az orvosi Nobel-díjat. Az elismeréssel a szervfejlődés génszabályozásának és a programozott sejthalálnak a kutatásában elért eredményeiket ismerték el.**

### Sydney Brenner

Az USA-ban 1988-ban rendezett konferencián vált igazán elfogadottá az emlőssejtek természetes, programozott elhalását definiáló apoptózis létezése. Itt találkozott először az egyik idei Nobel-díjassal, Robert Horvitz-cal Fésüs László akadémikus, a Debreceni Egyetem Biokémiai és Molekuláris Biológiai Intézetének igazgatója.

A jelenséget addig sokan a kísérletek melléktermékének tartották. Horvitznak a *C. elegans* nevű fonálféreggel végzett genetikai kísérleteinek konkrét eredményei győzték meg a tudományos közvéleményt arról, hogy létezik gének által vezérelt, programozott sejtelhalás. A tudományág atyjaként is tisztelt Sydney Brenner választotta ki alapvető sejtbiológiai kérdések vizsgálatához az ezer körüli sejtből álló, így könnyen tanulmányozható *C. elegans*-t. John Sulston jött rá, hogy e sejtek egy része génektől függő, programozott módon elhal. Horvitz meghatározta az alapvető sejthalálgének biokémiai funkcióját.



### John E. Sulston

Az élőlények sejtjeinek döntő része rendszeresen lecserélődik, a régiek helyére újak „állnak”. A sejthalál pontos menetrend szerint zajlik, zavar esetén a szervezetben végzetes folyamatok mehetnek végbe. Túl sok sejt elpusztulása esetén elsorvadhatnak szerveink, ellenkező esetben viszont sejtzaporulat lép fel. A kilencvenes évek közepére, második felére már világszerte kutatócsoportok százai dolgoztak a programozott sejthalál tanulmányozásán, ennek kapcsán új folyóiratok, nemzetközi társaságok, kutatóintézetek, diagnosztikai cégek jöttek létre.

Világossá vált, hogy az emberi sejtekben az apoptózis szabályozására receptorrendszerek, különféle jelátviteli útvonalak, ölü mechanizmusok, gátló fehérjecsaldók léteznek. Megtörtént ezek részletes jellemzése, bár még napjainkban is újabb és újabb, eddig ismeretlen sejthalálfehérjék kerülnek elő. Szinte nincs olyan betegség, amelynek kialakulásában ne szerepelne valamilyen módon a sejthalálgének által kódolt fehérjék kóros működése. Az apoptózisgének csökkent vagy elmaradt működése a tumorok kialakulásának meghatározó lépése, autoimmun betegségekhez, nehezen befolyásolható gyulladásokhoz vezet.



### Robert Horvitz

Fokozott apoptózis felelős például az AIDS és más immunhiányos állapotok létrejöttéért, a sorvadásos idegrendszeri betegségekért, de szerepe van az agyvérzés vagy szívinfarktus során bekövetkező sejtelhalás egy részéért is. Természetes, hogy napjainkban új gyógyszerek egész sorát fejlesztik ki a apoptózis terápiás célú befolyásolására.

A magyar orvosi biológiai kutatásokba is bevonult az apoptózis vizsgálata és annak módszertana. Eredményes alapkutatások folynak a Semmelweis Orvostudományi Egyetemen és Debrecenben is. Fésüs professzor vezetésével 18 ország kutatói európai apoptózishálózatot működtetnek az új információk, módszerek cseréjére, valamint az ezen területen dolgozó fiatal kutatók képzésére.



A Nobel-díjak odaítélését gyakran követi vita azok jogosságáról, az esetleg méltatlanul kihagyottakról. Fésüs professzor szerint ebben az évben erre nem kell számítani, hiszen minden kétséget kizáróan e három kutató munkássága az orvosi biológiai kutatások olyan dimenzióit nyitotta meg, amelyek nagyon hamar elvezettek nagy populációkat érintő betegségek megértéséhez, és azok teljesen új alapú gyógyításának lehetőségéhez.

## Előretörtek az élettudományok

Vegyipar • 2003/2 • Szerző: D. Szekeres Ágnes

MTA KÉMIAI KUTATÓKÖZPONT

A Kémiai Kutatóközpontot 1998-ban hozta létre a Magyar Tudományos Akadémia a Központi Kémiai Kutatóintézetből az Izotópkutató Intézetből és a Szervetlen Kémiai Kutatólaboratóriumból, hogy az együttműködés lehetőségét kihasználva a közös infrastruktúra és műszerállomány racionális felhasználásával eredményesebben és gazdaságosabban folytathassa tudományos tevékenységét.

Vinkler Pétert, a központ tudományos titkárát egyebek közt ennek részleteiről kérdeztük.

– *A kutatóközpontban folyó kutatások követik-e a világban előtérbe került tendenciákat, irányokat?*

– A Kémiai Kutatóközpont legrégebbi kutatóhelyének, a Központi Kémiai Kutatóintézetnek az alapító oklevele 1952. évi keltezésű. Az intézet kutatási céljait és a tevékenység területeit az 1950-es évek első felének ismeretei határozták meg. Az akkori célkitűzés: a kémiai szerkezet és a reaktivitás közötti összefüggések vizsgálata még mindig időszerű. Hasonlóképpen az egyes kutatási területek – új, potenciálisan biológiailag aktív szerves molekulák előállítása, kinetikai és katalízisvizsgálatok, polimerkémiai, valamint anyagszerkezeti kutatások – ma is fontosak a kémia tudományában. Jelenleg két fő irány különböztethető meg a világban. Az egyik a kémia és az élő rendszereket tanulmányozó tudományágak ismereteinek és módszereinek közös alkalmazása az élő szervezet működése megértésének, a fiziológiai történések felderítésének és új gyógyszerek kidolgozásának céljából. Ezért indította meg az intézet már a 70-es években bioorganikus kémiai, nukleotidkémiai és természetes szerves vegyületekkel foglalkozó kutatásait, később a receptor- és fehérjekötődési, a farmakobiokémiai és a neurokémiai kutatásokat. Az élettudományok előretérése azóta is világszerte folytatódik. Ennek eredményei a gyógyászatban is jelentkeznek, jelentős részben éppen a kémia egyre nagyobb szerepvállalásának köszönhetően. A másik fő irány az anyag szerkezetének és funkciójának, az anyagok egymásra hatásának, a lejátszódó reakcióknak az elemi lépések, a molekulák, atomok szintjén történő mind pontosabb megismerése. Ezen belül a kémia és a fizika határterületei a legizgalmasabbak.

– *A kutatóközpontban is megváltoztak a kutatási arányok az élettudományok javára?*

– A világban tapasztalható általános tendencia, hogy az élettudományok kutatására fordított kutatói és anyagi potenciál arányai növekednek, mintegy 60–70 százalék a részarányuk az összes kutatáson belül. Ez az arány Közép-Kelet-Európában 35–50 százalék között van, nálunk mintegy 50 százalék. A Kémiai Kutatóközpontban a korábban domináló szerves kémiai kutatások átalakultak, s ma már a biomolekuláris kémiai kutatások az egész tevékenységnek mintegy 25 százalékát teszik ki.

– *Hogyan alakítják ki a feladatokat, azt, hogy mivel foglalkoznak, mit kutatnak?*

– A tudományban általános tendencia, hogy az eddigi diszciplináris kutatások helyett inkább a funkcióvezérelt kutatások kerülnek előtérbe. Sem a tudományban, sem az iparban nem úgy fogalmazódik meg a kérdés, hogy fejlesszük-e a szerves kémiát vagy a fizikai kémiát. Azt mondják például, hogy szükségünk van olyan szerkezetű anyagokra, amelyek biokompatibilisek, amelyek csípőprotézisként használhatók. Vagy igen magas hőmérsékletet is elviselő anyag kellene, vagy környezetkímélő motorhajtóanyagra, tumorellenes gyógyszerekre, speciális műanyagokra van szükség. Tehát a funkció oldaláról fogalmazódik meg az igény. Itthon már a hetvenes évek elejétől hozzászoktatták a kutatókat, hogy a gazdaság igényeinek oldaláról célszerű elindulni. Ma ez

a tendencia érvényesül a nemzetközi életben, így az európai kutatási pályázatokban is.

Pálincás Gábor főigazgató kezdeményezésére olyan tematikai átrendezés, korszerűsítés történik a kutatóközpontban, ami az erők koncentrációját, a kutatási témák világtendenciákhoz való illesztését szolgálja. A Kutatóközpont 2004-ig meghatározott kutatási koncepciójában az új, biológiailag hatékony molekulák felismerésében és tervezésében kiemelt szerep jut „A validált célmolekulákon alapuló gyógyszer- és diagnosztikumtervezés” című Nemzeti Kutatási Fejlesztési Program projektben megcélzott hatástani területek közül a neuroprotektív és a tumorellenes hatásvizsgálatoknak. Ennek megfelelően a biomolekuláris kutatások főként a központi idegrendszer patológiás állapotait, illetve betegségeit tükröző – a molekuláristól a komplex biológiaiig terjedő – modellek vizsgálatára összpontosítanak.

A felületkémiai és heterogén katalíziskutatások témacsoportjában elsősorban a rendezett szerkezetű, nem fémes anyagok, mint a zeolitok, a mezopórusos oxidok, a nanopórusos szervetlen anyagok, továbbá a fémfelületek szerkezetének és katalitikus hatásának vizsgálatát végzik. A nanoszerkezetek, a nano-

méretű anyagok kutatása egyre jelentősebb. A környezeti kémiai kutatások közül a műanyag hulladékok pirolitikus újrahasznosítását elősegítő kémiai reakciók kutatását említem. Több témában részt veszünk az EU 5. Keretprogramban és reményeink szerint majd az EU 6-ban is.

Szoros kapcsolatot építettünk ki az egyetemekkel, a BME, az ELTE, a SOTE doktori iskolájába beiratkoztak közül 60 PhD-hallgató itt végzi kutatómunkáját. Hét közös tanszékünk van egyetemekkel, ahol a Kémiai Kutatóközpont és az egyetemek kutatói együtt dolgoznak.

