

Kutatóközponti Krónika

2006. szeptember
31. évfolyam



TARTALOM

HÍREK	5
Általános hírek	5
Kitüntetések, díjak, elismerések	6
ÚJ NAGYMŰSZEREK A KÉMIAI KUTATÓKÖZPONTBAN	
Neurokémiai Osztály	7
Szerves Analitikai Laboratórium	10
Felületmódosítási és Nanoszerkezetek Osztály	11
NMR Laboratórium	12
Lézerspektroszkópiai Laboratórium	13
Tömegspektrometria Osztály	14
Molekuláspektroszkópiai Osztály	16
ESR Laboratórium	18
Röntgendiffrakciós Osztály	19
RENDEZVÉNYEK, ELŐADÁSOK	
Szemináriumok	20
Tudományos rendezvények a Kutatóközpontban	25
Egyéb tudományos rendezvények, előadások	27
Egyéb rendezvények	29
TUDOMÁNYOS ÉRTEKEZÉSEK VITÁI	30
PhD-értekezések	30
MTA-doktori értekezés	31
KÜLFÖLDI ELŐADÓK	32
ÉRTEKEZLETEK	34
PUBLIKÁCIÓS ADATOK 2000-2005	35
A 2000-2005. évi publikációs pontok szervezeti egységenként	35
A 2004-ben 8, illetve ennél több független idézetet kapott cikkek	36
A 2005-ben 8, illetve ennél több független idézetet kapott cikkek	38
2006. ÉVI NYERTES OTKA PÁLYÁZATOK	42
ÚJ TUDOMÁNYOS KÖNYVEK	44
SAJTÓSZEMLE	52

HÍREK**Általános hírek**

- **2005. szeptember 8-án** az *MTV Delta* műsora foglalkozott az Országos Onkológiai Intézet és az *MTA Kémiai Kutatóközpont* munkatársai által vizsgált AGP vegyület farmakológiai jelentőségével. A bonyolult szerkezetű vegyületnek (fehérje + cukormolekulák) tömegspektrométer segítségével meghatározható a szerkezete és háromdimenziós kép is készíthető rólá.
- **2005. október 12-én** **Tudomány, Innováció, Életminőség** címmel tartották meg az *MTA intézethálózatának első fórumát*. Az ülésre egy vaskos kötet készült, ami részletes tájékoztatást nyújt az MTA intézeteiben folyó, gyakorlati célú kutató-fejlesztő munkáról és annak eredményeiről. A kiadvány előszavában Vizi E. Szilveszter, az MTA elnöke leszögezi: Az Akadémia, mint nemzeti intézmény érdekelte a nemzeti és az európai értékek megőrzésében és az értékteremtésben, de érdekelte nemzeti érdekeink megvédésében is. Tudomásul kell venni, hogy a XXI. sz. jellemzője, hogy az országok erejét nem nagyságuk, nem hadseregük ütképessége, hanem gazdasági, kulturális fejlettségük határozza meg.

A kiadvány szerkesztőbizottsága (Bálint Csanád, Dudits Dénes és Pál linkás Gábor) a Bevezetésben arról ír, hogy az intézethálózat a 90-es évek második felében – hasonlóan más hazai intézményekhez – jelentős változásra ment keresztül. Az intézetek kutatói létszáma erőteljesen lecsökkent és megfiasztalódott. Megkezdődött kutatási profiljuk korszerűsödése, ami ma is tart, és várhatóan állandó folyamat marad. A hálózat megörizte az alapozó kutatásokban hagyományosan birtokolt erős pozícióját, ugyanakkor tevékenységének jelentős részévé vált a graduális és posztgraduális oktatásban való részvétel; ma már a nemzeti innovációs rendszernek is figyelmen kívül nem hagyható, fontos elemévé lett. Az intézetekben művelt kutatások interdisziplinaritása szélesedett, megteremtve ezzel a lehetőséget a hálózat intézetei közötti együttműködések erősítéséhez növeléséhez. A kötetet Vinkler Péter szerkesztette.

- **2005. október 24-én** egy chilei tudományos delegáció látogatta meg a Kutatóközpontot. A csoportban egyetemi, ipari és miniszteri munkatársak vettek részt.
- **2006. április 19-én** a *Chemical Singers*, a Kutatóközpont tehetséges fiatal énekeséiből, zenészeiből álló együttes, **Tavaszi zeneszó** címmel adott sikeres koncertet.
- **2006. június 22-én** Rátai Dániel a Fiatal Feltalálók amerikai versenyén aranyéremmel kitüntetett feltaláló "A 3-dimenziós képalkotás egyszerű módszerei" címmel tartott előadást.

Kitüntetések, díjak, elismerések

- A **Bolyai János kutatási ösztöndíjasok kutatói zárójelentéseinek** 2005. évi értékelése kapcsán, a Kuratórium „kiemelkedő” minősítéssel fogadta el: *Bakó Imre, Drahos László és Keszthelyi Tamás* munkáját. *Emri Zsuzsanna* és *Soós Tibor* beszámolója „megfelelő” minősítést kapott.
- **2006-ban**
Akadémiai Ifjúsági díjat nyert
Barabás Péter, Groh Werner Péter és Deák Andrea.
- **2006. március 16.**
A **Magyar Köztársasági Érdemrend Középkeresztjével** tüntették ki *Pálinkás Gábor Széchenyi-díjas* fizikust, az MTA rendes tagját, az MTA Kémiai Kutatóközpontjának főigazgatóját a tudományos eredmények gazdasági hasznosításában és a kutatóhelyek koordinált együttműködésében végzett eredményes munkája, tudományos közéleti tevékenysége, továbbá a folyadékok szerkezetének vizsgálatában elért nemzetközileg kiemelkedő eredményei elismeréseként.
- **2006. március 16.**
Messmer András a kémiai tudományok doktora, az ELTE Természettudományi Karának címzetes egyetemi tanára, az MTA KK nyugalmazott tudományos tanácsadója **Széchenyi – Díjat** kapott.
- **A 2006. május 8-9.**
Kardos Julianát a kém. tud. doktorát, tud. osztályvezetőt az MTA Elnöksége **Akadémiai Díjban** részesítette az élő sejtek transzmembrán ionfluxusai kinetikájának vizsgálatában kifejtett kiemelkedő munkásságáért, ami nemzetközi elismerést váltott ki.

ÚJ NAGYMŰSZEREK A KÉMIAI KUTATÓKÖZPONTBAN

Biomolekuláris Kémiai Intézet

Neurokémiai Osztály

Wallac WinSpectral 1414 α/β automata folyadékszintillációs számláló

A folyadékszintillációs számláló egy általános felhasználású, nagy érzékenységű, automatizált, számítógép-vezérelt készülék. A gép által futtatott protokollok megváltoztathatók, a mérési adatok a belső hálózaton keresztül hozzáférhetők. Alkalmas valamennyi gyakran előforduló és a biokémiai, idegtudományi kutatásban vagy egészségügyben használt radioaktív alfa- és béta-sugárforrású izotóp mennyiségi meghatározására. Mindezt nagyszámú, ugyanabban a mérési sorozatban akár különböző küvettákban tartott mintán, több különböző protokollt futtatva képes elvégezni. Az egyetlen mintaelőkészítési lépés a szcintillációs keverék (pl. Wallac Optiphase HISAFE III) hozzáadása a mintához és az összekeverés.

Műszaki paraméterek:

Mintakezelés

- Küvettatartó lécek: három fajta, elhelyezhető küvetta: mikrocentrifuga csövek, eppendorfok, maximum 20 ml standard küvetta méretig. Anyaga lehet üveg vagy műanyag.
- 50 felhasználói és 98 mérési protokoll; ezek számítógépről indíthatók, vagy a küvettatartó létre helyezett vonalkóddal is bevitelük.
- Maximális mintaszám: 336-1248 (küvettaméret függvényében).

DPM számlálás

- 4096-csatornás (8 logaritmikus tartományban) spektrális leképezés. (A tricium tartományban ez 0,0038 keV felbontást jelent).
- A DSA (digitális spektrum analízis) rendszer tartalmazza a szokásos izotópok ($H-3$, $C-14$, $S-35$, $Ca-45$, $P-32$, $I-125$) spektrumkönyvtárát és a DOT (digital overlay technique) spektrumanalizáló-rendszerét. Az „Easy-count” protokoll automatikusan felismeri a mintában található izotópot és meghatározza a mennyiséget.
- A „Pulse-shape” analízis lehetővé teszi az alfa-béta elválasztást.
- Lehetséges egyszerre több izotóp párhuzamos mennyiségi meghatározása dinamikus szinkorrekcióval és az ún. accuracy enhancement eljárás segítségével.
- Kalibrálás – nem szükséges, a Wallac által szabadalmaztatott automatikus és folyamatos spektrumstabilizáció (ACSS) módszernek és a kúlső standard-nek (450 kBq $E-152$, mozgatása zárt csőben a mintatér és a belső tároló ólomtartály között) köszönhetően.

Wallac 1450 MicroBeta TriLux folyadékszintillációs és lumineszcens plate-reader

A mérőrendszer lehetővé teszi igen nagyszámú és kis térfogatú mintában a radioaktív izotópok mennyiségi meghatározását. A ma már standard-nek tekinthető 24- és 96-lyukú plate-k sokféle biológiai, immunológiai, biokémiai és akár orvosi mérés elvégzését is lehetővé teszik. Lehetséges a plate-eken kitenyészett kultúrák és sejt-tenyészetek működésének közvetlen mérése igen kis anyagfelhasználással (kevés szcintillációs keverék és kísérleti reagens szükséges) ezért a nagy mintaszám (rövidebb kísérleti idő) mellett ez egy igen költséghatékony izotópos mérési módszer.

Műszaki paraméterek:

- Minták: 24-lyukú plate (sejtkultúrához is alkalmas), 96-lyukú plate, eppendorf, max 4 ml-es csövek, amelyek a megfelelő mérőkazettákba helyezendők. Egyszerre maximum 16 kazetta (maximum 1536 minta 96- lyukú plate esetén).
- Automatikusan felismert és optimalizáltan mérhető izotópok: H-3, C-14, P-32, P-33, S-35, Cr-51, I-125. Más béta- és gammasugárzó izotópok mérése is lehetséges a mérési protokollok megfelelő beállításával (ehhez a felhasználó beavatkozása szükséges).
- A 100 protokoll bármelyike számítógépről indítható, vagy a kazettára helyezett vonalkódal is bevíhető.
- Számlálási módok: egyszeres/kétszeres jelölés CPM, egyszeres/kétszeres jelölés DPM, ParaLux mód (a szokásoshoz képest 5x nagyobb érzékenység érhető el), lumineszcens mérés.

Kombinált Olympus FV300 Fluoview konfokális mikroszkóp képalkotó és Axon elektrofisiológiai mérőrendszer

A mérőrendszer segítségével, a konfokális technikának köszönhetően, egyszerre képezhetők le a sejtalkotó elemek és végezhetők elektrofisiológiai kísérletek. A nagyszámú felhasználható fluoreszcens indikátor lehetővé teszi különböző ionok koncentráció-változásának, a sejtmembrán átjárhatóságának és potenciálváltozásának, biológiai jelzett makromolekulák mozgásának követését. A rendszer ereje abban rejlik, hogy a rendkívül jó térbeli felbontással történő leképezést és a párhuzamos elektrofisiológiai mérésekkel élő szöveteeken és sejtekben lehet elvégezni.

Műszaki paraméterek:

- 3 db Melles Griot lézer: 488 nm, 543 nm, 633 nm, AOTF (Acousto-Optical Tunable Filter) teszi lehetővé a lézerfény intenzitásának folyamatos és gyors beállítását.
- Olympus BX61WI mikroszkóp (nagyítások: 40x, 100x, 200x, 400x, 600x). Infinity-corrected optika (DIC). Optikai kromatikus korrekció az UV-tartománytól a közel infravörös tartományig. Automatikus (elektromotoros) visszaállás a kiválasztott fókusz síkba. Automatikus, szoftver által vezérelt dikroikus tükröválasztás és shutterkezelés. Állítható pinhole (5 lépésekben).
- Felbontás: maximum 2048 x 2048 pixel (változtatható), 12 bit A/D konverter.
- Maximális sebesség: 4 kép / másodperc (512 x 512 pixel térbeli felbontásnál).
- Párhuzamosan működő két konfokális csatorna és egy átesőfény-csatorna.

- A lézervény optikai kábelén van bevezetve (a lézerek hűtése által okozott rezgést kiküszöbölte)
- Fluoview szoftver. Terület-, alterület-, több alterület-, line-scan, point-scan, free-line scan, mélységi scan ($0,01 \mu\text{m}$ lépés) üzemmódok. 3D-alak rekonstrukció és mikrotérfogat meghatározás a mélységi scan alapján. 3D-animáció, zöld/piros és jobb/bal sztereokép készítés.
- Beépített szűrő/tükör szettek a következő festékekre vannak optimalizálva: Calcium Crimson, Calcium Green-1, Calcium Green-2, Calcium Green-5N, Calcium Orange, Calcium Orange-5N, Cy3, Cy3.5, Dil, DiO, EGFP, FITC, Fluo-3, Fura Red, MitoTracker, PI (propidium iodide), Rhodamine-phalloidin, SNARF-1, Texas Red, TRITC, YFP.
- Axon Instruments MultiClamp 700A erősítő.
- Axon Instruments Digidata 1322 16bit-es analóg-digitális konverter elektrofiziológiai méréshez (16 analóg bemeneti csatorna, bemeneti ellenállás $1 \text{ M}\Omega$, teljes beviteli sávszélesség: 500 KHz, 2 analóg kimeneti csatorna).
- 2 db Burleigh piezoelektronos mikromanipulátor (3 irány mentén lehetséges maximálisan 25 mm kézi és $150 \mu\text{m}$ piezoelektronos mozgatás).

Olympus BX50WI mikroszkópra integrált NeuroPDA-III / 5 Mhz Micromax hűtött CCD kamera képalkotó és Axon elektrofiziológiai mérőrendszer

A mérőrendszer segítségével egyszerre képezhetők le a szövetekben nagy sebességgel lezajló folyamatok és végezhetők elektrofiziológiai kísérletek.

Műszaki paraméterek:

- Olympus BX50WI mikroszkóp (nagyítások: 40x, 100x, 200x, 400x, 600x). Infinity-corrected optika (DIC). Optikai kromatikus korrekció az UV-tartománytól a közeli infravörös tartományig.
- NeuroPDA-III : WuTech H-469IV fotodióda mátrix (well depth: több mint 10^9 e^- , pixel méret: $0,44 \mu\text{m}^2$, kiolvasási sebesség: max 1600 kép/másodperc, 18 bit, felbontás: 464 pixel, hexagonális elrendezésben), Microstar Laboratories DAP4200 analóg-digitális konverter, PC, Neuroplex II szoftver. Fényforrás: Cairn Research 150 W-os xenon lámpa.
- CCD-kamerás leképező rendszer: Princeton Instruments hűtött CCD kamera (pixel méret: $8,3 \times 8,3 \mu\text{m}^2$, chip mérete/felbontás: 782 x 582, kiolvasási sebesség: 5 MHz), PC, Metafluor 4.5 szoftver.
- Axon Instruments Axopatch 200B erősítő (A 0°C alá hűtött headstage (előerősítő) rendkívül kis zajszintet tesz lehetővé patch clamp üzemmódban: 130 femtoAmp a 0-10 KHz tartományban, amely a mérőpipetta tartó felerősítése után is 145 femtoAmp alatt marad. Kapacitás-kompenzáció 100 pF és 1000 pF tartományban, soros ellenállás-kompenzáció current clamp és voltage clamp üzemmódban is. Mérési sávszélesség: 100 KHz).
- Axon Instruments Multiclamp 700A erősítő.
- Axon Instruments Digidata 1320 16bit-es analóg-digitális konverter elektrofiziológiai méréshez (16 analóg bemeneti csatorna, bemeneti ellenállás $1 \text{ M}\Omega$, teljes beviteli sávszélesség: 250 KHz, 2 analóg kimeneti csatorna).
- 1 db Burleigh piezoelektronos mikromanipulátor (3 irány mentén lehetséges maximálisan 25 mm kézi és $150 \mu\text{m}$ piezoelektronos mozgatás).

Hi-Tech SF-61 DX2 stopped flow – leállított áramlási elven működő fluoreszcens gyorskinetikai mérőrendszer

A gyorskinetikai mérőrendszer kémiai reakciók kinetikájának meghatározása mellett alkalmas agyból vagy más szövetekből készített membránszuszpenzióban található receptorok és csatornák működésének jellemzésére.

Műszaki paraméterek:

- egyszerű és dupla keverés: az egyszerű esetében két oldat keveredik pillanatszerűen, a dupla esetében ezek után még egy harmadik folyadék hozzáinjektálása is lehetséges,
- a holtidő kevesebb mint 2 ms (a folyadék áthaladásának ideje a keveredési pont és mérési pont között),
- 0,01 ms és 10 másodperc között változtatható időbeni felbontás az érzékeny és szabályozható photomultipliernek és a cserélhető szűröknek köszönhetően.

Szerves Analitikai Laboratórium

Elementar Vario EL III típusú elemanalizátor

A készülékkel a minták elemi összetételének: szén-, hidrogén-, nitrogén- és kéntartalmának meghatározására van mód. A kémiai szintézisek során izolált vegyületek elemi összetételén túl a minták tisztaságára is információt nyerhetünk. A berendezés a minta elégítése után az elemeket független úton határozza meg (Dumas-módszer), így mód van szélsőségesen eltérő elemi összetételű vegyületek, komplexek analizisére is.

Az elemanalizátor a legmodernebb készülékek közé tartozik mind a mérőműszer, mind a vezérlő számítógép és a szoftver tekintetében. Az üzemeltetés és a karbantartás könnyen elsajátítható, így betanítás után technikus végzettségű munkatárs végezheti az analiziseket.

Műszaki paraméterek:

- bemérés: 2-4 mg
- standardok:
 - szén-, hidrogén-, nitrogéntartalom meghatározásánál acetanilid standard,
 - szén-, hidrogén-, nitrogén-, kéntartalom meghatározásánál szulfanilsav standard,
- oszlop: kvarc oxidációs oszlop, oxidáló töltet, korundgolyó, mérési hőmérséklet: 1150°C,
kvarc redukciós oszlop: réz, ezüstgyapot, korundgolyó, mérési hőmérséklet: 850°C.

Felületkémiai és Katalízis Intézet

Felületmódosítási és Nanoszerkezetek Osztály

Hysitron típusú nanoindentátor és NanoScope Dimension 3100 pástázó tűszondás mikroszkóp



A nanoindentáció a nanostruktúrájú anyagok és nanoméretű rétegek, valamint bevonatok mechanikai tulajdonságainak vizsgálata terén egyike a leghatékonyabb és legsokoldalúbb mérési módszereknek.

Az új nanoindentátor berendezés a következők elvégzését teszi lehetővé:

- vékonyrétegek és kemény bevonatok, illetve módosított szerkezetű felületi rétegek keménységének, valamint rugalmassági modulusának tanulmányozása acélokon, különböző fémeken és ötvözeteken;

- karcolási ellenállás meghatározása szerkezeti anyagok kemény és kopásálló bevonatain;
- korrózióálló bevonatok mechanikai tulajdonságainak vizsgálata különböző fémeken;
- vékonyrétegek mechanikai tulajdonságai terén fellépő különleges effektusok, például a gránát és félvezető fémoxid rétegekben tapasztalható fotomechanikus hatások, valamint az indentációs méreteffektussal (ISE) kapcsolatban felmerülő különleges kérdések vizsgálata;
- tömbi anyagok nanomechanikai jellemzése;
- a kettős és többes rétegekben fellépő, ún. kompozit keménység és kompozit rugalmassági modulus mérése;
- a mechanikai tulajdonságok mélységsűrűségeinek meghatározása nanokompozitokban;
- különböző rétegek adhézió-erősségének meghatározása karcolási vizsgálatokkal;

Műszaki paraméterek

- valódi mélységrézékenység: 1 nm,
- terhelési tartomány 1-10000 μ N,
- rendelkezésre álló indentáló csúcsok: Berkovitch, cube corner és szférikus 1 μ m sugárral,
- karcolási hossz: 3 μ m,
- rendelkezésre álló karcoló csúcsok: szférikus 1 μ m sugárral,
- AFM képméret 100 μ m - 100 nm,
- a mintaasztal mozgása x-y irányban: 100 mm; z irányban: 10 mm.



Szerkezeti Kémiai Intézet

NMR Laboratórium

Varian INOVA 600 MHz NMR-rendszer

Erős hardverkiépítése révén az új, nagyterű, nagy felbontóképességű, mind folyadék, mind szilárd halmazállapotú minták vizsgálatára alkalmas NMR-készülék eddig nem kivitelezhető hármas- és négyesrezonancia kísérleteket tesz lehetővé változatos magkombinációkban. Mindez azt jelenti, hogy a napjainkban alkalmazott legmodernebb mérési módszerek igen nagy hányada megvalósítható a készüléken. Ezek a mérések a kémiai, az anyag- és a biológiai tudományok számos területén nyújtanak értékes szerkezeti és dinamikai információkat. Így például lehetséges adott atommagok távolságának, molekuláris szegmensek egymáshoz viszonyított orientációjának, különböző szimmetriaviszonyoknak a tanulmányozása, a molekuláris átalakulások sebességének mérése.



Leggyakoribb alkalmazási területek:

- ^{13}C , ^{15}N izotóppal jelzett fehérjék szerkezetének és dinamikai sajátságainak meghatározása, fehérje-ligandum komplexek kötődésvizsgálata, oligoszacharidok, glikopeptidek és oligonukleotidok szerkezet-meghatározása;
- nehezen oldódó és nem kristályosítható biomolekulák kötőhelyeinek konformációvizsgálata a dipoláris csatolás meghatározására irányuló szilárd NMR MAS-mérésekkel, szerkezet-hatás összefüggések felderítése membránpeptidek és aggregációra hajlamos fibrilláris peptidláncok esetében;
- a gyógyszeripar számára fontos szerkezeti kérdések megválaszolása: gyógyszerhatóanyagok morfológiai kutatása, metabolitok szerkezetzizsgálata, szintetikus szerves vegyületek térkémiai és reakciókinetikai jellemzése;
- homogén- és heterogén katalizátorok előállítása során felhasznált fémorganikus vegyületek ^{13}C , ^{15}N , ^{31}P , ^{195}Pt , ^{119}Sn magainak szilárd-NMR vizsgálatával új, szerkezeti elemek azonosítása, komplexkémiai rendszerekben intra- és intermolekuláris távolság-meghatározások rotor-szinkronizált MAS-mérésekkel; mikro- és mezopörös anyagok (pl. zeolitok) multinukleáris (^{29}Si és ^{27}Al) NMR-rel történő vizsgálata; különleges tulajdonságú nanoszerkezetű bevonatok és felületi kémiail problémák vizsgálata szilárd NMR-technikával;
- szintetikus polimerek makroszkópikus szerkezeti sajátságainak vizsgálata multinukleáris szilárd NMR-módszerekkel, fázissszeparált kotérhálós rendszerekben a nanométeres tartományba eső fázisok méretének és szerkezetének meghatározása ^1H spin-diffúziós mérésekkel.



Műszaki paraméterek:

- aktiv árnyékolású, keskeny furatú (54 mm), szupravezető mágnes rezgésmentesített lábakkal; az 5 gauss térről határa radiális irányban: 1 m;
- 40 csatornás térfinomító rendszer (shims); 5 rádiófrekvenciás csatorna gerjesztő, lecsatolási és formázott pulzusok lehetőségével; két protonerősítő (800 W, 100W), háromszélessávú erősítő (300W);
- háromaxisú XYZ gradiens erősítő (30, 30, 60 gauss/cm);
- mérőfejek:
 - tripla hangolható inverz $^{1}\text{H}^{13}\text{C}\{\text{X}\}/\text{X}^{15}\text{N}-^{31}\text{P}$ -XYZ háromaxisú gradiens mérőfej,
 - inverz tripla $^{1}\text{H}^{19}\text{F}^{13}\text{C}-\text{Z}$ gradiens fluor mérőfej,
 - duál $^{15}\text{N}-^{31}\text{P}/\{^{1}\text{H}-^{19}\text{F}\}-\text{Z}$ gradiens rutin mérőfej a szénkeres, két szilárd mérőfej a mágikus szögben történő forgatás (MAS) lehetőségével;
 - tripla hangolható HXY Chemagnetics MAS 9 kHz (*ca.* 160 μl mintatér fogat),
 - tripla hangolható HXY Chemagnetics MAS 25 kHz (*ca.* 22 μl mintatér fogat), ceruza rotorokkal; a lebegtető és forgató gázoktól elkülönített hőmérésleti gázszabályozással; kézi (nem automatizált) mintacserevel;
 - a ^{15}N rezonanciafrekvencia alatti magok detektálhatóságával;
- mérési hőméréslet tartomány (-85 °C-tól +100 °C-ig) FTS-SYSTEMS hőméréslet előkondicionáló egységgel;
- gázellátás (forgatás, hűtés, öblítés, kiemelés stb.) 4 m^3 -es párolgó cseppfolyós nitrogén forrásból (10 bar max., 300 L/perc feletti áramlással);
- SunBlade 2500 munkaállomás Solaris 9 operációs rendszerrel, VnmrJ 2.1B verziós számú NMR mérőszoftver színes lézernyomtatóval.

Lézerspektroszkópiai Laboratórium

ICCD detektor DH720-18U-03 (érzékenyített CCD detektor), Shamrock (SR-303I-A) rácsos spektrográf, kiegészítő berendezések (Andor Technologies Ltd.)

A műszer speciális lehetőségei a következők:



- kiemelkedő (majdnem egyfotonos) optikai érzékenység,
- nagyon finom időbeli felbontás (2 nanoszekundum),
- az optikai leképező spektrográf nagy spektroszkópiai felbonása (1 Angström körül), széles spektrumtartomány (190 és 900 nm között),
- lehetőség igen gyors fotografiára (plazmafolyamatok időbeli felbontású leképezése),
- modern rendszerkezelő és adatsfeldolgozó szoftver (Andor MCD).



A berendezéssel mód nyílik:

- lézerrel keltett plazmák igényes spektroszkópiai vizsgálataira, így például lézeres szénmanocső-növesztés spektroszkópiai diagnosztikájára;

- érzékeny és gyors módszerrel nehézfémnyomok kimutatására;
- lézer-testsövet kölcsönhatások spektroszkópiai analizisére;
- szénplazma diagnosztikai vizsgálatokra.

Tömegspektrometria Osztály

QTOF Premier tömegspektrométer (Waters Co.)

A Waters cég QTOF Premier műszere a tömegspektrometria kutatásokban technológiai áttörést jelent. A készülék jellemzője a nagy érzékenység, a nagy felbontás, a széles mérési tömegtartomány és a kiváló tandem tömegspektrometria képesség, amiknek az alapján a műszer változatos kutatási feladatok megoldására sikkerrel használható. Különösen fontos, hogy a fenti kedvező sajátosságok együttesen is megvalósíthatóak (pl. nagy érzékenységű HPLC-MS/MS vizsgálat nagy felbontás mellett). A beszerzett tömegspektrométer a maga nemében egyedülálló; mind a tömegmérés pontosságában, mind a dinamikus tartományban lényeges előrelépést jelent. Kiválóan megfelel összetett keverékek jellemzésére, azonosítására és mennyiségi elemzésére, fontos szempont, hogy a szokásosnál kevesebb mintaelőkészítést igényel. A készülék HPLC-hez van csatolva (elektrospray és APCI-ionizációs módban is használható), a MALDI-ionizáció off-line módban szintén elérhető.



Az új készülék számos területen biztosít magas színvonalú kutatási lehetőséget, többek között gyógyszerkémiai, biokémiai (pl. biomarkerek, proteomika, metabolit kutatások), orvosi-kémiai és klinikai alkalmazásokban.

Műszaki paraméterek:

- felbontás: 18.000,
- tömeg/töltés (m/z) tartomány: 8.000/32.000 (általános/csak TOF-módban használva),
- tömegpontosság: jobb, mint 3 ppm,
- ES, APCI és MALDI ionizáció,
- on-line kapcsolás HPLC-hez.

Quattro micro-típusú tömegspektrométer

A Waters cég *Quattro micro API* típusú készüléke a nagy preciziós tandem kvadrupól-tömeganalizátor technikát a lehető legkisebb helyen valósítja meg anélkül, hogy az analitikai teljesítőképesség bármiféle hátrányt szenvedne. A tandem tömegspektrometria (MS/MS), olyan technika, amelyre manapság az analitikusok egyre nagyobb mértékben támaszkodnak, hogy pontos eredményeket kapjanak; pl. a gyógyszerkutatásban, a környezetvédelemben vagy a klinikai kémiában. Az újonnan beszerzett készülékben a hagyományos kvadrupól ütközési cellát hexapollal helyettesítették, hogy a jobb ionfókuszálás és

áteresztőképesség révén a prekurzorion-szkennelést igénylő kísérleteknél még kiválóbb érzékenység és felbontás legyen elérhető. A berendezésben egy ún. ZSpray kettős ortogonális mintabeeresztő rendszert alkalmaztak, mely igen nagy érzékenységet és folyamatosságot biztosít. Az ortogonális mintabeeresztő rendszer első része kivételes toleranciát mutat a biológiai- és a környezetvédelmi mintákkal, valamint a nem-illékony pufferekkel szemben. Az ortogonális rendszer második része pedig a spraynek (vizsgált mintának) nagyobb részét engedi át a tömegspektrométerbe anélkül, hogy a vákuum-rendszer iránti követelményeken enyhíteni kellene. A forrásnál történő ütközéses aktivált disszociáció (Collision Induced Dissociation, CID) fragmentációs (szerkezeti) információkat szolgáltat.

A beszerzett készülék az ún. Embedded Personal Computer Acquisition rendszert (EPCAST™) és a QuanOptimize programot használja. Az előbbi az „intelligens” adatgyűjtéshez, valamint a dinamikus készülékirányításhoz használatos, mely egyedülálló rugalmasságot ad az összetett minták automatikus kiértékeléséhez azáltal, hogy egy kromatográfiás futás során folyamatosan rögzíti az áttekintő (tipikus) tömegspektrumokat, és azonnal azonosítja az MS-MS értékelésre váró ionokat. Az utóbb említett QuanOptimize programot nagy és kis laboratóriumokban egyaránt használják a módszerfejlesztés folyamatának automatizálásához, ami nagyszámú vegyület szűrésére, valamint egy esetleges új szennyeződés kvantitatív meghatározására használható módszer gyors kifejlesztésére is alkalmas. Ez a program automatikusan minden egyes vegyületre meghatározza a lehető legalkalmasabb módszert, legyen az ESI vagy APCI ionizáció, pozitív vagy negatív mód, majd ezután elvégzi a minta kvantitatív kiértékelését, és az eredmények alapján jelentést ad.

Az új berendezés különösen alkalmas gyógyszergyári, biokémiai (pl. proteomika, metabolit-kutatás), orvosi és klinikai minták mérésére. E technológia segítségével lehetővé válik, hogy nagyszámú klinikai minta szűrését, továbbá metabolitok azonosítását és szerkezetük meghatározását is elvégezzük.

Műszaki paraméterek:

- tömeg/töltés (m/z) tartomány: 2040,
- felbontás: egységnyi,
- ESI és APCI ionizáció.



Molekuláspektroszkópiai Osztály



FTS-7000 Stingray típusú infravörös multidetektoros mikroszkóp rendszer

A spektrométer/mikroszkóp konfiguráció az első ilyen típusú mérőberendezés Magyarországon.

A készülék *speciális mérési lehetőségeket nyújt, így pl. „step-scan” üzemmódban fotoakusztikus spektroszkópiával mélységi profilvizsgálat végezhető, dinamikus, dikroikus polimernyújtás, spektroelektrokémiai és egyéb időfelbontásos spektroszkópiai*

mérések valósíthatók meg. Nagysebességű kinetikus kísérletek, mint pl. polimerek olvadása, továbbá gyors UV-kezelések, környezeti gázanalizisek stb. szintén elvégezhetők.

A berendezés *orvosi biológiai alkalmazhatósága jelentős. A szövetek különböző helyeinek infravörös spektruma eltérő lehet, esetenként a különböző sejt típusok is megkülönböztethetők. Ez a körülmény lehetőséget nyújt rákos sejtek jelenlétének bizonyítására. Az egészséges és a beteg szövetek, ill. sejtek általában nagy biztonsággal megkülönböztethetők.*

A készülék *ipari alkalmazásokra is lehetőséget ad. A szennyezőanyagok vagy az anyagok öregedésének vizsgálata révén, többek között a félvezető iparban, a nanotechnológiában, a katalízisben, a korróziós folyamatoknál, felületi bevonatok, ill. vékonyrétegek stb. vizsgálatánál, fontos információkat kaphatunk.*

A kémiai kutatásokban keverékek, emulziók, diszperziók, szerves és szervetlen heterogén minták viszonylag egyszerűen analizálhatók és megjeleníthetők – még olyan alkotók is, melyeknek a látható tartományban működő mikroszkóp alatt felismerhetetlenül kis kontrasztjuk van (pl. a polimer minták). Mivel minden alkotóra jellemző az infravörös fény elnyelése, az infravörösspektroszkópiai leképezés hiteles jellemzést ad, minden különösebb mintaelőkészítés nélkül, a mikro- és makroszkópikus minták kémiai összetevőiről.

Műszaki paraméterek:

Spektrométer

- Az interferométer kiemelkedően nagy optikai fényerejű, rendkívül gyors mérési sebességű, nagy érzékenységű és igen stabil.
- A „step-scan” üzemmód lehetővé teszi dinamikusan változó folyamatok vizsgálatát, melyek időbeni lefolyása gyorsabb annál, mint egy hagyományos spektrométerrel regisztrált színkép felvételének ideje.
- Az FTS-7000 berendezés igen változatos dinamikus tartománnal rendelkezik, 1 sec/lépés-től kis sebességnél akár 250 sec/lépés-ig működtethető. Az interferométer mozgó tükrének pontossága step-scan üzemmódban kisebb, mint 0,6 nm. Kinetikus időfelbontásos üzemmódban, 16 cm⁻¹ spektrális felbontásnál a felvételi sebesség több mint 90 spektrum/sec.

- A berendezés képes rapid scan üzemmódban is működni valamennyi optikai feltéttel és detektorral. A detektorok optimális válaszidejéhez a tükörsebesség $0,16 - 2,56 \text{ cm/sec}$ között változtatható. A csatlakoztatható detektorok: A fotoakusztikus, DTGS, PbSe, InSb, szilicium, PMT, HgCdTe.
- A beépített DSP3™ (Digital Signal Processing) szoftver helyettesíti a speciális mérőszekhez szükséges bonyolult elektronikát (pl. log-in erősítőket stb.), jelentős mértékben növelve a hatékonyságot és megkönnyítve az alkalmazást.
- Egyszerű használhatósága mellett a DSP3™ költségesökkentést is jelent, hiszen a külső elektronikai eszközökkel teljes mértékben feleslegessé teszi.
- Az optikai rendszer rendkívül stabilis, a tükör mozgását biztosító speciális légesapágy lehetővé teszi a preciz működést.
- Az interferométer dinamikus vezérlését piezokristályok végzik. A dinamikus vezérlés a tükör dőlésszögének és sebességének dinamikus vezérlését is lehetővé teszi.
- A rendszer 60° -os Michelson interferométere $2''$ -os átmérőjű appertúráról keresztül juttatja a 180 mW -os teljesítményt a mintára első fókuszba.
- A rendszer optikai felbontása (apodizáció nélkül) $0,075 \text{ cm}^{-1}$.

Mikroszkóp

- Az UMA-600 mikroszkóp a következő mértechnikákra képes: transzmissziós, reflexiós, diffúz reflexiós, mikro ATR és súrló szögű szinképi felvételek.
- A mikroszkópot változtatható optikájú belső videokamerával szerelték fel, a mintavételezést nagy numerikus appertúrájú, 15-szörös nagyítású Schwartschild-objektíven keresztül, vagy az ún. „open throat” elrendezéssel, valósíthatjuk meg, mely alkalmassá teszi nagy minták mérésére is.
- Az infravörös „Focal Plane Array Detector (Lancer™)”-t katonai, ill. csillagászati célokra fejlesztették ki, pl.: éjszakai látásra és termikus célkeresésre. A Lancer 64×64 pixeles, sík elrendezésű mátrixdetektor egyszerre készít el az infravörös szinképet a 4096 képpontról.
- A leképező rendszer percek alatt egyidejűleg jellemzi a minta kémiai összetételét, a domén szerkezetét és kémiai felépítését.
- A legkisebb minta mérete, avagy a látómező: $350 \times 350 \mu\text{m}$, az ún. „non-mosaic” üzemmódban. A 64×64 pixeles mátrix esetében a laterális felbontás $5,5 \times 5,5 \mu\text{m}$. Az IR Zoom mód alkalmazásával a mintavételezési terület akár $700 \times 700 \mu\text{m}$ -re vagy nagyobbra növelhető.
- A 64×64 pixeles MCT detektor 8 cm^{-1} -es spektrális felbontás mellett „rapid scan” üzemmódban $1,44 \text{ sec}$ alatt készít el a felvételeket. Ez a mérés, a 4096 spektrum felvétele „egyszerű detektoros mikroszkóppal” körülbelül 16-20 órát venne igénybe.
- A spektrométer motorizált kettős appertúra rendszere az FTIR emissziós, valamint a Raman-spektrométer feltéttel való méréseket, ill. kiegészítéseket teszi lehetővé.
- A fémracsos fényosztó ($600-20 \text{ cm}^{-1}$), a nagynyomású higanygőz fényforrás és a Peltier-hűtésű polietilén ablakos DTGS-detektor segítségével a távoli infravörös tartományban is dolgozhatunk. Ez a kialakítás jelenleg a legjobb szárazlevegő-öblítéssel működő távoli-infravörös rendszer Magyarországon.

ESR Laboratórium

Bruker E 560D-220 DICE CW típusú ENDOR/TRIPLE spektrométer

Az ENDOR – elektron-magkettősrezonancia – technika kombinálja az NMR nagy felbontását és magszelektivitását az ESR nagy érzékenységével. A mérés elve az, hogy nagy mikrohullámú teljesítménnyel telítünk egy ESR-átmennetet, és egy RF(rádió-frekvenciás)-térségsegével csökkentjük a telítést. A telített ESR-jel telítettsége csökken, amikor az RF-térrel áthaladunk egy magrezonancia feltételen, és az ESR-abszorpció növekedni fog. Az ESR-abszorpció magrezonancia hatására létrejövő növekedését nevezzük ENDOR-nak. A párosítatlan elektron és az atomok magspinje által létrehozott mágneses terek közötti csatolódás a hiperfinom kölcsönhatás. A hiperfinom csatlások információt szolgáltatnak a gyököt vagy a komplexet felépítő atomok számáról, minőségéről, a párosítatlan elektronról való távolságról és a spinsűrűségről a mag helyén.



A mérési technika előnyei:

- lényegesen jobb felbontás,
- a párosítatlan elektronnal csatoló magok g-értékei (g_{\parallel}) mérhetőek,
- a hiperfinom csatolási állandók előjele is meghatározható (TRIPLE),
- sokkal egyszerűbb spektrumszerkezet,
- kvázi egykristály spektrum.

Hátrányok:

- az ENDOR-mérések nehezebben kivitelezhetők mint egy egyszerű ESR- vagy NMR-mérés,
- ENDOR-mérésekből nem határozható meg az ekvivalens magok száma.



Műszaki paraméterek:

- cseppfolyós nitrogén hőmérséklet-szabályozó (100-700 K),
- rapid-scan egység 2,5 ms - 3 s sweep idő,
- egytengelyű goniométer,
- ENDOR/TRIPLE egység,
 - Rf-tartomány: 1-200 MHz,
 - Rf-teljesítmény: 150 W,
 - hőmérséklet-tartomány 100-300 K.

Röntgendiffrakciós Osztály

Rigaku R-AXIS RAPID képlemezű egykristály diffraktométer X-Stream 2000 alacsony-hőmérsékletű berendezéssel

A készüléket -60° -tól $+144^\circ$ -ig terjedő hőmérséklettartományban egy detektorállásban mérő, sugárzásfüggetlen, fényérzékeny tárolófoszfor széles hullámhossztartományban teszi alkalmazhatóvá. Az R-AXIS RAPID kompakt térdetektor annyira flexibilis, hogy minőségi kompromisszumok nélkül is több készüléket helyettesít. A RAPID egyetlen, görbe felületű detektorának képlemeze (imaging plate, IP) a fehérje-krisztallográfia legsikeresebb detektora az elmúlt évtizedben. Az IP-nek számos előnye van a többi Röntgensugár-detektorral szemben. A nagy hasznos felület és a széles dinamikus tartomány következtében tizes és százezeres beütésszámban reflexiók ugyanazon a fölvételeken mérhetők a berendezéssel anélkül, hogy a detektor telítődése bekövetkezne. A képlemezeknek nincs szükségük hűtésre, nincs sötétáramuk, nincs szükség kalibrálásra az eltérő vezetőoldali átalakítók okozta aberrációk miatt, ami természetes a CCD-rendszerekben. Hihetetlennél érzékenyek, ugyanakkor ellenállók a hőmérsékleti változásokkal szemben. A készüléket elsősorban Cu-sugárzással használjuk, de gyorsan cserélhető Mo-, Ag- vagy Co-anódú csövekre is. A legkisebb szerves egykristály, amelyet eddig mértünk, $20 \times 20 \times 250\mu$ méretű, két nagyságrenddel kisebb az eddig alkalmazottaknál. A leggyorsabb adatgyűjtési és szerkezetmeghatározási idő (egy tiazepam-számarák egykristályról): 2,5 óra volt. A képlemezű térdetektoros készülék jellemzőit összefoglalva, kiemelhetők a teljesítmény meghatározó tényezői: a reciprok-tér direkt rögzítése (sebesség), a kis kristályméret és az alacsonyhőmérsékletű gáz helyszíni előállítása.



A készülék alkalmazási területei a következők:

- "kismolekulás" egykristály-diffrakció *kis-* méretű vagy bomlékony minta esetében,
- gyors szerkezet-meghatározás ($t \sim 2h$),
- makromolekulák egykristály-diffrakciójá,
- általános célú pordiffrakció (kis térfogat).

RENDEZVÉNYEK, ELŐADÁSOK

Kutatóközponti szemináriumok

Szerves Kémiai Szemináriumok:

2005. június 20.

Szabó Pál: Tömegspektrometria a biomolekuláris kémia szolgálatában

Soós Tibor: Szintetikus módszerek fejlesztése: Néhány újszerű megközelítés

2005. szeptember 26.

Filák László: Új heterociklusokhoz vezető átalakítások

Vakulya Benedek: Tiourea organokatalizátorok és alkalmazásaik

2005. november 7.

Moldvai István, Temesváriné Major Eszter, Gácsné Baitz Eszter, Incze Mária, Dörnyei Gábor és Szántay Csaba: A (+)-lizergsav szintézise

2005. november 28.

Szabó Pál: Mit kaphatunk ma egy modern LC/MS rendszertől?

Vaskó Ágnes Gyöngyvér: Benzoësav származékok enzimkatalizált enantioszelektív dihidroxilezése és továbbalakítása

2005. december 12.

Banka Zoltán: Izotóppal jelzett vegyületek szintézise

Sipos Szabolcs: Kisérletek formil szénglikozidok szintézisére

Molnár Tünde: Átfedő gamma-hidroxibutirát és szukcinát kötöhely ismertetése a Nucleus Accumbensben

Lengyel György: ABC-transzporterek gyógyszer-interakciókban játszott szerepének tanulmányozása primer hepatocita szendvicskultúrában

2006. február 20.

Tugyi Regina: Peptidek kémiai módosításának hatása az enzimatikus stabilitásra humán szérumban és patkány máj lizoszómapréparátumban

Csiki Zsuzsanna: Heparánáz inhibitorok: azacukor-tartalmú heparin diszacharidok szintézise

2006. március 13.

Szabó Pál: A tömegspektrometriás szerkezetfelderítés eszközei

Szabó Bernadett: Multidrog rezisztencia tumorok fotodinamikus terápiájában

2006. május 8. Dalicsek Zoltán: Fluoros oxazaborolidin katalizátorok szintézise és alkalmazása

Vaskó Ágnes Gyöngyvér: Új cinnolin származékok szintézise és továbbalakítása

2006. június 12.

Moldvai István, Gáti Tamás, ifj. Szántay Csaba és Szántay Csaba: A (-)-vinkapuszin első szintézise

Sipos Ferenc: Új, 5-szubsztituált-uracil PNS monomerek szintézise

Neurokémiai Szemináriumok:

2005. október 17.

A Szerves Kémiai és a Neurokémiai Szemináriumok együttes ülése:

Böcskei Zsolt (Sanofi-Synthelabo-Aventis/Strasbourg): Fehérjekrissztallográfia a gyógyszertervezésben

2006. február 10.

Molnár Tünde, Kútiné Fekete Erzsébet, Kardos Julianna, Simon-Trompler Edit, Palkovits Miklós, Emri Zsuzsa: Specifikus gamma-hydroxivajsav (GHB) kötőhely farmakológiai jellemzése patkányban, human Nucleus Accumbensben és Globus Pallidusban

Héja László, Nyitrai Gabriella, Kékesi Katalin, Palkovits Miklós, Kardos Julianna: Glutaminsav-szenzitív GABA transzport

Antal Károly, Emri Zsuzsa: Az extracelluláris glutaminsav-koncentráció növekedésének hatása a talamokortikális információfeldolgozásra

Szárics Éva, Lasztóczki Bálint, Kardos Julianna: Ciklotiazid és a GABAA receptorok kölcsönhatása

Orbán-Kis Károly, Karacs Kinga, Antal Károly, Kéri György, Szilágyi Tibor, Emri Zsuzsa: Hippokampális szinaptikus áramok és az intracelluláris Ca^{2+} ion koncentráció szabályozása szomatosztatin analógokkal in vitro

Simon Ágnes, Kardos Julianna: TT-232 és szomatosztatinII receptorok kötődési kölcsönhatásának modellezése

Barabás Péter, Simon Ágnes, Kardos Julianna: A fénvválasz növelése foszfodiészteráz6 inhibitorokkal: egy paradox hatás mechanizmusa

2006. március 10.

Emri Zsuzsa, Molnár Tünde, Antal Károly, Timothy Gould, Leresche Nathalie, Cervo Luigi, Parri Rheinelt, Crunelli Vincenzo: Gamma-hidroxi vajsav hatásai a Nucleus Accumbens sejtjeire

2006. március 17. *Kusnyerik Ákos* (Szent István Kórház, Szemészeti Osztály): Retina implantátumok

2006. április 7. *Tompa Péter* (MTA Enzimológiai Intézet): Rendezetlen fehérjék: a szerkezet-funkció paradigma újragondolása

Anyag- és Környezetkémiai Szemináriumok:

2005. szeptember 14.

Mészáros Erika: Lignocellulöz tartalmú anyagok vizsgálata termikus módszerekkel (PhD-értekezés házi védése, az MTA Termoanalitikai Munkabizottsággal közös ülés)

2005. október 11.

Lendvayné Györik Gabriella: Vizhígítású festékbevonatok elektrokémiai vizsgálata

Mészáros Gábor: Nanodrótok és nanorések elektrokémiai előállítása

2005. november 8.

Mink György: A Hidasi Kisérleti Víztisztító Üzem telepítése és működése

Szabó Sándor: Fémek idegen fémeken történő adszorpciójának vizsgálata elektrokémiai módszerekkel

2005. december 13.

Föglein Katalin, Szépvölgyi János, Gubicza Jenő: Milyen tényezőktől függ a szénkihozatal a freonok termikus plazmabeli bontása során?

Gál Loránd, Mohai Ilona, Károly Zoltán, Szépvölgyi János: ZnO és Zn-ferrit nanodiszperz kerámiaporok plazmatermikus szintézise és vizsgálata

Horváth Tibor: A Környezetvédelmi Laboratórium működése, akkreditált tevékenysége a környezetvédelmi analitikában

2006. február 14.

Bertóti Imre: A célok és a PIII módosítás nitrogén-plazmában

Tóth András: N_2 , H_2 és He plazmás PIII módosítás összehasonlító vizsgálata

2006. március 14.

Bozi János: Égésgátló tartalmú polikarbonátok höbomlása

Fodor Csaba: Poli(vinil-imidazol) alapú új amfifil polimer kotérhálók

2006. április 11.

Klébert Szilvia: Cellulóz-acetát lágyítása kaprolaktonnal, szerkezet és tulajdonság összefüggések

Százdi László: Rétegszilikátor felületi jellemzőinek hatása polimer nanokompozitok tulajdonságaira

Móczó János: Faliszt töltőanyag-tartalmú PP kompozitok: adhézió, deformáció, tönkremenetel

Renner Károly: Mikromechanikai deformációs folyamatok poliamid nanokompozitokban

2006. május 16.

Károly Zoltán: Égetőmű pernyék üvegesítése ivplazmával

Feczkó Tivadar: Szabályozott hatóanyag leadású kompozit részecskék előállítása

Szőcs-Bíró Emese: Nanoszerkezetű biokatalizátor hordozó részecskék előállítása és funkcionálisítása

2006. június 13.

Haraszti Márton: Egy új anyag születése: amfifil polielektrolit kotérhálók (PhD házivédés a Polimer Kémiai és Anyagtudományi Osztállyal közös szervezésben)

Polímerkémiai és Anyagtudományi Szemináriumok:

2006. március 28.

Az Anyagtudományi és Technológiai Komplex Bizottság kihelyezett ülése

Szépvölgyi János: Az MTA KK AKI bemutatása

Moczó János, Pukánszky Béla: CaCO₃-al töltött polipropilén mikromechanikai deformációjának vizsgálata

Iván Béla, Domján Attila, Erdődi Gábor, Fónagy Tamás, Groh Werner Péter, Haraszti Márton, Mezey Péter, Szabó Sándor: Új elágazásos és nanoszerkezetű polimerek

Bertóti Imre, Tóth András, Mohai Miklós, Ujvári Tamás: Ultra-nagy molekulatömegű polietilén felületmódosítása plazmaimmerziós ionimplantációval: az összetétel, a szerkezet és a nanomechanikai tulajdonságok változása

Mészáros Gábor, Lengyel Béla, Pajkossy Tamás: Nanodrótok, nanorések és molekuláris elektrokémia

Mohai Ilona, Szépvölgyi János: Különleges nano- és mikroszemcsés anyagok előállítása radiofrekvenciás plazmában

2006. június 13.

Haraszti Márton: Egy új anyag születése: Amfifil polielektrolit kotérhálók (PhD házivédés); bíráló: Prof. Joseph P. Kennedy (The University of Akron, USA)

Fodor Csaba: N-vinil-imidazol tartalmú amfifil polímer kotérhálók (diplomamunka bemutatása)

Elválasztástechnikai Szemináriumok:

2006. január 26.

Kremmer Tibor: Az elválasztástudományi és technika szemlélete, elméleti alapjai

2006. március 1.

Kremmer Tibor: Az oszlopkromatográfiás töltetek fejlődése és újabb eredményei. A korábbi folyadékkromatográfiás módszerek elmélete és gyakorlata

2006. március 30.

Kremmer Tibor: A kötött és fordított fázisú folyadékkromatográfia elmélete és alkalmazásai. Az ioncserélő folyadékkromatográfia elmélete és gyakorlata

2006. április 27.

Kremmer Tibor: Hidrofób kölcsönhatású kromatográfia és alkalmazásai. Az affinitási kromatográfia és alkalmazásai

2006. június 1.

Kremmer Tibor: Speciális kromatográfiás technikák (kromatofokuszálás, fémzárványkomplex). Az elektroforézis-elektromigrációs módszerek elmélete és gyakorlata

2006. június 29.

Kremmer Tibor: A kapilláris elektroforézis elmélete és módszerei. A centrifugálás – ultracentrifugálás elmélete és módszerei

Szerkezeti Kémiai Szemináriumok:

2005. szeptember 27.

Az újonnan belépő munkatársak és PhD-ösztöndíjasok kutatási témáinak bemutatása
Gombás Veronika PhD-hallgató: Kemometriai módszerek adaptálása az IR és Raman spektroszkópia biológiai és orvosi alkalmazásaihoz (témavezető: Mink János)

Megyesi Mónika PhD-hallgató: Fény hatására végbenyomott folyamatok önszerveződő rendszerekben (témavezető: Biczók László)

Dr. Tőke Orsolya tud. munkatárs: A szilárd NMR biológiai lehetőségei

Király Péter tud. munkatárs: Fémorganikus komplexek oldatdinamikája (témavezető: Tárkányi Gábor)

Kovács Gergely és *Nádasdi Rebeka* PhD-hallgatók: Karbonilvegyületek légkörkémiaja (témavezető: Dóbé Sándor)

Bálint Szabolcs PhD-hallgató: Átmeneti fémkomplexek röntgendiffrakciós vizsgálata oldatokban (témavezető: Radnai Tamás)

Krenyácz Judit PhD-hallgató: Tömegspektrometria alkalmazása az orvosi diagnosztikában (témavezető: Vékey Károly)

Czuczy Noémi PhD-hallgató: DESI ionforrás fejlesztése és orvosi célra történő alkalmazása (témavezető: Vékey Károly és Takáts Zoltán)

2005. október 11.

Rockenbauer Antal: ESR-spektroszkópia a biológiában és a szerkezetkutatásban

2005. október 18.

Radnai Tamás: Folyadékszerkezet-kutatások: Szolvatáció, komplexképződés - Lehetséges biológiai és anyagtudományi vonatkozások

2005. november 8.

Pápai Imre: Bifunkciós organokatalizátorok működése

2005. december 6.

Dóbé Sándor: Komplex elemi reakciók kinetikája. Reakciókinetikai kutatások lézerspektroszkópiai módszerek alkalmazásával

2006. január 10.

Nemes László: Lézerrel keltett szénplazmák analizise spektroszkópiai módszerekkel

2006. január 31.

Deák Andrea: Prológus az aranyvegyületek kémiájához

2006. február 14.

Vékey Károly: Új, tömegspektrometriai laboratórium kialakítása: tervez, lehetőségek

2006. március 14.

Besenyei Gábor: Szerkezet és reakciókésztség. A kémiai problémák egyik lehetséges megközelítési módja

2006. április 4.

Kubinyi Miklós: Fotoaktiv szupramolekuláris rendszerek

2006. május 9.

Keszei Ernő (ELTE TTK Kémiai Intézet Fizikai-Kémiai Tanszék): DNS-károsodás és -javítás ultragyors dinamikája

2006. június 13.

Keresztury Gábor: Eredmények, új lehetőségek és megoldandó feladatok a rezgési spektrumok értelmezésében

Tömegspektrometriai Szemináriumok:

2005. június 15.

Virág István, Mihucz G. Viktor (ELTE TTK): Nagyfelbontású, induktív csatolású plazma-tömegspektrometria környezetkémiai alkalmazásai

2005. július 11.

Jakab Annamária: Humán plazma szterolprofiljának vizsgálata diagnosztikai célból

Felületkémiai és Katalízis-kutatási Szemináriumok:

2006. február 17.

Margitsfalvi József: A Szerves Katalízis Osztály tudományos tevékenységének bemutatása

2006. március 24.

Kálmán Erika: A Felületmódosítás és Nanoszerkezetek Osztály tudományos tevékenységének bemutatása

2006. április 21.

Simándi László: A Biomimetikus Katalízis Osztály tudományos tevékenységének bemutatása

Keszthelyi Tamás: A Nanoszerkezetű Fémkatalizátorok Laboratórium tudományos tevékenységének bemutatása

2006. május 5.

Valyon József: A Mikro- és Mezopórusos Anyagok Osztály tudományos tevékenységének általános bemutatása

Pálné Borbény Gabriella: Új mikro- és mezopórusos anyagok

Lónyi Ferenc: In situ és operando DRIFTS és DRIFTS-MS vizsgálatok a heterogén katalízisben

2006. június 2.

Új energiaforrások – Tüzelőanyag-cellák és hidrogéntárolás

Lakatosné Varsányi Magda (Bay Zoltán Intézet): Bevezető előadás

Valyon József: A tématerület irodalmi áttekintése

Tudományos rendezvények a Kutatóközpontban

2006. április 24-25-én került sor a Kutatóközpont **IX. Doktori Kémiai Iskolájára**. A DOKI ez évi programja a következő volt:

Köszöntő: Pálunkás Gábor

Megyesi Mónika: Szupramolekuláris komplexképződés alkalmazása berberin alkaloid kímutatására

Mezey Péter: Poli(N,N-dimetil-akrilamid)-l-poliiizobutilén amfifil polimer kotérhálók szerkezetének vizsgálata és nanoreaktorként történő alkalmazásuk

Szabó L. Sándor: Nanofázis morfológiájú poli(dimethyl-acrylamid)- 1-polí(dimethyl-sziloxán) amfifil kotérhálók

Haraszti Márton: Polimetakrilsav-l-poliiizobutilén amfifil polimer kotérhálók

Pálfi Viktória: Olefin végű poliiizobutilének szintézise és ozonolizise

Kaleta Zoltán: Fluoros Lawesson-reagens előállítása és használata

Szigyártó Imola: Metalloenzim modellezése átmenetisém komplexekkel

Gábor Tamás: Szén nanocsövek felületmódosítása

Gergely András: Szén nanocsövek kémiai módosítása

Trif László: Nanoferritek előállítása és szerkezetvizsgálata

Paszternák András: Foszfonát-réteg képződési kinetikájának tanulmányozása atomierő-mikroszkóppal

Molnár Nikoletta: Alkiliolokkal módosított arany nanorészecsékkel borított szenzorok préparálása és alkalmazása szerves oldószergőzök detektálására

Bálint Szabolcs: Kalciumionok vizes és metanolos oldatainak vizsgálata – diffrakciós és szimulációs tanulmány

Besenyei Gábor: Olefinek metatézise. A 2005. évi kémiai Nobel-díj elméleti és gyakorlati háttere

Filák László: Új, izokinolinnal kondenzált heterociklusokhoz vezető átalakítások

Vaskó Ágnes Gyöngyvér: Új cinnolin származékok szintézise és továbbalakítása

Nádasdi Rebeka: 2-butanon és acetona-d₆ fotobomlási kvantumhatásfokának meghatározása exciplex-lézer fotolizissel

Sipos Ferenc: PNS-monomerek szintézise Pd-katalizált keresztkapcsolások alkalmazásával

Kollár Márton: Mikro- és mezopörös, zeolit-tartalmú aluminoszilikát kompozit-katalizátorok előállítása és jellemzése

Somodi Ferenc: Önoxid promotor hatásának vizsgálata hordozós aranykatalizátorokon

Renner Károly: Mikromechanikai deformációs folyamatok poliamid rétegszilikát nanokompozitokban

Bagdi Kristóf: Poliuretan neuro-endovaszkuláris embolizáló anyag fejlesztése

Kőhalmy Krisztina: Dexametazon hatása a CYP1A1 induciójára patkány- és humán májsejtekben

Fodor Judit: Vas-poligalakturonátok in-vitro felszívódásvizsgálata

Sipos Szabolcs: C-glikozil aldehidek előállítása

Csiki Zsuzsánna: Nozil védőcsoport alkalmazása azacukor-tartalmú heparin diszacharidok szintézisénél

Osztrovszky Györgyi: Heparin oligoszacharidok szintézise: új, hatékony módszer iduronsav tioglikozidok segítségével

Darágics Katalin: Prion fehérjék kötödéséért felelős heparin tetraszacharid szintézise

- 2006. május 18-19-én rendeztük meg a **Kutatóközponti Tudományos Napokat**. A rendezvény lezárásaként tartott fogadás keretében Pál linkás Gábor a Kémiai Kutatóközpont főigazgatója adta át a Kutatóközpontban, ill. annak jogelőd intézményeiben, a kémia tudományának hosszú idön át történő kiemelkedően eredményes művelését, ill. az említettek érdekében kifejtett jelentős hatású tevékenységet elismerő 2006. évi

„PRO ARTE CHEMICA”

érmeket a *következő kutatók* részére:

- Bertóti Imre, az MTA Doktora,
- Kalló Dénes, az MTA Doktora,
- Kálmán Alajos, az MTA rendes tagja,
- Simonyi Miklós, az MTA Doktora.

A tudományos rendezvényen elhangzott előadások alapján a felkért Tudományos Zsűri két *kutatói díjat* és hat *fiatal kutatói díjat* osztott ki az alábbiak szerint:

Kutatói díjban részesült:

- Sági Gyula, Sipos Ferenc, Bajor Zoltán: Bázis-módositott PNS-monomerek szintézise, és
- Tálas Emilia, Margitfalvi József, Kristyán Sándor: „Merev vázas” cinchona alkaloid királis módositók sajáságos viselkedése piroszólósav-tileszter hidrogénezésében – című előadásáért.

Fiatal kutatói díjban részesült:

- Filák László, Riedl Zsuzsanna, Egyed Orsolya, Hajós György: Új, izokinolinnal kondenzált heterociklusokhoz vezető átalakítások,
- Kaleta Zoltán, Soós Tibor: Fluoros Lawesson-reagens előállítása és használata,
- Károly Zoltán, Szépvölgyi János: Égetőmű pernyék üvegesítése ivplazmával,
- Nagy Nóna Veronika, Fülöp Ferenc, Tóth Gábor, Plánkáné Szabó Terézia, Rockenbauer Antal, Korecz László: Koordinációs módok és konformációs egyensúlyok kétdimenziós ESR-spektroszkópiai vizsgálata aliciklusos β -aminosav származékok réz(II) komplexeinél,
- Tatai János, Fügedi Péter: Új szintézisstratégia heparin oligoszacharidok előállítására,
- Tóke Orsolya, Tugyi Regina, Uray Katalin, Hudecz Ferenc: Mucin fehérjékből származtatott szintetikus peptid-epitópok vizsgálata NMR-spektroszkópiával - című előadásáért.

A zsűri kiváló előadásukért külön **dicséretben** részesítette a következő kutatókat:

- Bakó Imre,
- Bencsura Ákos,
- Dalicsék Zoltán,
- Demeter Attila,
- Király Péter,
- Moldvai István,
- Molnár Tünde,
- Nagy Ildikó,
- Szalontai Gábor.

Egyéb tudományos rendezvények, előadások

- Pálinkás Gábor főigazgató meghívására **2005. június 9-én** Oláh György (1994. évi kémiai Nobel-díjas): "Bűszke vagyok kémikus létemre" címmel tartott előadást a Kutatóközpontban.
- **2005. június 13-án** rendezték meg a **Hungarian Network of Excellent Centers on Nanosciences** (HUNN) keretében az "Awareness and Training Course" konferenciát. A rendezvény fő szervezője Kálmán Erika volt.
- **2005. június 23-24-én** a **Bioorganic Chemistry Meeting-2**, az Európai Bizottság támogatásával szervezett konferencián a következők tartottak előadást a Kutatóközpont munkatársai közül: Hajós György, Simonyi Miklós, Fitov Ilona, Kardos Julianna, Szárics Éva, Simon Ágnes, Maksay Gábor, Sági Gyula.
- A **2005. augusztus 28-31.** között Hajdúszoboszlón megtartott **Conferentia Chemometrica 2005 Chemometrics VII** rendezvény társelnöke Héberger Károly volt. A Kutatóközpont részéről a következők tartottak előadást: Keresztfury Gábor, Héberger Károly, Nemes László, Vékey Károly.
- **2005. szeptember 11-13-án** rendezték meg az **International Symposium on Polymer Conetworks, Gels and Membranes** (PCN Symposium) című konferenciát, amelyen Iván Béla előadást tartott.
- **2005. október 24-26.** között tartották meg a **Carbon Materials –Theoretical and Experimental Aspects** című nemzetközi konferenciát, melynek szervezőbizottsági tagja Kálmán Erika, Lukovits István, Barlai Gábor, Kármánné Herr Francisca, Nagy Péter, Nemes László és Tolnai Gyula volt a Központ részéről. A szimpóziumot Pálinkás Gábor nyitotta meg. Nemes László, Mink János, Telegdi Judit és Lukovits István tartott előadást.
- **2005. október 26-28.:** A 'Cost 15' program keretében **Advanced Paramagnetic Resonance Methods in Molecular Biophysics** címmel rendeztek konferenciát, amelyen Rockenbauer Antal tartott előadást.
- **2005. november 2-án** az MTA Kémiai Tudományok Osztálya a *Magyar Tudomány Ünnepe* alkalmából **A Gyógyszerkutatás az egészség szolgálatában** címmel rendezett tudományos előadóülést, amelyen Kálmán Alajos tartott előadást.
- **2005. november 3-án és 4-én** rendezték meg a **Center of Excellence** pályázat zárókonferenciáját **Novel Pharmacophores with New Functions** címmel. A rendezvényt Hajós György nyitotta meg. A Kutatóközpont munkatársai közül: Kardos Julianna, Simonyi Miklós, Maksay Gábor, Vékey Károly, Vereczkey László, Jakus Judit, Hajós György, Nagy Ildikó, Soós Tibor és Fügedi Péter tartott előadást.
- **2005. november 22.**
A **Magyar Tudomány Ünnepe** alkalmából tartott előadói délutánon:
Vékey Károly: Glikoproteinek szerkezetvizsgálata és ennek jelentősége az orvosi gyakorlatban,
Mink János: Az infravörös és Raman-spektroszkópia orvosi alkalmazásai,

Vidóczy Tamás: Fotokémia a gyakorlatban: a fotodinámiás terápia bevezetése Magyarországon tartott előadást.

- **2006. május 10-én** az MTA Kémiai Tudományok Osztálya a 2006. évi májusi közgyűléshez kapcsolódóan tudományos ülést tartott **Kémia a fenntartható fejlődés szolgálatában** címmel. A rendezvényen *Szépvölgyi János* és *Iván Béla* tartott előadást.
Szépvölgyi János, az MTA KK AKI igazgatója köszöntötte az ünnepeltet
Radványi György MTA MFA: Szén-alapú nanokompozitok fizikai tulajdonságai
Tóth József MTA ATOMKI: Felületi kémiai analízis nagy energia-feloldású REELS-EELD-XPS-XAES módszerekkel
Mészáros Tamás SZTE ÁOK: A felülettudomány néhány alkalmazása az orvosbiológiában
Tóth András MTA KK AKI: Szilícium-tartalmú DLC-rétegek felületkémiai és nanomechanikai tulajdonságai
- **2006. május 25-26-án** zajlott a **MediChem2** konferencia, amit *Pálinkás Gábor* főigazgató, *Szántay Csaba* konzorciumvezető és *Hajós György* koordinátor nyitott meg. A konferencián a Kutatóközpontból a következő kutatók tartottak előadást: *Kardos Julianne, Maksay Gábor, Kremmer Tibor, Vidóczy Tamás, Biczók László, Rockenbauer Antal, Riedl Zsuzsanna, Nagy Ildikó, Jemnitz Katalin, Fügedi Péter* és *Tőke Orsolya*.
- **2006. június 6-tól 11-ig** került megrendezésre az **International Scientific Advisory Board** előadóülése a következő programmal:
Gábor Tárkányi: Overview of the high-field NMR project
Károly Vékey: New projects and instruments for mass spectrometry
András Tóth: Development of human joint prosthesis of extended service life: modification of PE surfaces by ion beams
Szilvia Klébert: Polypropylene composites reinforced by natural fibers
János Szépvölgyi: Decomposition of hazardous wastes by arc plasma processing
György Mink: Purification of ground water contaminated by chlorobenzenes
Tibor Soós: Modern methods of organic synthesis, fluorous chemistry and organocatalysis
György Hajós: Synthesis and evaluation of MDR inhibitory compounds
Julianne Kardos: Transporter Explorer project
Gábor Maksay: Ionotropic GABA_A, glycine and 5-HT3 receptors: structure, binding, allosterism and activation
Erika Kálmán: Challenge of nanochemistry in material science – in the frame of EU projects
József L. Margitfalvi: Design of supported gold catalyst for preferential CO oxidation. A combinatorial approach
Magdolna R. Mihályi: Hydroconversion of paraffines over Ni-containing zeolites
József Valyon: Refuse or resource? Processing the waste of chelate iron ore enrichment plant of Rudabánya, Hungary
Zsuzsanna Veres: Primary cultures of hepatocytes in the study of drug involving transport proteins
Katalin Monostory: STEROLTALK: Cross-talk of sterol homeostasis and drug metabolism
Peter J. Stang (Guest lecture): Chemical publishing in the 21st century: Perspectives of a JACS editor

- **2005. február 9.:** A 2004. évi Issekutz-díj átadásának alkalmából rendezett tudományos ülésen *Vereczkey László* előadása hangzott el. "A gyógyszerkinetika és a metabolizmus vizsgálatok jelentősége a gyógyszerfejlesztésben" - címmel.
- **2006. június 15-én** rendezték meg a "HUNN – Hungarian Excellent Centers on Nanosciences" projekt keretében a "Magyar Nanohálózatok és az FP7" - elnevezésű összejövetelt, amelyen *Kálmán Erika* tartott előadást.

Egyéb rendezvények

- **2005. december 15-én** a Kutatóközpont fiatal énekesekből álló együttese, a *Chemical Singers* nagy sikerű karácsonyi koncertet adott.
- **2006. január 5-én** *Kmety Andrea* (szakinformatikus, MTA Könyvtár) tartott előadást "A Scopus adatbázis" - címmel.
- **2006. február 23-án** *Beck Mihály* "Parajelenségek és paratudományok" - című könyvről beszélgetett a szépszámú hallgatósággal.
- **2006. június 1-jén** *Dr. Henczi Mária* és *Zoltán Andrea* (Magyar Szabadalmi Hivatal) tájékoztató előadást tartott a találmányok bejelentéséről, az iparjogvédelemmel és az EU-csatlakozással összefüggő aktuális kérdésekről.

TUDOMÁNYOS ÉRTEKEZÉSEK VITÁI

PhD – értekezések

Munkahelyi viták

- **2005. augusztus 26.**
Rigó Timea: Langmuir-Blodgett filmekkel módosított szilárd felületek: Nanorétegek a korrózióvédelemben
- **2005. augusztus 30.**
Farkas Edit: Az aceton és az acetonilgyök néhány, légkörkémiailag fontos elemi reakciójának kinetikai vizsgálata
- **2005. október 25.**
Jenei Veronika: Intracellular regulation and pharmacological induction of cell adhesion
- **2005. december 13.**
Poór Benedek: Photoactive supramolecular devices
- **2006. február 2.**
Báthori Beáta Nikoletta: Triazin-vázú, C3-szimmetriájú gazdavegyületek szintézise és kristályszerkezetük meghatározása
- **2006. március 10.**
Mészáros Erika: Lignocellulóz-tartalmú anyagok vizsgálata termikus módszerekkel
- **2006. március 27.**
Bacsik Zoltán: FTIR-spektrometria alkalmazása gázok analizisére
- **2006. március 30.**
Kovács Gergely: Néhány fluor- és karbonilvegyület légköri lebomlásának reakciókinetikai és fotokémiai vizsgálata
- **2006. június 13.**
Haraszti Márton: Egy új anyag születése: amifil polielektrolit kotérhálók

Védések

- **2005. november 14.**
Bíró Timea: Receptor-ligandum kölcsönhatások: Az allosztérikus szabályozás szerepe
- **2005. december 15.**
Rigó Timea: Langmuir-Blodgett filmekkel módosított szilárd felületek: Nanorétegek a korrózióvédelemben
- **2005. december 19.**
Groh Werner Péter: Reakciókörülmények hatása izobutilén kvázielő karbokationos polimerizációjára

- **2006. január 30.**
Jenei Veronika: Intracellular regulation and pharmacological induction of cell adhesion
- **2006. február 3.**
Mohai Miklós: A kvantitatív röntgen-fotoelektron spektroszkópia módszereinek fejlesztése és alkalmazásai
- **2006. március 10.**
Mészáros Erika: Lignocellulóz tartalmú anyagok vizsgálata termikus módszerekkel
- **2006. március 29.**
Lasztóczki Bálint: Egy új kinazolon-3-alkil karbonsav származék antiepileptikus hatásának és hatásmechanizmusának vizsgálata
- **2006. június 19.**
Kovács Gergely: Néhány fluor- és karbonilvegyület légköri lebomlásának reakciókinetikai és fotokémiai vizsgálata
- **2006. június 20.**
Bacsik Zoltán: Gázok Fourier-transzformációs infravörös-spektrometriai analizise
- **2006. június 23.**
Báthori Beáta Nikoletta: Triazin vázú C_3 -szimmetriájú gazdavegyületek szintézise és krisztályszerkezetük meghatározása

MTA – doktori értekezések

- **2005. december 5.**
Riedl Zsuzsanna: Szintézisutak új polikondenzált heterociklusos rendszerekhez
- **2006. február 28.**
Demeter Attila: Relaxáció szerepe a fotofizikai folyamatokban: a kettős fluoreszcencia és a hatékony belső konverzió létrejöttének feltételei

KÜLFÖLDI ELŐADÓK

- **2005. május 19.**
Prof. François Diederich (Department of Chemistry and Applied Biosciences, Zürich and NCCR Nanoscale Science Center, Basel, Switzerland): Organic nanoscale chemistry: from switches with large molecular motions to gene transfection and to self-assembly on nanopatterned surfaces
- **2005. július 8.**
Prof. Carlo Alberto Veracini, Dr. Mario Cifelli (Università di Pisa, Dipartimento di Chimica e Chimica Industriale Pisa, Italy): Self-diffusion measurements in thermotropic liquid crystals: present results and possible developments
- **2005. július 19.**
Prof. John Kalivas (Idaho State University, Pocatello Idaho, USA): Defining multivariate calibration model complexity for model selection and comparison
- **2005. augusztus 4.**
Prof. Susan A. Bourne (University of Cape Town, South Africa): Physical chemistry in supramolecular compounds: an African safari
- **2005. szeptember 28.**
Dr. Threes Smijs (Leiden University Medical Center, the Netherlands): Porphyrin photosensitizers, suitable for the photodynamic treatment of tinea infections (mycosis) caused by Trichophyton rubrum?
- **2005. október 11.**
Prof. Karl Barry Sharpless (2001, kémiai Nobel-díj): Stitching with nitrogen: an aggressive strategy for drug discovery using click chemistry
- **2005. október 24.**
Dr. Jin Jun Wang (Department of Applied Chemistry, Yantai University, China): Synthesis of Chlorin-enediyne Dyads
- **2005. október 27.**
Dr. Dirk Visser (NOW-Physics, ISIS Faculty – Rutherford Appleton Laboratory, UK): Applications of neutrons in cultural heritage research
- **2005. december 7.**
Prof. Andrzej C. Składanowski (Department of Molecular Enzymology IFB, Medical University, Gdańsk, Poland): Toxicological and eco-toxicological risk assessment for chemical compounds
- **2006. január 20.**
Prof. Dietrich Keppler (Deutsches Krebsforschungszentrum, Heidelberg, Germany): The role of the transport proteins of the OATP and MRP families in drug development

- **2006. március 22.**

Dr. Yair Ein-Elli (Technion-Israel Institute of Technology, Department of Materials Engineering, Haifa, Israel): Electrochemical and surface studies of zinc in alkaline solutions containing organic corrosion inhibitors – from lab studies to a metal-air battery

- **2006. május 4.**

Prof. Fanao Kong (Inst. Chem. Chinese Acad. Sci.): Chemistry in ultrafast intense laser field

Prof. Hongfei Wang (Inst. Chem. Chinese Acad. Sci.): Recent progresses on the nonlinear spectroscopy of the air/electrolyte aqueous solution interfaces

- **2006. május 11.**

Prof. Abbaraju Venkataramana (Department of Materials Science, Gulbarga University, Gulbarga, India): New directions in materials synthesis

- **2006. május 15.**

Prof. Thomas Carell (Department of Organic Chemistry, Ludwig Maximilians University, München, Germany): Syntheses of highly modified nucleosides for evaluation of DNA repair processes

- **2006. június 9.**

Dr. Victor Denisov (Institute of Spectroscopy, Moscow Rég. Troitsk, Russia): Spectroscopy of advanced materials

Dr. Juan C. Sánchez López (ICMSE, Sevilla, Spain): Nanostructural materials: how to control material properties

ÉRTEKEZLETEK

Az MTA KK Igazgatótanácsának ülései

2004. december 13.

Napirend:

1. A Kutatóközpont 2004. évi gazdálkodásának főbb jellemzői, várható adatai, eredményei
2. A Kutatóközpont gazdálkodásának 2005. évi várható körülményei
3. Egyebek

2005. szeptember 9.

Napirend:

1. A költségvetési maradvány zárolásának következtében kialakult gazdasági helyzet
2. A 2005. évi esedékes béremelés
3. Egyebek

2006. január 9.

Napirend:

1. A Kutatóközpont 2006. évi költségvetése
2. A Kutatóközpont Szervezeti és Működési Szabályzatának módosítása
3. Egyebek
(A Kutatóközpont Nemzetközi Tudományos Tanácsadó Testülete soron következő ülés- szakának programja, a Kutatóközponti Tudományos Napok rendezvényei, stb.).

2006. február 23.

Napirend:

1. Tájékoztatás az elnyert pályázatokról és beruházásokról
2. A fiatal, külföldi kutatók támogatásának lehetőségei
3. A TéT pályázatokkal kapcsolatos kérdések
4. Tájékoztató a Kutatói Tanács megválasztott tagjairól
5. Tájékoztató a Kutatóközpont SzMSz-ének módosításáról
6. Egyebek

2006. április 27.

Napirend:

1. Tájékoztatás a Kutatóközpont pályázati tevékenységről
2. Felterjesztés a Pro Arte Chemica díjakra
3. Tájékoztatás a Szellemítulajdon-védelmi Bizottság munkájáról
4. Tájékoztató a Fiatal kutatói pályázatokról
5. Egyebek

2006. június 29.

Napirend:

1. Az MTA és a Kémiai Kutatóközpont aktuális helyzete a várható akadémiai reformok tükrében
2. Egyebek

PUBLIKÁCIÓS ADATOK 2000 – 2005.**A 2000-2005. évi publikációs pontok szervezeti egységenként**

Szervezeti egység-száma, vezető neve	Pontszámok						Összesen			
	2000	2001	2002	2003	2004	2005	2000-2002	2001-2003	2002-2004	2003-2005
1.11. Jablonkai I.	3,105	8,208	4,158	10,193	0,657	2,146	15,471	22,559	15,008	12,996
1.12. Szammer J.	1,890	0,400	0,990	0,000	0,000	1,521	3,280	1,390	0,990	1,521
1.13. (1.42.) Sági Gy.						2,328	0,000	0,000	0,000	2,328
1.2. Hajós Gy.	11,968	5,343	13,608	10,882	2,744	11,559	30,919	29,833	27,234	25,185
1.31. Dörnyei G.	5,277	0,630	2,110	5,483	4,616	1,953	8,017	8,223	12,209	12,052
1.4. Maksay G. (Simonyi M.)	6,463	22,853	24,588	33,054	23,883	26,658	53,904	80,495	81,525	83,595
1.5. Kardos J.	10,274	17,460	14,234	17,606	19,153	6,429	41,968	49,300	50,993	43,188
1.61. Vereczkey L.	0,255	6,206	12,424	6,721	5,564	4,711	18,885	25,351	24,709	16,996
1.62. Jakus J.	8,046	11,085	14,825	11,056	9,608	20,629	33,956	36,966	35,489	41,293
1.63. Monostory K.						10,060	0,000	0,000	0,000	10,060
1.8. Fügedi P.	0,384	4,754	0,000	0,904	0,000	9,400	5,138	5,658	0,904	10,304
BKI	47,662	76,939	86,937	95,899	66,225	97,394	211,538	259,775	249,061	259,518
2.1. Simándi L.	2,267	2,324	13,602	5,132	2,020	3,117	18,193	21,058	20,754	10,269
2.2. Kálmán E.	22,729	20,844	9,484	11,115	11,753	22,825	53,057	41,443	32,352	45,693
2.3. Margitfalvi J.	10,287	16,886	5,615	12,900	6,900	6,007	32,788	35,401	25,415	25,807
2.4. Valyon J	14,946	43,667	25,563	16,566	12,296	17,536	84,176	85,796	54,425	46,398
2.5. Keszhelyi T.					3,314	1,443	0,000	0,000	3,314	4,757
FKI	50,229	83,721	54,264	45,713	36,283	50,928	188,214	183,698	136,260	132,924
3.11. Rockenbauer A.	5,007	6,395	3,517	3,907	4,858	7,868	14,919	13,819	12,282	16,633
3.12. Vidóczy T.	2,367	4,410	1,742				8,519			
3.12. Biczók L.	0,808	5,192	6,570	7,596	8,686	9,263		25,510	24,594	25,545
3.13. Tárkányi G.	3,406	2,982	4,403	3,624	4,095	11,431	10,791	11,009	23,553	19,150
3.14. Keresztury G.	7,281	4,959	5,426	2,720	4,565	11,921	17,666	13,105	24,632	19,206
3.2. Dóbé S.	10,188	7,699	1,748	5,017	8,757	7,051	19,635	14,464	22,573	20,825
3.31. Czugler M. (Kálmán A.)	16,499	12,842	9,763	21,457	21,448	12,034	39,104	44,062	64,702	54,939
3.32. Radnai T., Grósz T.	2,486	0,087	5,424	6,702	7,488	7,492	7,997	12,213	27,106	21,682
3.4. Vékey K.	2,540	27,076	10,378	27,857	17,178	19,724	39,994	65,311	75,137	64,759
3.5. Pápai I.	11,104	22,884	17,354	23,216	25,789	10,354	51,342	63,454	76,713	59,359
SZKI	61,686	94,526	66,325	102,096	102,864	97,138	222,537	262,947	368,423	302,098
Összesen:	159,577	255,186	207,526	243,708	205,372	245,460	622,289	706,420	902,066	694,540

Az adatok lezárva: 2006. november 29.

A 2004-ben 8, illetve ennél több független idézetet kapott cikkek

Ohtaki H, Radnai T: Structure and dynamics of hydrated ions, CHEMICAL REVIEWS, 93 (3) : 1157-1204 (1993)
63 független idézet

Dongré AR, Jones JL, Somogyi Á, Wysocki VH: 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)
31 független idézet

Antal MJ, Várhegyi G: Cellulose pyrolysis kinetics: the current state of knowledge, INDUSTRIAL & ENGINEERING CHEMISTRY RESEARCH, 34 : 703-717 (1995)
17 független idézet

Bertóti I: Characterization of nitride coatings by XPS., SURFACE & COATINGS TECHNOLOGY, 151 : 194-203 (2002)
12 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

Suckau D, Mák M, Przybylski M: Protein surface topology-probing by selective chemical modification and mass-spectrometric peptide-mapping, PROCEEDINGS OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF THE UNITED STATES OF AMERICA, 89 (12) : 5630-5634 (1992)
11 független idézet

Valiron P, Mayer I: Hierarchy of counterpoise corrections for N-body clusters: Generalization of the Boys-Bernardi scheme, CHEMICAL PHYSICS LETTERS, 275 : 46-55 (1997)
10 független idézet

Wintgens V, Valat P, Kossányi J, Biczók L, Demeter A, Bércecs T: Spectroscopic properties of aromatic dicarboximides Part 1. N-H and N-methyl-substituted naphthalimides, JOURNAL OF THE CHEMICAL SOCIETY-FARADAY TRANSACTIONS, 90 : 411-421 (1994)
10 független idézet

Gronli M, Antal MJ[JR], Várhegyi G: A Round-Robin study of cellulose pyrolysis kinetics by thermogravimetry., INDUSTRIAL & ENGINEERING CHEMISTRY RESEARCH, 38 : 2238-2244 (1999)
9 független idézet

Olive G, Mercier A, Le Moigne F, Rockenbauer A, Tordo P: 2-Ethoxycarbonyl-2-methyl-3,4-dihydro-2H-pyrrole-1-oxide: Evaluation of the spin trapping properties, FREE RADICAL BIOLOGY AND MEDICINE, 28 : 403-408 (2000)
9 független idézet

Pajkossy T, Kolb DM: Double layer capacitance of Pt(111) single crystal electrodes., ELECTROCHIMICA ACTA, 46 : 3063-3071 (2001)
9 független idézet

Pekker S, Salvat JP, Jakab E, Bonard JM, Forró L: Hydrogenation of carbon nanotubes and graphite in liquid ammonia., JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 105 : 7938-7943 (2001)
9 független idézet

Valyon J, Hall WK: Studies of the surface species formed from NO on copper zeolites, JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY, 97 (6) : 1204-1212 (1993)
9 független idézet

Vékey K: Internal energy effects in mass spectrometry, JOURNAL OF MASS SPECTROMETRY, 31 : 445-463 (1996)
9 független idézet

Ángyan JG, Loos M, Mayer I: Covalent bond orders and atomic valence indices in the topological theory of atoms in molecules, JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY, 98 : 5244-5248 (1994)
8 független idézet

Dóbé S, Bérces T, Turányi T, Márta F, Grussdorf J, Temps F, Wagner HGG: Direct kinetic studies of the reactions Br+CH₃OH and CH₂OH+HBr: the heat of formation of CH₂OH, JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY, 100 : 19864-19873 (1996)
8 független idézet

Dongré AR, Somogyi Á, Wysocki VH: Surface-induced dissociation: an effective tool to probe structure, energetics and fragmentation mechanisms of protonated peptides, JOURNAL OF MASS SPECTROMETRY, 31 : 339-350 (1996)
8 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

Margitfalvi JL, Tfírst E: Enantioselective hydrogenation of alpha-keto esters over cinchona-Pt/Al₂O₃ catalyst. Molecular modelling of the substrate-modifier interaction, JOURNAL OF MOLECULAR CATALYSIS A-CHEMICAL, 139 (1) : 81-95 (1999)
8 független idézet

Paizs B, Lendvay GY, Vékey K, Suhai S: Formation of b²⁺ ions from protonated peptides: An ab initio study, RAPID COMMUNICATIONS IN MASS SPECTROMETRY, 13 : 525-533 (1999)

8 független idézet

Paizs B, Suhai S: Comparative study of BSSE correction methods at DFT and MP2 levels as theory, JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY, 19 (6) : 575-584 (1998)
8 független idézet

A 2005-ben 8, illetve ennél több független idézetet kapott cikkek

Ohtaki H, Radnai T: Structure and dynamics of hydrated ions, CHEMICAL REVIEWS, 93 (3) : 1157-1204 (1993)
70 független idézet

Dongré AR, Jones JL, Somogyi Á, Wysocki VH: 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)
34 független idézet

Laube B, Maksay G, Schemm R, Betz H: Modulation of glycine receptor function: a novel approach for therapeutic intervention at inhibitory synapses?, TRENDS IN PHARMACOLOGICAL SCIENCES, 23 (11) : 519-527 (2002)
19 független idézet

Vas GY, Vékey K: Solid-phase microextraction: a powerful sample preparation tool prior to mass spectrometric analysis, JOURNAL OF MASS SPECTROMETRY, 39 (3) : 233-254 (2004)
14 független idézet

Keresztury G, Holly S, Besenyei G, Varga J, Wang A, Durig JR: Vibrational spectra of monothiocarbamates-II. IR and Raman spectra, vibrational assignment, conformational analysis and ab initio calculations of S-methyl-N,N-dimethylthiocarbamate, SPECTROCHIMICA ACTA PART A-MOLECULAR AND BIOMOLECULAR SPECTROSCOPY, 49 : 2007-2026 (1993)
13 független idézet

Ángyán JG, Loos M, Mayer I: Covalent bond orders and atomic valence indices in the topological theory of atoms in molecules, JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY, 98 : 5244-5248 (1994)
13 független idézet

Steren CA, 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 tritylamine studied by flash photolysis and FT-EPR, JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY, 100 : 8920-8926 (1996)
13 független idézet

Bakó I, Hutter J, Pálinskás G: Car-Parrinello molecular dynamics simulation of the hydrated calcium ion, JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS, 117 (21) : 9838-9843 (2002)
13 független idézet

Vakulya B, Varga SZ, Csámpai A, Soós T: Highly enantioselective conjugate addition of nitromethane to chalcones using bifunctional cinchona organocatalysts, ORGANIC LETTERS, 7 (10) : 1967-1969 (2005)
13 független idézet

Suckau D, Mák M, Przybylski M: Protein surface topology-probing by selective chemical modification and mass-spectrometric peptide-mapping, PROCEEDINGS OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF THE UNITED STATES OF AMERICA, 89 (12) : 5630-5634 (1992)

12 független idézet

Dobó A, Lipták M, Huszthy P, Vékey K: Chiral recognition via host-guest interactions detected by fast-atom bombardment mass spectrometry: Principles and limitations, RAPID COMMUNICATIONS IN MASS SPECTROMETRY, 11 : 889-896 (1997)

12 független idézet

Olive G, Mercier A, Le Moigne F, Rockenbauer A, Tordo P: 2-Ethoxycarbonyl-2-methyl-3,4-dihydro-2H-pyrrole-1-oxide: Evaluation of the spin trapping properties, FREE RADICAL BIOLOGY AND MEDICINE, 28 : 403-408 (2000)

12 független idézet

Lukovits J, Pálfi K, Bakó I, Kálmán E: LKP model of the inhibition mechanism of thiourac compounds, CORROSION, 53 : 915-919 (1997)

11 független idézet

Paizs B, Suhai S: Comparative study of BSSE correction methods at DFT and MP2 levels os theory, JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY, 19 (6) : 575-584 (1998)

11 független idézet

Margitfalvi JL, Tfirer E: Enantioselective hydrogenation of alpha-keto esters over cinchona-Pt/Al₂O₃ catalyst. Molecular modelling of the substrate-modifier interaction, JOURNAL OF MOLECULAR CATALYSIS A-CHEMICAL, 139 (1) : 81-95 (1999)

11 független idézet

Pekker S, Salvetat JP, Jakab E, Bonard JM, Forró L: Hydrogenation of carbon nanotubes and graphite in liquid ammonia., JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 105 : 7938-7943 (2001)

11 független idézet

Antal MJR, Várhegyi G: Cellulose pyrolysis kinetics: the current state of knowledge, INDUSTRIAL & ENGINEERING CHEMISTRY RESEARCH, 34 : 703-717 (1995)

10 független idézet

Valiron P, Mayer I: Hierarchy of counterpoise corrections for N-body clusters: Generalization of the Boys-Bernardi scheme, CHEMICAL PHYSICS LETTERS, 275 : 46-55 (1997)

10 független idézet

Jones JL, Dongre AR, Somogyi A, Wysocki VH: Sequence dependence of peptide fragmentation efficiency curves determined by electrospray ionization/surface-induced dissociation mass spectrometry, JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY, 116 : 8368-8369 (1994)

9 független idézet

Knyazev VD, Bencsura Á, Stolarov SI, Slagle IR: Kinetics of the C₂H₃+H₂-H+C₁H₄ and CH₃+H₂-H+CH₄ reactions, JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY, 100 : 11346-11354 (1996)
9 független idézet

Margitfalvi JL, Hegedüs M, Tfirst E: Enantioselective hydrogenation of alpha-keto esters over cinchona-Pt/Al₂O₃ catalysts. Kinetic evidence for the substrate-modifier interaction in the liquid phase, TETRAHEDRON-ASYMMETRY, 7 : 571-580 (1996)
9 független idézet

Biczók L, Bércecs T, Linschitz H: Quenching processes in hydrogen-bonded pairs: Interactions of excited fluorenone with alcohols and phenols, JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY, 119 : 11071-11077 (1997)
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)
9 független idézet

Barthos R, Lónyi F, Onyestyák GY, Valyon J: An IR, FR, and TPD study on the acidity of H-ZSM-5, sulfated zirconia, and sulfated zirconia-titania using ammonia as the probe molecule, JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 104 : 7311-7319 (2000)
9 független idézet

Zsila F, Bikádi ZS, Simonyi M: Probing the binding of the flavonoid, quercetin to human serum albumin by circular dichroism, electronic absorption spectroscopy and molecular modelling methods, BIOCHEMICAL PHARMACOLOGY, 65 (3) : 447-456 (2003)
9 független idézet

Biczók L, Linschitz H, Walter RI: Extinction coefficients of C-60 triplet and anion radical, and one-electron reduction of the triplet by aromatic donors, CHEMICAL PHYSICS LETTERS, 195 (4) : 339-346 (1992)
8 független idézet

Tóth A, Bertóti I, Blaszó M, Bánhegyi G, Bognár A, Szaplonczay P: Oxidative damage and recovery of silicone rubber surfaces. I. X-ray photoelectron spectroscopic study, JOURNAL OF APPLIED POLYMER SCIENCE, 52 : 1293-1307 (1994)
8 független idézet

Lukovits I, Kálmán E, Pálinskás G: Nonlinear group-contribution models of corrosion inhibition, CORROSION, 51 : 201-205 (1995)
8 független idézet

Rockenbauer A, Korecz L: Automatic computer simulations of ESR spectra, APPLIED MAGNETIC RESONANCE, 10 : 29-43 (1996)
8 független idézet

Blaszó M: Recent trends in analytical and applied pyrolysis of polymers., JOURNAL OF ANALYTICAL AND APPLIED PYROLYSIS, 39 : 1-25 (1997)
8 független idézet

Demeter A, Druzhini S, George M, Haselbach E, Roulin JL, Zachariasse KA: Dual fluorescence and fast intramolecular charge transfer with 4-(diisopropylamino) benzonitrile in alkane solvents, CHEMICAL PHYSICS LETTERS, 323 : 351-360 (2000)
8 független idézet

Margitfalvi JL, Tálas E, Tfírst E, Kumar CV, Gergely A: The role of cinchona alkaloids in enantioselective hydrogenation reactions: Are they modifiers or hosts involved in supramolecular heterogeneous catalysis, APPLIED CATALYSIS A-GENERAL, 191 : 177-191 (2000)
8 független idézet

Lin Y, Wu X, Feng S, Jiang G, Luo J, Zhou S, Vrijmoed LLP, Jones EBG, Krohn K, Steingrüber K, Zsila F: Five unique compounds: Xyloketals from mangrove fungus Xylaria sp. from the south China sea coast, JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY, 66 : 6252-6256 (2001)

8 független idézet

Bertóti I: Characterization of nitride coatings by XPS., SURFACE & COATINGS TECHNOLOGY, 151 : 194-203 (2002)
8 független idézet

Blaszó M, Czégény Z, Csoma C: Pyrolysis and debromination of flame retarded polymers of electronic scrap studied by analytical pyrolysis., JOURNAL OF ANALYTICAL AND APPLIED PYROLYSIS, 64 : 249-261 (2002)

8 független idézet

2006. ÉVI NYERTES OTKA PÁLYÁZATOK

Oxidatív katalízis metallocenzim elemekkel

Témavezető: Simándi László (2.11)

Pályázat típusa, száma: OTKA 060241

Elnyert összeg: 7.500.000 Ft

Triorganoón(IV)-vegyületek termikusan indukált szilárd és olvadékfázisú csoport-vándorlással végbenemő diszmutációs reakciójának vizsgálata és szerkezeti alapokon nyugvó osztályozása

Témavezető: Deák Andrea (3.31)

Pályázat típusa, száma: OTKA 060496

Elnyert összeg: 3.484.000 Ft

Homogén katalitikus reakciók kvantumkémiai tanulmányozása

Témavezető: Pápai Imre (3.51)

Pályázat típusa, száma: OTKA 060549

Elnyert összeg: 9.000.000 Ft

Új poli(etilén-oxid) alapú elágazott szerkezetű polimerek

Témavezető: Erdődi Gábor (4.21)

Pályázat típusa, száma: OTKA 061299

Elnyert összeg: 12.000.000 Ft

Infravörös és Raman spektroszkópia és mikroszkópia alkalmazási lehetőségeinek kutatása az emberi szervezet fisiológiai állapotának jellemzésére

Témavezető: Mink János (3.14)

Pályázat típusa, száma: OTKA 061611

Elnyert összeg: 13.000.000 Ft

Nanoszerkezetű fotokatalizátorok

Témavezető: Szegedi Ágnes (2.41)

Pályázat típusa, száma: OTKA 061972

Elnyert összeg: 6.800.000 Ft

Ionotróp receptorok allosztérikus modulációja

Témavezető: Maksay Gábor (1.41)

Pályázat típusa, száma: OTKA 062203

Elnyert összeg: 10.900.000 Ft

Arany és módosító TiO₂, CeO₂ és CuO oxidokból felépülő nanoszerkezetek inert hordozón: az aktív határfelület szabályozott kialakítása és katalitikus tulajdonságai

Témavezető: Horváth Anita (7.11)

Pályázat típusa, száma: OTKA 062481

Elnyert összeg: 3.196.000 Ft

Biomolekulák szerkezetének és kölcsönhatásainak vizsgálata informatikai és tömegspektrometriai módszerek együttes alkalmazásával

Témavezető: Vékey Károly (3.41)

Pályázat típusa, száma: OTKA 062727

Elnyert összeg: 10.932.000 Ft

Nanoszerkezetű amfifil kotérhálók és gélek (kiegészítő pályázat)

Témavezető: Iván Béla (4.21)

Pályázat típusa, száma: OTKA 064295

Elnyert összeg: 3 000 000 Ft

Környezetvédelmi szempontból aktuális hőbomlási folyamatok termoanalitikai vizsgálata

Témavezető: Pekkerné Jakab Emma (4.42)

Pályázat típusa, száma: OTKA 61504

Elnyert összeg: 6.000.000 Ft

ÚJ TUDOMÁNYOS KÖNYVEK

1. Adsorption at Solid Surfaces / ed. D.A. King, D.P. Woodruff. – Amsterdam ; Oxford : Elsevier, 1983. – 384 p. – (The Chemical Physics of Solid Surfaces and Heterogeneous Catalysis ; 2)
2. Adsorption on Metal Surfaces : An Integrated Approach / ed. J. Bénard. – Amsterdam ; Oxford : Elsevier, 1983. – IX, 337 p. – (Studies in Surface Science and Catalysis ; 13)
3. Advances in Carbohydrate Chemistry and Biochemistry : Vol.51 / ed. Derek Horton. – San Diego etc. : Academic Press ; Elsevier, c1995. – X, 348 p.
4. Advances in Carbohydrate Chemistry and Biochemistry : Vol.52 / ed. Derek Horton. – San Diego etc. : Academic Press ; Elsevier, c1997. – XII, 491 p.
5. Advances in Carbohydrate Chemistry and Biochemistry : Vol.53 / ed. Derek Horton. – San Diego etc. : Academic Press ; Elsevier, c1998. – X, 466 p.
6. Advances in Carbohydrate Chemistry and Biochemistry : Vol.54 : Cumulative Subject and Contributor Indexes and Tables of Contents Volumes 1–53 / ed. Derek Horton. – San Diego etc. : Academic Press ; Elsevier, c2000. – XL, 538 p.
7. Advances in Carbohydrate Chemistry and Biochemistry : Vol.55 / ed. Derek Horton. – San Diego etc. : Academic Press ; Elsevier, c2000. – XII, 365 p.
8. Advances in Carbohydrate Chemistry and Biochemistry : Vol.56 / ed. Derek Horton. – San Diego etc. : Academic Press ; Elsevier, 2003. – XII, 319 p.
9. Advances in Carbohydrate Chemistry and Biochemistry : Vol.58 / ed. Derek Horton. – Amsterdam etc. : Academic Press ; Elsevier, 2003. – XII, 459 p.
10. Advances in Carbohydrate Chemistry and Biochemistry : Vol.59 / ed. Derek Horton. – Amsterdam etc. : Academic Press ; Elsevier, 2004. – XII, 481 p.
11. Advances in Heterocyclic Chemistry, Vol.84. / ed. Alan R. Katritzky. – San Diego, London : Academic Press, 2003. – IX, 353 p. – (Advances in Heterocyclic Chemistry ; 84.)
12. Advances in Heterocyclic Chemistry, Vol.85. / ed. Alan R. Katritzky. – San Diego, London : Academic Press, 2003. – IX, 380 p. – (Advances in Heterocyclic Chemistry ; 85.)
13. Advances in Heterocyclic Chemistry, Vol.86. / ed. Alan R. Katritzky. – San Diego, London : Academic Press, 2004. – IX, 358 p. – (Advances in Heterocyclic Chemistry ; 86.)
14. Advances in Heterocyclic Chemistry, Vol.87. / ed. Alan R. Katritzky. – San Diego, London : Academic Press, 2004. – IX, 398 p. – (Advances in Heterocyclic Chemistry ; 87.)
15. Advances in Infrared and Raman Spectroscopy : Vol.3. / ed. R.J.H. Clark, R.E. Hester. – London : Heyden, c1977. – XV, 285 p.
16. Advances in Infrared and Raman Spectroscopy : Vol.4. / ed. R.J.H. Clark, R.E. Hester. – London : Heyden, c1978. – XV, 353 p.
17. Advances in Infrared and Raman Spectroscopy : Vol.5. / ed. R.J.H. Clark, R.E. Hester. – London : Heyden, c1978. – XVII, 405 p.
18. Advances in Infrared and Raman Spectroscopy : Vol.6. / ed. R.J.H. Clark, R.E. Hester. – London : Heyden, c1980. – XV, 355p.
19. Angol-magyar kéziszótár / főszerk. Országh László et al. – Budapest : Akadémiai Kiadó, 2004. – XXVIII, 1147 p.
20. ANGSTER Erzsébet: Objektumorientált tervezés és programozás : JAVA : 1 köt. / Angster Erzsébet. – Budapest : 4KÖR Bt., 2003. – XIV, 490 p. –
21. ANGSTER Erzsébet: Objektumorientált tervezés és programozás : JAVA : 2 köt. / Angster Erzsébet. – Budapest : 4KÖR Bt., 2003. – XIII, 534 p. –
22. Annual Review of Physical Chemistry : Vol.55, 2004 / ed. Stephen R. Leone, Paul Alivisatos, Ann E. McDermott. – USA : Annual Reviews Inc., 2004. – X, 682 p. – (Annual Review of Physical Chemistry ; 55)

23. Annual Review of Physical Chemistry : Vol.56,2005 / ed. Stephen R. Leone, Paul Alivisatos, Ann E. McDermott. – USA : Annual Reviews Inc., 2005. – XII, 640 p. – (Annual Review of Physical Chemistry ; 56). –
24. Annual Review of Physical Chemistry : Vol.57,2006 / ed. Stephen R. Leone, Paul Alivisatos, Ann E. McDermott. – USA : Annual Reviews Inc., 2006. – XIII, 691 p. – (Annual Review of Physical Chemistry ; 57). –
25. ANTUS Sándor: Szerves kémia III. / Antus Sándor, Mátyus Péter. – Budapest : Nemzeti Tankönyvkiadó, 2005. – 449–587p.
26. ASM Handbook : Vol.13A Corrosion: Fundamentals, Testing, and Protection / prepared under the direction of the ASM International Handbook Committee. – Ohio : Materials Park, 2005. – XXX,1135p.
27. BALÁZS Robert: Excitatory Amino Acid Transmission in Health and Disease / Robert Balázs, Richard J. Bridges, Carl W. Cotman. – New York : Oxford Univ. Press, 2006. – IX,368 p.
28. BATES, Chris: XML : Elmélet és gyakorlat / Chris Bates. – Budapest : Panem, 2004. – 542 p. – (Webvilág). – 519.682.7 XML. – Programnyelv ; XML (eXtensible Markup Language)
29. BENKŐ Tiborné: Windows alkalmazások fejlesztése Delphi 3 rendszerben : Windows 95, Windows NT / Benkő Tiborné, Benkő László, Tamás Péter. – Bp. : ComputerBooks, 1998. – 499 p. – CD-vel
30. BERKESSEL, Albrecht: Asymmetric Organocatalysis : From Biomimetic Concepts to Applications in Asymmetric Synthesis / Albrecht Berkessel, Harald Gröger. – Weinheim : Wiley-VCH, c2005. – XIV, 440 p.
31. BISHOP, David M.: Group Theory and Chemistry / David M. Bishop. – New York : Dover, 1993. – XX,300p.
32. BÓCZ Péter: A világháló lehetőségei : Interaktív Weblapok készítése / Bócz Péter, Szász Péter. – jav. 2.kiad. – Bp. : ComputerBooks, 1998. – IX, 533 p. –
33. BOMMARIUS, A.S.: Biocatalysis / A.S.Bommarius, B.R.Riebel. – Weinheim : Wiley-VCH, 2004. – XXIII,611p.
34. BROOKS, Susan: Functional and Molecular Glycobiology / S.A. Brooks, M.V. Dwek, Udo Schumacher. – Oxford : BIOS Scientific, 2002. – XX, 354p. – (Advanced Text).
35. BUZSÁKI György: Rhythms of the Brain / Buzsáki György. – Oxford : Oxford Univ. Press, 2006. – XIV, 448p.
36. CRIA, Mario: Measurement analysis : an introduction to the statistical analysis of laboratory data in physics, chemistry and the life sciences / Mario Caria. – London : Imperial College Press, c2000. – VII,229p.
37. CARRUTHERS, W.: Modern Methodes of Organic Synthesis / W. Carruthers, Iain Coldham. – 4th ed. – Cambridge : Cambridge University Press, 2005. – XII,493 p.
38. Chemisorption systems : Part B / ed. D.A. King, D.P. Woodruff. – Amsterdam ; Oxford : Elsevier, 1984. – IX, 317 p. – (The Chemical Physics of Solid Surfaces and Heterogeneous Catalysis ; 3)
39. CLARK, Alfred: The Theory of Adsorption and Catalysis / Alfred Clark. – London ; New York : Academic Press, 1970. – X,418 p. – (Physical Chemistry ; 18)
40. Contemporary Drug Synthesis / Jie Jack Li et al. – XV,221 p. – 615./3122. – Pharmaceutical chemistry. – P 474.
41. CRC Handbook of Chemistry and Physics : A Reference Book of Chemical and Physical Data : 2005–2006 / ed. David R. Lide. – 86. – Boca Raton : Taylor and Francis Group, 2005.
42. Current Protocols in Nucleic Acid Chemistry : Vol.1 / ed. Serge L. Beaucage et. al. – 1- p.
43. Current Protocols in Nucleic Acid Chemistry : Vol.2 / ed. Serge L. Beaucage et. al.

- 44.CSÁKVÁRI Béla: Az intermolekuláris clusterek értelmezése Kenneth Wade cluster-elméletével összhangban / Csákvari Béla, Torkos Kornél. – Budapest : Akadémiai Kiadó, 2005. – 151 p. – (A kémia újabb eredményei ; 94). – Koll.1. A szénhidrátok fémkomlexeinek egyensúlyi viszonyai, szerkezete és alkalmazásai – Koll.2. Nemesgáz-clusterek előállítása, szerkezetvizsgálata és felhasználásuk a környezetkimélő szintézisek kifejlesztésében – Koll.3.
- 45.DEAN, John R.: Methods for Environmental Trace Analysis / John R. Dean. – Chichester : Wiley, c2003. – XXII,259 p. – (Analytical Techniques in the Sciences). – 628.5. – Pollutants-Analysis ; Sampling ; Trace-analysis-Methodology
- 46.Electron Paramagnetic Resonance : Vol.19. / sen. rep. M.J. Davies, B.C. Gilbert, D.M.Murphy. – Cambridge : The Royal Society of Chemistry, c2004. – XIII, 397 p. – (Specialist Periodical Report ; 19.).
- 47.Evaluations of Individual Scientists and Research Institutions : Part I / ed. Braun Tibor. – Bp. : Akadémiai Kiadó, 2006. – VII,573 p. – (Scientometrics Guidebooks Series ; 1). – A selection of papers reprinted from the journal Scientometrics.
- 48.Evaluations of Individual Scientists and Research Institutions : Part II / ed. Braun Tibor. – Bp. : Akadémiai Kiadó, 2006. – 575–1048 p. – (Scientometrics Guidebooks Series ; 1). – A selection of papers reprinted from the journal Scientometrics.
- 49.FAWCETT, W.Ronald : Liquids, Solutions, and Interfaces : From Classical Macroscopic Descriptions to Modern Microscopic Details / W. Ronald Fawcett. – XVI,621p.
- 50.FERRARO, John R.: Fourier Transform Infrared Spectroscopy : Applications to Chemical Systems : Vol.1. / ed. John R. Ferraro, Louis J. Basile. – London ; New York : Academic Press, c1978. – VIII,311 p. – 535.8'42. –
- 51.Floriculture, Ornamental and Plant Biotechnology : Advances and Topical Issues : Vol.IV. / ed. Jaime A. Texeira da Silva. – Kagawa : Depatrmment of Horticulture, c2006. – 695 p.
- 52.FODORNÉ Csányi Piroska: A magyar kémiai elnevezés és helyesírás szabályai : Szervetlen kémiai nevezéktan 2.köt. / Fodorné Csányi Piroska. – Budapest : Akadémiai Kiadó, c2003. – XIV,138 p. – (A kémia újabb eredményei ; 92)
- 53.Fuel Cell Technology Handbook / ed.Gregor Hoogers. – Boca Raton : CRC Press , c2003
- 54.FUJIMOTO, Takashi: Plasma Spectroscopy / Takashi Fujimoto. – Oxford : Clarendon Press, 2004. – XII, 287 p.–(International Series of Monographs on Physics ; 123)
- 55.Gap Junctions in Development and Disease / ed. Elke Winterhager. – Berlin : Springer, c2005. – XVII, 279 p.
- 56.Gas Phase Nanoparticle Synthesis / ed. Claes Grandqvist. – Dordrecht : Kluwer Academic, c2004. – 186 p.
- 57.GILLESPIE, Ronald J.: Chemical Bonding and Molecular Geometry : from Lewis to Electron Densities / Ronald J. Gillespie, Paul L.A.Popelier. – New York,Oxford : Oxford Univ. Press, 2001. – XIII, 268p. – (Topics in Inorganic Chemistry)
- 58.GYURCSIK Béla: A szénhidrátok fémkomlexeinek egyensúlyi viszonyai, szerkezete és alkalmazásai / Gyurcsik Béla, Nagy László, Sipos Pál. – Budapest : Akadémiai Kiadó, 2005. – 151 p. – (A kémia újabb eredményei ; 94). – Koll.1. – Koll.2. Nemesgáz-clusterek előállítása, szerkezetvizsgálata és felhasználásuk a környezetkimélő szintézisek kifejlesztésében – Koll.3. Az intermolekuláris clusterek értelmezése Kenneth Wade cluster-elméletével összhangban
- 59.Handbook of Micro/Nano Tribology / ed. Bharat Bhushan. – Boca Raton : CRC Press , 1999. – 859 p. – (The Mechanics and Materials Science Series)
- 60.Handbook of Quantitative Science and Technology Research : The Use of Publication and Patent Statistics in Studies of S and T Systems / ed. Henk F. Moed, Wolfgang Glanzel, Ulrich Schmoch. – Dordrecht,Boston,London : Kluwer Academic, c2004.

61. HEILBRONNER, Edgar: *Reflections on Symmetry in Chemistry... and Elsewhere* / Edgar Heilbronner, Jack D. Dunitz. – Basel : Verlag Helvetica Chimica Acta, 1993. – 154 p.
62. HIBBS, Alan R.: *Confocal Microscopy for Biologists* / Alan R. Hibbs. – New York : Springer, c2004. – XIII, 467 p. – 570'.28'2. – Confocal microscopy
63. High-Throughput Screening in Chemical Catalysis : Technologies, Strategies and Applications / ed. Alfred Hagemeyer, Peter Strasser, Anthony F. Volpe. – Weinheim : Wiley-VCH, 2004. – XX, 319p.
64. HOLLÓSI MIKLÓS: A sztereokémia és kiroptikai spektroszkópia alapjai / Hollósi Miklós, Lackó Ilona, Majer Zsuzsa. – Bp. : Nemzeti Tankvk., c2004. – 238 p.
65. JAIN, R.K.: *Management of Research and Development Organizations : Managing the Unmanageable* / R.K.Jain, H.C.Triandis. – 2nd ed. – New York : John Wiley and Sons, c1997. – XX,316p. – (Wiley Series in Engineering and Technology Management)
66. JUNGHANS, Claas: *Intellectual Property Management : A Guide for Scientists, Engineers, Financiers and Managers* / Claas Junghans, Adam Levy. – Weinheim : Wiley-VCH, c2006. – XVII,170 p.
67. KIS Balázs: *Windows XP haladóknak* / Kis Balázs. – Bicske : Szak Kiadó, 2005. – 544 p.
68. Klinikai farmakológiai kíslexikon : Biostatisztikai fogalomtárral / szerk. Lakner Géza, Gachányi Béla, Singer Júlia. – Budapest : SPRINGMED, 2005. – 424 p. – (Orvosi kíslexikon)
69. KOMARNENI, Sridhar: *Chemical Processing of Ceramics* / ed.Burtrand Lee, Sridhar Komarneni. – Boca Raton : Taylor and Francis Group, 2005. – 756 p. – (Materials Engineering ; 28)
70. KOZMA Mihály: *Tribológia* / Kozma Mihály. – Bp. : Műegyetemi Kiadó, 2001. – 172 p.
71. Kutatás és fejlesztés : Research and Development 2003. – Budapest : Központi Statisztikai Hivatal , 2004. – 133 p.
72. LAKOWICZ, Joseph R.: *Principles of Fluorescence Spectroscopy* / Joseph R. Lakowicz. – 3rd. – New York : Springer, 2006. – XXVI, 954 p. –
73. LEVINE, Raphael D.: *Molecular Reaction Dynamics* / Raphael D. Levine. – Cambridge : Cambridge University Press, 2005. – XIV,554 p.
74. MACKENZIE, Kenneth J.D.: *M multinuclear Solid-State NMR of Inorganic Materials* / Kenneth J.D. MacKenzie, Mark E. Smith. – Amsterdam,Boston,London : Pergamon, 2002. – XIX,727 p. – (Pergamon Materials Series ; 6)
75. Macrocycle Synthesis : A Practical Approach / ed.David Parker. – Oxford : Oxford Univ. Press, 1996. – XII,252p. – (The Practical Approach in Chemistry Series)
76. Magyar statisztikai zsebkönyv 2004. – Budapest : Központi Statisztikai Hivatal , 2005. – 369 p.
77. Magyar-angol kéziszótár / főszerk. Magay Tamás, Országh László. – Bp. : Akadémiai Kiadó, 2004. – XXIV,816 p.
78. Magyar-angol környezetvédelmi értelmező szótár = Hungarian-English Explanatory Dictionary of Environmental Protection. – Budapest : Akadémiai Kiadó, 2005. – 438 p. szótár + CD-ROM
79. Magyar-német nagyszótár új német helyesírással = Ungarisch-deutsches Grosswörterbuch mit neuer Rechtschreibung / főszerk. Halász Előd, Földes Csaba, Uzonyi Pál. – Budapest : Akadémiai Kiadó, 2001. – XLVIII, 1637 p. – (Klasszikus nagyszótárak)
80. MÁTYUS Péter: *Szerves kémia I.* / Antus Sándor, Mátyus Péter. – Budapest : Nemzeti Tankönyvkiadó, 2005. – 120 p.
81. MÁTYUS Péter: *Szerves kémia II.* / Antus Sándor, Mátyus Péter. – Budapest : Nemzeti Tankönyvkiadó, 2005. – 125–443 p.
82. Membrane Transporter Diseases / ed. Stefan Broer, Carsten A. Wagner. – New York, Boston, Dordrecht : Kluwer Academic ; Plenum, c2003.– XI,390 p.

- 83.Modern Powder Diffraction / ed. D.L. Bish, I.E. Post. – Washington, D.C. : Mineralogical Society of America, 1989. – XII, 369p. – (Reviews in Mineralogy ; 20)
- 84.Nanobiotechnology : Concepts, Applications and Perspectives / ed. Christof M. Niemeyer, Chad A. Mirkin. – 3.th. – Weinheim : Wiley-VCH, 2005. – XXII,469p.
- 85.Német-magyar nagyszótár = Deutsch-ungarische Grosswörterbuch / főszerk. Halász Előd, Földes Csaba, Uzonyi Pál. – Budapest : Akadémiai Kiadó, 2004. – XXXIX,1873 p.
- 86.Nitrogen-containing heterocycles and alkaloids : Proc. of the 1. intern. conf. on the chemistry and biological activity of nitrogen-containing heterocycles and alkaloids, Moscow, Oct.9–12, 2001 : Vol.1. / ed. V.G Kartsev, G.A. Tolstikov. – Moscow : Iridium Press, 2001. – 564p.
- 87.Nitrogen-containing heterocycles and alkaloids : Proc. of the 1. intern. conf. on the chemistry and biological activity of nitrogen-containing heterocycles and alkaloids, Moscow, Oct.9–12, 2001 : Vol.2. / ed. V.G Kartsev, G.A. Tolstikov. – Moscow : Iridium Press, 2001. – 472p.
- 88.OHMAE, Nobuo: Micro and Nanotribology / Nobuo Ohmae, Jean Michel Martin, Shigeyuki Mori. – New York : ASME Press, c2005. – VIII,185 p.
- 89.Organo-fluorine Compounds : Vol. E 10a / ed. B.Baasner, H.Hagemann, J.C. Tatlow. – New York ; Stuttgart : Thieme, 2000. – XVIII,740 p. – (Methodes of Organic Chemistry)
- 90.Organo-fluorine Compounds : Vol. E 10b/1 / ed. B.Baasner, H.Hagemann, J.C. Tatlow. – New York ; Stuttgart : Thieme, 2000. – XV,720 p. – (Methodes of Organic Chemistry)
- 91.Organo-fluorine Compounds : Vol. E 10b/2 / ed. B.Baasner, H.Hagemann, J.C. Tatlow. – New York ; Stuttgart : Thieme, 2000. – XIII,880 p. – (Methodes of Organic Chemistry)
- 92.Organo-fluorine Compounds : Vol. E 10c/1 / ed. B.Baasner, H.Hagemann, J.C. Tatlow. – New York ; Stuttgart : Thieme, 2000. – LXXXIV,812 p. – (Methodes of Organic Chemistry)
- 93.Organo-fluorine Compounds : Vol. E 10c/2 / ed. B.Baasner, H.Hagemann, J.C. Tatlow. – New York ; Stuttgart : Thieme, 2000. – LXXXIV,1721 p. – (Methodes of Organic Chemistry)
- 94.ORSZÁGH László: Angol-magyar nagyszótár = English-Hungarian Dictionary (2004) / Országh László, Magay Tamás. – Bp. : Akadémiai Kiadó, 2004. – XX, 1779 p.
- 95.ORSZÁGH László: Magyar-angol nagyszótár = Hungarian-English Dictionary (2005) / Országh László, Magay Tamás, Kővecses Zoltán. – Bp. : Akadémiai Kiadó, 2005. – XX, 1583. p.
- 96.Oxygen- and sulfur-containing heterocycles : Proc. of 2. intern. conf. on the chemistry and biological activity of oxygen- and sulfur- containing heterocycles : Vol.1. / ed. Karsev V.G. – Moscow : IBS Press, 2003. – 470 p.
- 97.Oxygen- and sulfur-containing heterocycles : Proc. of 2. intern. conf. on the chemistry and biological activity of oxygen- and sulfur- containing heterocycles : Vol.2. / ed. Karsev V.G. – Moscow : IBS Press, 2003. – 345 p.
- 98.Proceedings of Infrared Spectroscopy : New Tool in Medicine : 28–30 January 1998, San Jose, California; sponsored by SPIE--the International Society for Optical Engineering, IBOS--International Biomedical Optics Society / Henry H. Mantsch, Michael Jackson ed. – Bellingham, Wash. : SPIE, c1998. – IX, 320 p. – (Progress in Biomedical Optics) – (Proceedings of SPIE the--International Society for Optical Engineering ; V. 3257.)
- 99.Radiotracer Studies of Interfaces / ed. G. Horányi. – Amsterdam : Academic Press ; Elsevier, 2004. – XIV, 435p. – (Interface Science and Technology ; 3.)
- 100.Reactive Intermediate Chemistry / ed. Robert A. Moss, Matthew S. Platz, Maitland Jones. – Hoboken : Wiley-Interscience, 2004. – VIII,1072p.
- 101.REICH, S.: Carbon Nanotubes : Basic Concepts and Physical Properties / S.Reich, C. Thomsen, J.Maultzsch. – Cambridge ; Weinheim : Wiley-VCH, 2004. – IX, 215 p.

102. ROHONCZY János: Nemesgáz-clusterek előállítása, szerkezetvizsgálata és felhasználásuk a környezetkímélő szintézisek kifejlesztésében / Csákvári Béla, Rohonczy János. – Budapest : Akadémiai Kiadó, 2005. – 151 p. – (A kémia újabb eredményei ; 94). – Koll. 1. A szénhidrátok fémkomlexeinek egyensúlyi viszonyai, szerkeze és alkalmazásai – Koll. 2. – Koll. 3. Az intermolekuláris clusterek értelmezése Kenneth Wade cluster-elméletével összhangban
103. SCHLICK, Tamar: Molecular Modeling and Simulation : An Interdisciplinary Guide / Tamar Schlick. – New York : Springer, c2002. – XLIII,634p. – (Interdisciplinary Applied Mathematics ; 21)
104. Science of Synthesis : Houben-Weyl Methodes of Molecular Transformation : Vol 15. : Hetarenes and Related Ring Systems / Vol. ed. D. StC. Black. – Stuttgart : Thieme, 2006. – LXIV,1320 p.
105. Science of Synthesis : Houben-Weyl Methodes of Molecular Transformation : Vol.11. : Hetarenes and Related Ring Systems / Vol. ed. E. Schaumann. – Stuttgart : Thieme, 2006. – LI,1160 p.
106. Science of Synthesis : Houben-Weyl Methodes of Molecular Transformations : Cumulative Index : Hetarenes and Related Ring Systems / Indexers J.Backes, C.J. Drayton. – Stuttgart : Thieme, 2006.LXIX,1500 p.
107. Science of Synthesis : Houben-Weyl Methodes of Molecular Transformations : Vol.9. : Hetarenes and Related Ring Systems : Fully Unsaturated Small-Ring Heterocycles and Monocyclic Five-Membered Hetarenes with One Heteroatom / Vol. ed. G. Mass. – Stuttgart : Thieme, 2006. – XXXII,664 p.
108. Science of Synthesis : Houben-Weyl Methodes of Molecular Transformations : Vol.10. : Hetarenes and Related Ring Systems : Fused Five-Membered Hetarenes with One Heteroatoms / Vol. ed. E.J. Thomas. – Stuttgart : Thieme, 2006. – XLII,916 p.
109. Science of Synthesis : Houben-Weyl Methodes of Molecular Transformations : Vol.12. : Hetarenes and Related Ring Systems : Five-Membered Hetarenes with Two Nitrogen or Phosphorus Atoms / Vol. ed. R. Neier. – Stuttgart : Thieme, 2006. – XXXVI,796 p.
110. Science of Synthesis : Houben-Weyl Methodes of Molecular Transformations : Vol.13. : Hetarenes and Related Ring Systems : Five-Membered Hetarenes with Three or More Heteroatoms / Vol. ed. R.C. Storr, T.L. Gilchrist. – Stuttgart : Thieme, 2006. – LIX,1010 p.
111. Science of Synthesis : Houben-Weyl Methodes of Molecular Transformations : Vol.14. : Hetarenes and Related Ring Systems : Six-Membered Hetarenes with One Chalcogen / Vol. ed. E.J. Thomas. – Stuttgart : Thieme, 2006. – LI,1010 p.
112. Science of Synthesis : Houben-Weyl Methodes of Molecular Transformations : Vol.16. : Hetarenes and Related Ring Systems : Six-Membered Hetarenes with Two Identical Heteroatoms / Vol. ed. Y. Yamamoto. – Stuttgart : Thieme, 2006. – LXIV,1568 p.
113. Science of Synthesis : Houben-Weyl Methodes of Molecular Transformations : Vol.17. : Hetarenes and Related Ring Systems : Six-Membered Hetarenes with Two Unlike or more than Two Heteroatoms and Fully Unsaturated Larger-Ring Heterocycles / Vol. ed. S.M. Weinreb. – Stuttgart : Thieme, 2006. – LXIX,1500 p. –
114. SIMÁNDI László: Catalytic Activation of Dioxygen by Metal Complexes : Vol.1. / Simándi László. – Dordrecht etc. : Kluwer, 1992. – 188 p. – (Catalysis by Metal Complexes ; 13).
115. SIMÁNDI László: Catalytic Activation of Dioxygen by Metal Complexes : Vol.2. / Simándi László. – Dordrecht etc. : Kluwer, 1992. – 189–402 p. – (Catalysis by Metal Complexes ; 13)
116. Solid-State NMR Spectroscopy : Principles and Applications / ed. Melinda J. Duer. – Oxford : Blackwell Science Ltd., 2002. – XVIII,567 p.

- 117.SOLOMONS, T.W.Graham: Organic Chemistry / T.W. Graham Solomons, Craig B. Fryhle. – New York : Wiley, c2000. – XXXII,1342 p.
- 118.STANEK, William R.: Microsoft Windows parancsor : A rendszergazda zsebkönyve / William R. Stanek. – Budapest : Szak Kiadó, 2005. – XXIII,503 p.
- 119.STAUFFER, Dietrich: Newtontól Mandelbrotig : Bevezetés az elméleti fizikába : 50 ábrával és 16 színes táblával / Dietrich Stauffer, H. Eugene Stanley. – Bp. : Springer Hungarica, 1994. – 210 p., 8 t. –
- 120.Stereoselective Synthesis : E 21 Volume 1 / Günter Helmchen et al. – Stuttgart, New York : Thieme, 1996. – XVI,644 p. – (Methodes of Organic Chemistry)
- 121.Stereoselective Synthesis : E 21 Volume 10 / Günter Helmchen et al. – Stuttgart, New York : Thieme, 1996. – p.6003–6989. – (Methodes of Organic Chemistry)
- 122.Stereoselective Synthesis : E 21 Volume 2 / Günter Helmchen et al. – Stuttgart, New York : Thieme, 1996. – p.661–1334. – (Methodes of Organic Chemistry)
- 123.Stereoselective Synthesis : E 21 Volume 3 / Günter Helmchen et al. – Stuttgart, New York : Thieme, 1996. – X,p.1335–2010. – (Methodes of Organic Chemistry)
- 124.Stereoselective Synthesis : E 21 Volume 4 / Günter Helmchen et al. – Stuttgart, New York : Thieme, 1996. – IX,p.2011–2734. – (Methodes of Organic Chemistry)
- 125.Stereoselective Synthesis : E 21 Volume 5 / Günter Helmchen et al. – Stuttgart, New York : Thieme, 1996. – IV,p.2735–3299. – (Methodes of Organic Chemistry)
- 126.Stereoselective Synthesis : E 21 Volume 6 / Günter Helmchen et al. – Stuttgart, New York : Thieme, 1996. – VI,p.3301–3850. – (Methodes of Organic Chemistry)
- 127.Stereoselective Synthesis : E 21 Volume 7 / Günter Helmchen et al. – Stuttgart, New York : Thieme, 1996. – X,p.3851–4496. – (Methodes of Organic Chemistry)
- 128.Stereoselective Synthesis : E 21 Volume 8 / Günter Helmchen et al. – Stuttgart, New York : Thieme, 1996. – X,p.4497–5132. – (Methodes of Organic Chemistry)
- 129.Stereoselective Synthesis : E 21 Volume 9 / Günter Helmchen et al. – Stuttgart, New York : Thieme, 1996. – XII,p.5133–6001. – (Methodes of Organic Chemistry)
- 130.Tápanyag-beviteli referencia-értékek. – Budapest : Medicina, 2004. – 283 p.
- 131.TARR Ferenc: A flavonoidok : Válogatott tanulmányok a flavonoidok köréből / Tarr Ferenc. – Nyíregyháza-Debrecen : Nyíregyházi Főiskola Fizikai Tanszék, 2002. – 214 p. – 615. – P 472.
- 132.The New Chemistry / ed. Nina Hall. – Cambridge : Cambridge University Press, 2000. – XI,493p.
- 133.TOMPKINS, F.C.: Chemisorption of Gases on Metals / F.C. Tompkins. – London ; New York : Academic Press, 1978. – XII, 370 p.
- 134.Value Ceration: Strategies for the Chemical Industry / ed. Florian Buddle, Utz-Hellmuth Felcht, Heiner Frankemölle. – 2nd. – Weinheim : Wiley-VCH, c2006. – XXXIV,467 p.
- 135.Van Nostrand's Encyclopedia of Chemistry / ed. Glenn D. Considine. – 5th. – Hoboken,New Jersey : Wiley, c2005. – XVIII,1831 p.
- 136.VARGA István: Japán-magyar szótár / Varga István. – Szeged : Gold Bridge, 2003. – 528 p.
- 137.Vibrational Spectra and Structure : A series of advances : Vol.5. / ed. James R. Durig. – Amsterdam : Elsevier, 1976. – XIV,295 p.
- 138.Vibrational Spectra and Structure : A series of advances : Vol.9. / ed. James R. Durig. – Amsterdam : Elsevier, 1816. – XVI,519 p.
- 139.Vibrational Spectroscopy of Adsorbates / ed. R.F. Willis. – Berlin ; Heidelberg : Springer, 1980. – XII,184 p. – (Springer Series in Chemical Physics ; 15)
- 140.WEINHOLD, Frank: Valency and Bonding : A Natural Bond Orbital Doner-Acceptor Perspective / Frank Weinhold, Clark R Landis. – Cambridge : Cambridge University Press, 2005. – IX,749p.

- 141.Windows XP profíknak / szerk. Bányai Ferenc. – Budapest : Computer Panoráma Kft., 2004. – 266 p.
- 142.ZRINYI Miklós: A fizikai kémia alapjai I. / Zrínyi Miklós. – Budapest : Műszaki Kvk., 2004. – 323 p.
- 143.ZRINYI Miklós: A fizikai kémia alapjai II. / Zrínyi Miklós. – Budapest : Műszaki Kvk., 2006. – 318 p.

SAJTÓSZEMLE

Népszava

2005. június 4.

N. Sándor László ismertetése:

Az ismertető, ami "A szkeptikus Don Quijote" címmel jelent meg, Beck Mihálytal talmaz interjút a legutóbb megjelent könyvről.

Beck Mihály már négy évtizede hadakozik a különböző tévtanok, áltudományos mesterkedések és tudományos visszaélések ellen. Elgondolkoztató könyve, amely a Vince Kiadó, Tudomány – Egyetem sorozatában jelent meg nemrégiben, ál- és paratudományos hiedelmek, szélhámosságok leleplezésének fordulatos története, egyszersmind magas színvonalú tudományos ismeretterjesztő mű.

Heti Válasz

2005. június 30.

Gulyás Anna riportja:

Az újság rövid tájékoztatót közöl az Oláh György Nobel-díjas kémikus és munkacsoportja (Loker Hydrocarbon Research Institute of the University of Southern California) által kifejlesztett technológiáról.

Az Oláh-féle új technológia nemesak szénhidrogénekből képes metilalkoholt – vagyis folyékony üzemanyagot, illetve ipari nyersanyagot – előállítani, hanem a levegőben található szén-dioxidból is. A szén-dioxid nagymértékű kivonása a levegőből csökkentheti a légszennyezetét és az üvegházhatást, ezáltal lassulhat a Föld felmelegedése. Egyelőre azonban ez a technológia túl költséges, az 50-60 dollár/hordó olajárral még mindig nem versenyképes. Oláh György arra számít, ahogy egyre kevesebb és drágább lesz a kőolaj és a fölgáz, az üzemanyagcella minden keresettebb lesz. Egyrészt szénhidrogén-üzemanyagot, másrészről elektromos áramot lehet vele termelni, mégpedig környezetbarát módon. A metanolos üzemanyagcellák a drága, kisebb kapacitású és környezetszennyező akkumulátorokat már elkezdtek felváltani a mobiltelefonokban, laptopokban, és belátható időn belül várhatóan a gépkocsikban, a háztartási energiatermelésben, -tárolásban.

Magyar Kémikusok Lapja

2005. 6, 188-201

Vinkler Péter cikke:

Az "50 éve alapították az MTA Központi Kémiai Kutatóintézetét" című cikkben a kutatóhely rövid történetéről, elérte eredményeiről olvashatunk. Az Intézet alapító igazgatójának (Schay Géza) helyettese 1954-1956 között Oláh György (a későbbi Nobel-díjas) volt. A cikk felsorolja az Intézetben dolgozó kutatók kiemelkedő tudományos, ill. számos ipari termékhez vezető eredményét. Beszámol arról, hogy az EU-6 program keretében a Kutatóközpontban, ill. annak irányításával létrejött a *Hungarian Network of Excellent Centres on Nanoscience* és a *Center of Excellence for Biomolecular Chemistry*. A cikk beszámol a Kutatóközponttal átalakult intézmény új kutatási programjairól. Az írás megemlíti a Központ Nemzetközi Tudományos Tanácsadó Testületének fontos szerepét a tematika formálásában. A Testület szerint a központ túlnyomó része a legkorszerűbb kutatási témaikkal foglalkozik nemzetközi színvonalon. A kutatóhely fontos értéket képvisel az ország és a világ tudománya számára.

A kémiai, orvosi és fizikai Nobel-díjasok (2005)

NOBEL PRIZE IN CHEMISTRY

OLEFIN METATHESIS GETS NOBEL NOD

Chauvin, Grubbs, and Schrock are honored for a highly practical chemical reaction

For years, the chemistry community has recognized the importance and utility of olefin metathesis. Now, the [Royal Swedish Academy of Sciences](#) has chosen to recognize it, too: Last week, the academy awarded the [2005 Nobel Prize in Chemistry](#) to three chemists who developed the reaction—Yves Chauvin of the French Petroleum Institute, Rueil-Malmaison, France; [Robert H. Grubbs](#) of California Institute of Technology; and [Richard R. Schrock](#) of Massachusetts Institute of Technology. They will share equally the \$1.3 million prize.



Chauvin



Grubbs



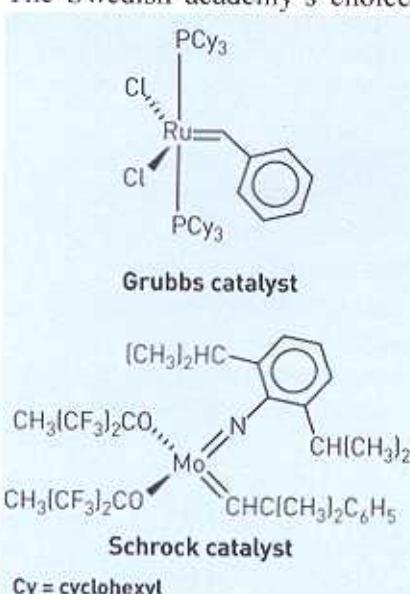
Schrock

The Swedish academy's choice "confirms what is generally agreed upon in the synthetic chemistry community—that olefin metathesis is a very useful catalytic reaction that has a broad scope," comments Harvard University chemistry professor and Nobel Laureate [Elias J. Corey](#).

In olefin metathesis, two carbon-carbon double bonds react to form two new carbon-carbon double bonds. In the process, substituents attached to the carbon atoms involved are exchanged. This exchange can result in various outcomes, including straight swapping of substituents, closure of large rings, formation of dienes, and polymerization. The reaction, which is catalytic, takes place under mild conditions and is so general that it is widely applicable.

The reaction was first observed in the 1950s, but it wasn't until 1971 that a convincing mechanism was proposed. Chauvin and student Jean-Louis Hérisson suggested that the reaction is initiated by a metal carbene, which reacts

with an olefin to form a new olefin and a new metal carbene, which propagates the reaction. Other chemists shed further light on the mechanism, which put the reaction on the path of



practicality. For example, work in 1975 by Columbia University chemistry professor [Thomas J. Katz](#) and graduate student James McGinnis led them to synthesize discrete metal-carbene complexes, which they used to initiate the reaction ([C&EN, Dec. 23, 2002, page 34](#)).

With improvements in metal-carbene initiators, the reaction became more widely used. Schrock and Grubbs led efforts to develop the catalysts that now allow olefin metathesis to flourish. Schrock's catalysts are based on molybdenum; Grubbs's are based on ruthenium and are widely credited with having put olefin metathesis in the hands of synthetic chemists because the catalysts are easy to use. "Chemists now routinely use the catalysts to prepare pharmaceutical candidates and new materials in an efficient and environmentally friendly way," says Jeremy M. Berg, director of the [National Institute of General Medical Sciences](#), which has supported the research of the American winners.

In research, olefin metathesis has become a go-to reaction for constructing carbon-carbon double bonds, especially in complex molecules. In industry, the reaction is used in cleaner, less expensive, and more efficient production of polymers, pesticides, fine chemicals, and pharmaceutical intermediates and active ingredients ([C&EN, Dec. 23, 2002, page 29](#)).

According to the Swedish academy, olefin metathesis is a "great step forward for 'green chemistry.'" That statement reinforces the message that the best chemists in the world are doing green chemistry and that green chemistry is simply part of doing good chemistry, says Paul T. Anastas, director of the [American Chemical Society's Green Chemistry Institute](#).

Olefin metathesis is "an example of how important basic science has been applied to the benefit of man, society, and the environment," the academy adds. Yet, "basic research is not recognized as much as it should be today," said Schrock at an MIT press conference last week. He and Grubbs, he said, "had faith that we were doing something new and that applications would develop, and they have."

Olefin metathesis catalysts and technology are available from Materia, a company based in Pasadena, Calif., that was founded by Grubbs and for which both Grubbs and Schrock are scientific advisers. — A. Maureen Rouhi

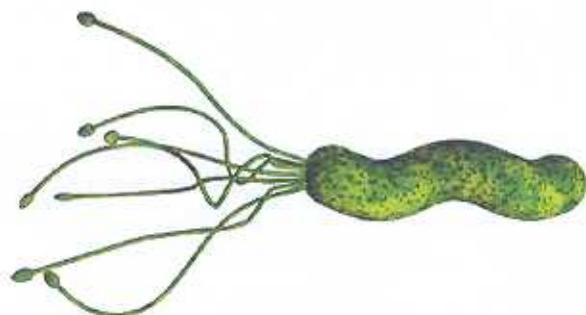
NOBEL PRIZE IN PHYSIOLOGY OR MEDICINE

ULCER REVELATION GARNERS NOBEL PRIZE

Two Australians share award for discovery of ulcer-causing bacteria

The 2005 [Nobel Prize in Physiology or Medicine](#) honors the discovery that ulcers are caused by the bacterium *Helicobacter pylori*—not stress or lifestyle as had been thought. The Nobel Assembly at Karolinska Institute, which awards the prize, describes the discovery as “remarkable and unexpected” and notes that it “challenged prevailing dogmas.”

J. Robin Warren, 68, formerly a pathologist at the Royal Perth Hospital in Australia, and [Barry J. Marshall](#), 54, who runs an *H. pylori* research lab at the University of Western Australia, in Nedlands, will share the \$1.3 million prize.



COURTESY OF WWW.HPYLORI.COM.AU

AWARD-WINNING Discovery of *Helicobacter pylori*, shown here in an artist's rendition, and its role in causing ulcers was honored with the Nobel Prize.

The path to the Nobel Prize began when Warren noted that stomach tissue from patient biopsies was often colonized by a small, curved bacterium and that inflammation of the gastric mucosa in these tissue samples always occurred near the bacterium. Marshall collaborated with Warren and eventually succeeded in culturing the bacterium, which was later named *H. pylori*. The researchers determined that the bacterium could be found in most patients with gastric inflammation, duodenal ulcer, or gastric ulcer. On the basis of these results, “they proposed that *H. pylori* is involved in the etiology of these diseases,” the Nobel Assembly notes.

Because the stomach’s low pH was thought to be too harsh for bacteria to survive, the researchers’ hypothesis was met with skepticism. Marshall responded by quaffing a culture of the bacterium and showing in a most direct manner that the organism causes gastritis.

“Thanks to the pioneering discovery by Marshall and Warren, peptic ulcer disease is no longer a chronic, frequently disabling condition, but a disease that can be cured by a short regimen of antibiotics and acid secretion inhibitors,” the Nobel Assembly says. — Sophie L. Rovner

NOBEL PRIZE IN PHYSICS

THREE SHARE NOBEL FOR OPTICS DISCOVERIES

Americans, German honored for both theoretical and practical breakthroughs

Three physicists have won the [Nobel Prize in Physics](#) for their revolutionary work applying quantum theory to optics.

[Roy J. Glauber](#), 80, of Harvard University will take home half of the \$1.3 million prize for his contribution to the quantum theory of optical coherence, according to the Royal Swedish Academy of Sciences, which awards the prize.

Glauber found a way to describe some puzzling optical effects by applying quantum field theory to the behavior of light. His theory details the dual nature of light—it can be thought of as consisting either of waves or particles known as photons—and explains why light from most regular sources differs from laser light. In lasers, light is coherent—its rays all have the same phase, wavelength, and direction. The work pioneered the field of quantum optics and paved the way for developments in quantum encryption.

The other half of the prize money will be split between [John L. Hall](#), 71, of JILA, a physics institute in Boulder, Colo., run by the University of Colorado and the National Institute of Standards & Technology, and [Theodor W. Hänsch](#), 63, of the Max Planck Institute for Quantum Optics, Garching, Germany, and Ludwig Maximilians University, Munich.

According to the Swedish Academy, the pair is being honored “for their contributions to the development of laser-based precision spectroscopy, including the optical frequency comb technique.”

Hall and Hänsch’s techniques have allowed scientists to make very accurate measurements of the frequency of light—up to 15 decimal points of precision. Their comb technique, in particular, has allowed physicists to examine the stability of nature’s constants over time and to develop extremely accurate clocks and global positioning system technology. — Aalok Mehta

Felelős kiadó: Dr. Pálinkás Gábor
Felelős szerkesztő: Dr. Vinkler Péter
Engedély száma: III/ÜBH/109/1976.
ISSN: 0230-8444
Példányszám: 100
Készült: MTA KK házinyomda
Felelős vezető: Bereyné Wootsch Katalin