

**KUTATÓKÖZPONTI TUDOMÁNYOS
NAPOK**

2005.

ELŐADÁSÖSSZEFOGLALÓK

**MTA
KÉMIAI KUTATÓKÖZPONT**

Tartalom

ANYAG- ÉS KÖRNYEZETKÉMIAI SZEKCIÓ

		oldalszám
<u>Renner Károly</u> , Min Soo Yang, Móczó János, Hyoung Jin Choi, Pukánszky Béla	A határfelületek elválásának vizsgálata polipropilén modellkompozitokban	7.
Pukánszky Béla, <u>ifj. Pukánszky Béla</u> , Bodai László	PU neuro-endovaszkuláris embolizáló anyag fejlesztése	9.
<u>Domján Attila</u> , Erdődi Gábor, Mezei Péter, Iván Béla, Manfred Wilhelm, Robert Graf, Hans Werner Spiess, Jochen Gutmann	Amfifil kotérhálók és hidrofil polimerek duzzadásának vizsgálata röntgenszórási és NMR- módszerekkel	11.
<u>Groh Werner Péter</u> , Iván Béla, Szesztay Andrásné, Tóth Kálmán	Új katalizátor rendszer vizsgálata izobutilén karbokationos polimerizációjában és alkalmazása kombinált polimerizációs eljárásokban	13.
<u>Mezey Péter</u> , Domján Attila, Iván Béla, Ralf Thomann, Rolf Mülhaupt	Poli(N,N-dimetil-akrilamid)- <i>l</i> -poliizobutilén amfifil polimer kotérhálók szerkezetének vizsgálata és nanoreaktorként történő alkalmazásuk	15.
<u>Szanka István</u> , Iván Béla	Új típusú hiperelágazásos polimerek szintézise kváziélő gyökös polimerizációval	17.
<u>Pálfí Tamás</u> , Takács Erzsébet, Wojnárovits László	H-sav lebontása nagyenergiájú sugárzással	19.
Nguyen Cong Tam, <u>Zsigrai József</u>	Uránminták korának gamma-spektroszkópiai meghatározása	21.
Sáfrány Ágnes, <u>Beiler Barbara</u>	Pórusos monolitok előállítása sugárzásos polimerizációval	23.

FELÜLETKÉMIAI ÉS KATALÍZIS SZEKCIÓ

<u>Szigyártó Imola Csilla</u> , Simándi László	A dioxidigén biomimetikus aktiválása dioximátomangán(II) komplexszel	27.
<u>Szegedi Ágnes</u> , Pálné Borbély Gabriella, Hegedűs Mihály, Margitfalvi József, Lázár Károly, Kiricsi Imre	Átmenetifémeket tartalmazó mezopórusos szilikátok redoxi és katalitikus tulajdonságai	29.
<u>Onyestyák György</u> , Valyon József, Papp Katalin	Új, méhsejt szerkezetű zeolit/szén kompozit anyagok	31.

<u>Tolnai Gyula</u> , Nagy Péter, Trif László, Kormos Fiammetta, Kálmán Erika	Nanogyűrűk és mikroszerkezetek ón-oxid vékonyrétegekben	33.
<u>Kristyán Sándor</u> , Margitfalvi L. József	A korrelációs és zérópont-energia nukleáris konfiguráció és elektronszám függésének statisztikus analízise molekuláris rendszerekben	35.
<u>Keszthelyi Tamás</u> , Pásztai Zoltán, Rigó Tímea, Hakkel Orsolya, Telegdi Judit, Guczi László	Korrózióvédő Langmuir-Blodgett és önszerveződő rétegek vizsgálata összefrekvencia-keltési spektroszkópiával	37.
<u>Kármánné Herr Franciska</u> , Kálmán Erika, Andreas Schreiber, Joachim W. Schultze, Manuel M. Lohrengel	Elektrokémiai vizsgálatok vas polikristály szemcsehatáron	39.
<i>SZERKEZETI KÉMIAI SEKCIÓ</i>		
<u>Hollóné Sitkei Eszter</u> , Tárkányi Gábor, Párkányi László, Besenyei Gábor	Sztérikus hatások megnyilvánulása palládiumkomplexek önszerveződésében	43.
Kálmán Alajos	Morfotrópia: kapcsolat a szerves kristályok izostrukturalitása és polimorfíja között	45.
<u>Báthori Nikoletta</u> , Czugler Mátyás, Bombicz Petra, Bihátsi László	Új, kristályos szupramolekuláris rendszerek szintézise és röntgendiffrakciós szerkezet- meghatározása	47.
<u>Deák Andrea</u> , Tárkányi Gábor	Termikusan indukált metil-vándorlással járó kristály-kristály átalakulások organoón(IV)- komplexek körében	49.
<u>Korányi Tamás I.</u> , B. Nagy János	Az alumínium eloszlása mordenitek és béta zeolitok különböző periodikus építőegységeiben	51.
<u>Nagy Nóra Veronika</u> , Plánkáné Szabó Terézia, Rockenbauer Antal, Peintler Gábor, Nagypál István, Korecz László	Réz(II)-oligoglicin komplexek szerkezeti változatossága: mikrospeciáció és koordinációs módok meghatározása kétdimenziós ESR- spektroszkópiával	53.
<u>Drahos László</u> , Peltz Csaba, Somogyi Árpád, Ron M. A. Heeren, Vékey Károly	Fourier-transzformációs (FT-ICR) tömegspektrométeren végzett kísérletek modellézése	55.
Bakó Imre	Kis molekulák adszorpciójának vizsgálata Pt(111), Pd(111), Rh(111) felületen	57.
Kovács Gergely	Az acetón légköri fotokémiája	59.

BIOMOLEKULÁRIS KÉMIAI SEKCIÓ

Vakulya Benedek, Varga Szilárd, Schubert Gábor, Pápai Imre, <u>Soós Tibor</u>	Kinin alapú organokatalizátor szintézise és mechanizmusának vizsgálata	63.
<u>Hazai Eszter</u> , Bikádi Zsolt	A P450 önszerveződés hatása az enzimaktivitásra	65.
<u>Lasztóczy Bálint</u> , Emri Zsuzsa, Nyikos Lajos, Kardos Julianna	A 2-metil-4-oxo-3 <i>H</i> -kinazolin-3-acetilpiperidin (Q5) antiepileptikus hatása és hatásmechanizmusa <i>in vitro</i>	67.
<u>Lengyel György</u> , Veres Zsuzsa, Vereczkey László, Jemnitz Katalin	ABC transzporterek gyógyszer-interakciókban játszott szerepének tanulmányozása primer hepatocytá szendvicskultúrában	69.

ANYAG- ÉS KÖRNYEZETKÉMIAI SZEKCIÓ

A HATÁRFELÜLETEK ELVÁLÁSÁNAK VIZSGÁLATA POLIPROPILÉN MODELLKOMPOZITOKBAN

Renner Károly*, Min Soo Yang**, Móczó János, Hyoung Jin Choi**, Pukánszky Béla

A műanyagokat egyre nagyobb mennyiségben használják fel. Az új alkalmazási területek követelményeit kielégítő anyagokat társítással állítják elő, polimer keverékeket, töltőanyagtartalmú polimereket és szálerősítésű kompozitokat használnak. Ezek általában heterogén szerkezetűek, a diszpergált társító komponens a polimer mátrixban található. A heterogén polimer rendszerek tulajdonságait négy tényező határozza meg: a komponensek jellemzői, az összetétel, a szerkezet és a határfelületi kölcsönhatások. Külső terhelés hatására a heterogenitások környezetében az átlagosnál nagyobb feszültség alakul ki, feszültségkoncentráció jön létre. A feszültségmaximumok környezetében lokális deformációs folyamatok, mikromechanikai deformációk indulnak meg. Ezek típusa és mértéke függ a feszültségkoncentráció nagyságától, a termikus feszültségektől és a határfelületi kölcsönhatásoktól. Töltőanyagot tartalmazó polimerekben a domináló mechanizmus általában a határfelületek elválása. Kemény részecskék esetén a feszültség maximuma a póluson található, itt indul meg az elválás és a mátrix deformációjával folytatódik.

Munkánk célja az volt, hogy polipropilén (PP)/ szűk szemcseméret eloszlású térhálós PMMA-szemcséket tartalmazó modellkompozitokat állítsunk elő, a határfelületek elválásának pontosabb vizsgálatához. A modellkompozitok tulajdonságait a kereskedelmi forgalomban kapható széles szemcseméret eloszlású kalcium-karbonáttal hasonlítottuk össze. Kísérletet tettünk a deformáció során bekövetkező határfelületi elválás kezdetének akusztikus emissziós (AE) mérésekkel történő meghatározására. Megállapítottuk, hogy az AE-mérések értékes információkat szolgáltatnak a határfelületek elválását befolyásoló paraméterekről, lehetőséget nyújtva a folyamat pontos megértéséhez és irányításához.

*BME Műanyag- és Gumiipari Tanszék

**Inha Egyetem Polimer Kémiai- és Technológiai Tanszék (Dél-Korea)

PU NEURO-ENDOVASZKULÁRIS EMBOLIZÁLÓ ANYAG FEJLESZTÉSE

Pukánszky Béla, ifj. Pukánszky Béla*, Bodai László*

Az agyérbetegségek gyakorisága fokozatosan emelkedett az elmúlt évtizedekben. Ennek oka az egyes országokban az életszínvonal, az életkörülmények romlása, a kockázati tényezők halmozódása. Más országokban (fejlett ipari országok) a várható élettartam meghosszabbodása miatt kell egyre több agyérbeteg ellátásával szembe nézni.

Az artériákon előforduló aneurizmák (*verőértágulat*) túlnyomó része is érfejlődési rendellenesség miatt keletkezik. Különösen veszélyesek az agyi érrendszerben keletkező aneurizmák, melyek vérzést okozva a beteg túlélési esélyeit erősen csökkentik. Ezért szükséges, hogy a vérzést nem okozó aneurizmákat műtéti beavatkozással megszüntessék. Műtét során megkeresik és elzárják a tágulatot, vagy megerősítik a gyengefalú artériát. A műtéti eljárást az aneurizma elhelyezkedése, alakja döntően befolyásolja, ezért több módszert is kidolgoztak, melyek közül a legkisebb kockázattal járókat alkalmazzák.

Ma legelterjedtebben a neuro-endovascularis technikát (*éren belüli*) használják, ami a nyitott műtétekkel szemben kedvezőbb. Ezen belül is több módszert különböztethetünk meg, melyek közül a legújabb, a polimer alapú embolizáló anyagot használó eljárás.

A jelenleg alkalmazott embolizáló rendszer jó hatékonysága mellett számos tulajdonságában nem felel meg az orvosi követelményeknek. Ezért rendkívül nagy a jelentősége az ilyen rendszerek fejlesztésére irányuló kutatásoknak.

Egy új embolizáló anyag kifejlesztéséhez számos célt kell megvalósítani, amihez elengedhetetlen a jelenleg alkalmazott PU-anyag teljes körű jellemzése. A rendelkezésünkre álló kiindulási anyagot, illetve az általunk előállított PU-polimert számos módszerrel vizsgáltuk. GPC, MALDI és határviszkozitás mérés segítségével a molekulatömegét, szakító vizsgálatokkal pedig mechanikai tulajdonságait jellemeztük. Számos más módszert, mint DSC, TGA, FTIR és peremszög-mérést alkalmaztunk az előállított polimerek jellemzésére. Eredményeink azt mutatták, hogy a komponensek megfelelő kiválasztásával és a polimerizáció körülményeinek beállításával, lehetővé válik olyan PU-anyagok létrehozása, amelyek alkalmasabbak a jelenlegi orvosi gyakorlatban alkalmazott embolizáló anyagnál.

*BME Műanyag és Gumiipari Tanszék

AMFIFIL KOTÉRHÁLÓK ÉS HIDROFIL POLIMEREK DUZZADÁSÁNAK VIZSGÁLATA RÖNTGENSZÓRÁSI ÉS NMR-MÓDSZEREKKEL

Domján Attila, Erdődi Gábor, Mezei Péter, Iván Béla, Manfred Wilhelm*, Robert Graf*,
Hans Werner Spiess*, Jochen Gutmann*

Az amfifil kotérhálók kovalensen összekapcsolt hidrofil és hidrofób polimer láncokból állnak. A komponensek a nanométeres (5-30 nm) tartományban fáziselkülönült doméneket alkotnak, morfológiájuk függ az összetételtől. Amfifil jellegüket az bizonyítja, hogy mind poláris, mind apoláris, oldószerekben képesek duzzadni. Ez a tulajdonságuk, valamint pórusos és nanofázis-szeperált szerkezetük, jó mechanikai tulajdonságaik, biokompatibilitásuk számos felhasználási területen teszi alkalmazhatóvá ezeket a különleges anyagokat.

Duzzasztás hatására változik a domének mérete, egyes esetekben a kotérhálók morfológiája is. A száraz és duzzasztott mintákat kisszögű röntgenszórás (SAXS) és szilárd fázisú NMR-módszerekkel vizsgáltuk. A hidrofób láncok hosszának és a hidrofil komponens anyagi minőségének hatását tanulmányoztuk, és átfogó képet kaptunk a különböző amfifil kotérhálók morfológiájáról.

A hidrofil komponens szelektív duzzasztásának hatására a gumirugalmas állapotú hidrofób (poliizobutilén – PIB) láncok nyúlással és összezsugorodással is reagálhatnak a számukra rossz oldószer jelenlétére. Konformációváltozást mutattunk ki a PIB-láncoknál nagyszögű röntgenszórás (WAXS) és szilárd fázisú ^{13}C NMR felhasználásával.

A poli(N,N-dimetilamino etil-metakrilát) (PDMAEMA) – néhány más polimerhez hasonlóan – alsó kritikus oldódási hőmérséklettel rendelkezik, azaz egy kritikus hőmérséklet felett az oldhatósága annyira lecsökken, hogy makroszkopikus fázisszeperáció történik, az oldat fényáteresztő képessége jelentősen lecsökken, átlátszatlanná válik. Eltéréseket találtunk a folyamat lejátszódásának idejében és reverzibilitásában a homopolimer, homo- és kotérháló esetében. Folyadék fázisú NMR-mérések segítségével kimutattuk homopolimer oldatban a fő és oldalláncok relaxációs folyamatainak változását.

*Max Planck Institute for Polymer Research, Mainz, Germany

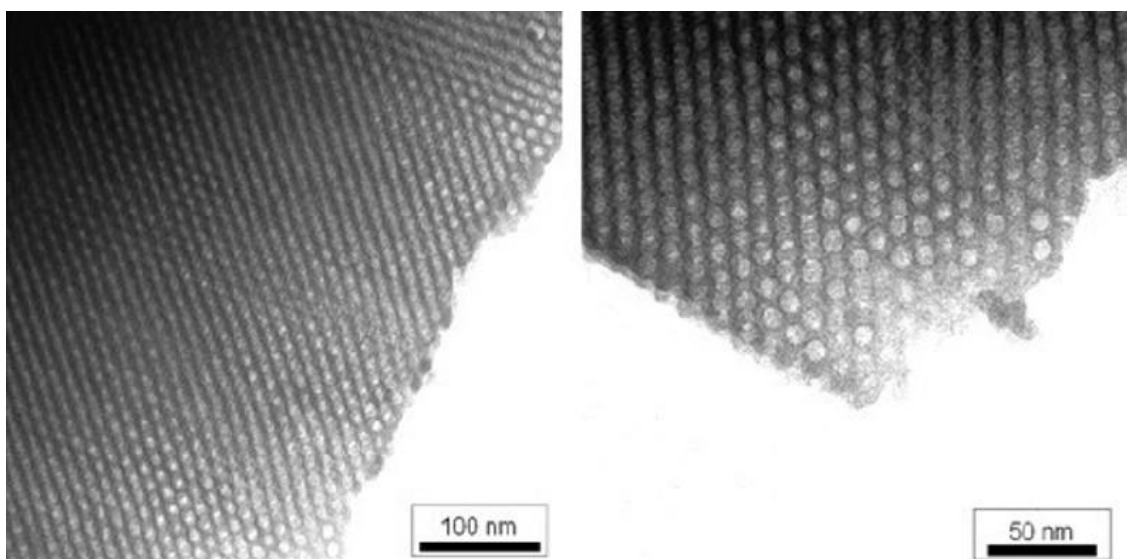
IRODALOMJEGYZÉK

1. Domján A., Erdődi G., Wilhelm M., Neidhofer M., Landfester K., Iván B., Spiess H. W. Structural studies of nanophase-separated poly(2-hydroxyethyl methacrylate)-*l*-polyisobutylene amphiphilic conetworks by solid-state NMR and small-angle x-ray scattering
Macromolecules 36, 9107-9114 (2003)
2. Domján A., Süvegh K., Iván B., Vértes A.
Study on swelling of poly[2-(N,N-dimethyl amino)ethyl methacrylate]-*l*-polyisobutylene (PDMAEMA-*l*-PIB) amphiphilic co-network
Materials Science Forum 363-3, 365-367 (2001)
3. Domján A., Iván B., Süvegh K., Vértes A.
Structural changes during swelling of poly[2-(N,N-dimethylamino)ethyl methacrylate]-*l*-polyisobutylene (PDMAEMA-*l*-PIB) amphiphilic conetwork.
Polymer Preprints 41, 1130-1131 (2000)
4. Süvegh K., Domján A., Vankó G., Iván B., Vértes A.
Free volume and swelling dynamics of the poly[(2-dimethylamino)ethyl methacrylate]-*l*-polyisobutylene amphiphilic network by positron annihilation investigations
Macromolecules 31, 7770-7775 (1998)
5. Süvegh K., Domján A., Magyarfalvi G., Vankó G., Vértes A.
Hydrogen-bounded clusters in aqueous solutions: A combined positron annihilation and FTIR study
Materials Science Forum 255-2, 348-350 (1997)
6. Domján A., Iván B., Süvegh K., Vértes A.
Water absorption in a polymeric network
Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry-Articles 211, 219-224 (1996)

ÚJ KATALIZÁTOR RENDSZER VIZSGÁLATA IZOBUTILÉN KARBOKATIONOS POLIMERIZÁCIÓJÁBAN ÉS ALKALMAZÁSA KOMBINÁLT POLIMERIZÁCIÓS ELJÁRÁSOKBAN

Groh Werner Péter, Iván Béla, Szesztay Andrásné, Tóth Kálmán

Az utóbbi években jelentős fejlődésnek indult a jól definiált, előre tervezett szerkezettel rendelkező makromolekuláris anyagok szintézise. Igen előnyös fizikai és kémiai tulajdonságainak köszönhetően az effajta szerkezetekben a poliizobutilén (PIB) az egyik legelőnyösebb komponens [1]. A jól definiált szerkezetű poliizobutilén előállításának egyedüli módja az izobutilén kváziélő karbokationos polimerizációja [1,2], ami különböző nukleofil adalékanyagok jelenlétében történik. E területen folytatott kutatásaink eredményeként olyan új katalizátor rendszert (2-klór-2,4,4-trimetil-pentán/titán-tetraklorid/1,1,4,4-tetrametil-etiléndiamin) fejlesztettünk ki, amelynek alkalmazásával a kapott polimerek molekulatömege jól tervezhető, molekulatömeg-eloszlásuk szűkebb az elméletileg várhatónál [3]. Ez arra utal, hogy a katalizátor rendszerben jelenlévő Lewis-sav/kelátképző nukleofil komplex olyan összetett módon befolyásolja a polimerizáció menetét, ami a mechanizmusra korábban elfogadott elméletekkel [2] nem magyarázható meg kielégítően.



1. ábra: A PIB-PEO nanotempláttal készített nanopórusos SiO₂ TEM-felvétele⁵

Az általunk kidolgozott új katalizátor rendszernek további előnye, hogy lehetőséget biztosít a képződött polimer láncvégeinek reaktív csoportokkal történő kvantitatív funkcionálására. Az így létrehozható láncvégi funkcióscsoporttal rendelkező

poliizobutilén széles skáláját kínálja új és különleges alkalmazási lehetőségnek. Ezzel a katalizátor rendszerrel készült polimerek adják az alapját azoknak az érdekes topológiájú polimakromonomereknek, melyeket a poliizobutilén láncvégi metakrilát csoportjainak szabad gyökös polimerizációjával állítottunk elő [4]. Ugyancsak ezt a katalizátor rendszert használtuk fel egy igen szűk molekulatömeg eloszlású ($M_w/M_n=1,02$), 100%-ban hidroxil láncvégű poliizobutilén makroiniciátor előállítására, mellyel sikerült jól definiált szerkezetű PIB-poli(etilén-oxid) amfifil blokk kopolimereket készíteni élő anionos polimerizációval. Ezek a blokk-kopolimerek egyszerű körülmények között nanoméretű, meglepően szabályos micelláris önrendeződést mutatnak, és templátként alkalmazva lehetővé tették szabályos szerkezetű, szűk póruseloszlású, nanopórusos szilícium-dioxid (1. ábra) és titán-dioxid előállítását [5].

IRODALOMJEGYZÉK

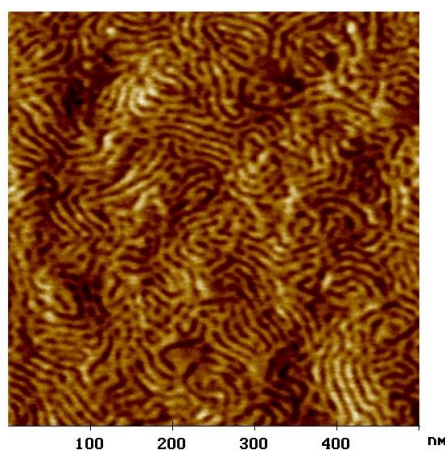
1. Kennedy J. P., Iván B.
Designed Polymers by Carbocationic Macromolecular Engineering: Theory and Practice
Hanser Publishers, Munich, New York, 1992
2. Iván B.
Open mechanistic problems of quasiliving carbocationic polymerization of olefins mediated by nucleophilic additives
Macromol. Symp. 132, 65 (1998)
3. Groh W. P., Iván B., Szesztay M., de Jong F., Graafland T.
Effects of chelating agents on the quasiliving carbocationic polymerization of isobutylene
Polym. Prepr. 41, 1379 (2000)
4. Iván B., Groh W. P., Fónagy T., Tóth K.
Synthesis of functional polymers via carbocationic routes by conventional laboratory techniques
Polym. Mater. Sci. Eng. 84, 841 (2001)
5. Groenewolt M., Brezesinski T., Schlaad H., Sigel R., Antonietti M., Groh W. P., Iván B.
Polyisobutylene-*block*-poly(ethylene oxide) for robust templating of highly-ordered mesoporous materials
Adv. Mater. 17, 1158 (2005)

POLI(N,N-DIMETIL-AKRILAMID)-*l*-POLIIZOBUTILÉN AMFIFIL POLIMER KOTÉRHÁLÓK SZERKEZETÉNEK VIZSGÁLATA ÉS NANOREAKTORKÉNT TÖRTÉNŐ ALKALMAZÁSUK

Mezey Péter, Domján Attila, Iván Béla, Ralf Thomann*, Rolf Mülhaupt*

Munkánk során poli(N,N-dimetil-akrilamid)-*l*-poliizobutilén (PDMAAm-*l*-PIB; „*l*” a „*linked by*” rövidítése) amfifil polimer kotérhálókat állítottunk elő széles összetétel-tartományban (38-80 m/m% poliizobutilén). Az amfifil jelleg vizsgálata végett mind hidrofíll (víz), mind hidrofób (n-hexán) oldószerben meghatároztuk a kotérháló egyensúlyi duzzadási fokát, mely értékek egyértelmű összefüggésben állnak a minták összetételével.

A PDMAAm-*l*-PIB amfifil kotérháló termikus vizsgálata (DSC) során megfigyeltük, hogy a PIB-re, illetve a poli(N,N-dimetil-akrilamid)-ra (PDMAAm) jellemző üvegesedési átmenet értékek egyaránt jelen vannak. Ez arra enged következtetni, hogy az ilyen típusú anyagok fázisszevárt morfológiával rendelkeznek. A jelenség pontosabb és mélyebb tanulmányozása érdekében kisszögű röntgenszórási (SAXS) vizsgálatokat végeztünk. A kapott eredmények azt mutatják, hogy a PDMAAm-*l*-PIB amfifil kotérhálóban rövidtávú rendezettség figyelhető meg, és az ismétlődő fázisok mérete az összetételtől függően a 8-15 nm tartományba esik. Ezek az anyagok tehát egyedülálló, nanofázis-szevárt morfológiával rendelkeznek. Atomerő mikroszkópia (AFM) segítségével azt is megállapítottuk, hogy a kotérhálóknak az összetétel függvényében más és más morfológiájuk van, ahol a fázisok mérete minden esetben a nanométeres tartományba esik (1. ábra).



1. ábra: PDMAAm-*l*-PIB kotérháló AFM képe (54 m/m % PIB)

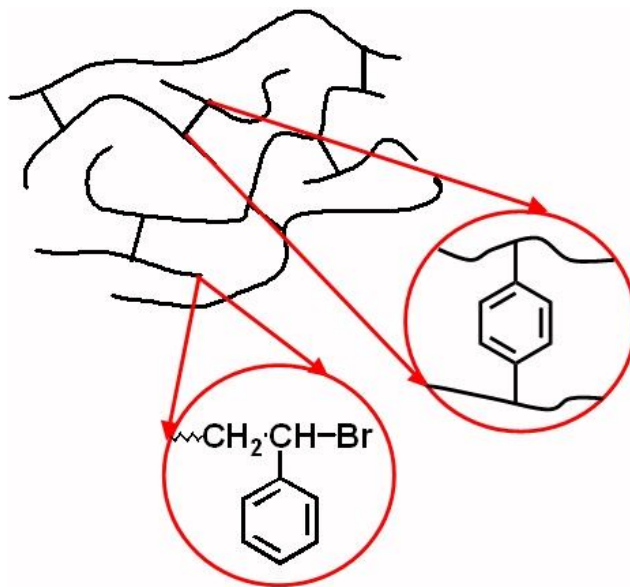
Az elkülönülő fázisokat különféle kémiai reakciók nanoreaktoraként hasznosíthatjuk. Kísérleteink során ezüst nanorészecskéket hoztunk létre oly módon, hogy az amfifil kotérháló hidrofil fázisát ezüst-nitrát vizes oldatával duzzasztottuk, majd az ezüstionokat dimetilformamiddal redukáltuk. Így, a fázisok méretének köszönhetően, nanoméretű fémezüst kiválását tapasztaltuk a kotérhálóban.

*Universität Freiburg, Institut für Makromolekulare Chemie und
Materialforschungszentrum, D-79104 Freiburg, Stefan Meier Str. 31, Deutschland

ÚJ TÍPUSÚ HIPERELÁGAZÁSOS POLIMEREK SZINTÉZISE KVÁZIÉLŐ GYÖKÖS POLIMERIZÁCIÓVAL

Szanka István, Iván Béla

A polimerkémia napjainkban is zajló rohamos fejlődése lehetővé teszi olyan új szintézismódszerek kifejlesztését, amelyek teljesen új szerkezetű és tulajdonságú makromolekulákat eredményeznek. Ezek közül is kiemelkednek azok a polimerek, amelyek egységes, jól definiált szerkezettel rendelkeznek [1]. Az egyik, ilyen típusú polimereket eredményező igen ígéretes szintézismódszer a kváziélő atomátadásos gyökös polimerizáció (angol rövidítése ATRP). 1995-ös felfedezése óta rendkívül intenzív kutatások folynak világszerte ezen a téren, ami annak köszönhető, hogy alkalmazása révén sokféle, előre tervezhető komplex makromolekuláris szerkezetek (lineáris és elágazott szerkezetű funkcionális polimerek, blokk-kopolimerek stb.) állíthatók elő a kereskedelemben kapható, olcsó monomerek felhasználásával.



1. ábra

Az ATRP-vel kapcsolatos kutatásaink [2] során kifejlesztettünk egy új szintetikus módszert, melynek eredményeként új típusú, kompakt szerkezetű hiperelágazásos funkcionális polimereket állítottunk elő kváziélő atomátadásos gyökös polimerizációval. Az így kialakuló, kétféle funkcióscsoportot is tartalmazó hiperelágazásos polimer szerkezetét mutatja az 1. ábra, ami sztirol és divinil-benzol ATRP körülmények közötti kopolimerizációja során képződött. Az elágazásos polimereket hagyományos és fényszóródás detektorral felszerelt gélpermeációs

kromatográfiával és $^1\text{H-NMR}$ -rel analizáltuk, mellyel igazoltuk a képződött polimerek szerkezetét. A kidolgozott szintézissel kapott új, hiperelágazásos funkciós polimerek további kémiai módosítása olyan anyagokat eredményezhet, amelyek mind az alapkutatásban, mind pedig a gyakorlati alkalmazásban érdeklődésre tarthatnak számot.

IRODALOMJEGYZÉK

1. Kennedy J. P., Iván B.
Designed Polymers by Carbocationic Macromolecular Engineering: Theory and Practice
Hanser Publishers, Munich, New York, 1992
2. Orsolya K., Szanka I., Iván B.
Quasiliving atom transfer radical polymerization of methacrylates by slow initiation with
4-methylbenzyl bromide
Polym. Prepr. (nyomdában)

H-SAV LEBONTÁSA NAGYENERGIÁJÚ SUGÁRZÁSSAL

Pálfi Tamás, Takács Erzsébet, Wojnárovits László

A biológiailag nehezen degradálódó színezékek könnyen lebonthatók nagyenergiájú sugárzás alkalmazásával. Kutatásaink során elsődlegesen a lejátszódó mechanizmus megértésére, valamint a megfelelő technológiai paraméterek meghatározására törekedtünk.

A textiliparban színezékként nagy mennyiségben alkalmazzák az azocsoportot is tartalmazó H-sav (4-amino-5-hidroxinaftalén-2,7-diszulfonsav) származékokat. Noha a molekula vizes oldatánál a látható fény hullámhossztartományában tapasztalható fényelnyelésért az azocsoport(ok) a felelősek, a molekula teljes szerkezete határozza meg a fényelnyelési maximum helyét.

A H-savnak és származékainak vizes oldatban, nagyenergiájú sugárzás hatására lejátszódó reakcióit optikai detektálással kiegészített impulzus radiolízis módszerrel vizsgáltuk. Gamma-radiolízis technikát alkalmazva állítottuk elő a stabilis végtermékeket, melyek koncentrációját ionpárképzésen keresztül HPLC-módszerrel követtünk nyomon. Mind a hidratált elektronnal, mind pedig a hidroxil gyökkel történő reakciók vizsgálatát elvégeztük.

A •OH-gyök esetében nagyobb lebontási hatékonyságot tapasztaltunk. A támadás az aromás rendszerre történik különböző szerkezetű átmeneti-, valamint végtermékeket eredményezve. Minden esetben megfigyelhető volt, hogy a keletkezett átmeneti termékek fényelnyelési maximuma a kisebb energiák felé található, ami az aromás jelleg növekedésével magyarázható.

IRODALOMJEGYZÉK

1. Wojnárovits L., Pálfi T., Takács E.
Radiolysis of azo dyes in aqueous solution: Apollofix-Red
Res. Chem. Intermed. (elfogadva)
2. Wojnárovits L., Pálfi T., Takács E.
Radiation degradation of textile dyes in aqueous solution
Proceedings of the Trombay Symposium on Radiation Chemistry and Photochemistry,
Mumbai, India. Preprint Vol. I. 140-144 (2004)
3. Wojnárovits L., Pálfi T., Takács E., Emmi S. S.
Reactivity differences of hydroxyl radicals and hydrated electrons in destructing azo dyes
Radiat. Phys. Chem. (elfogadva)

URÁNMINTÁK KORÁNAK GAMMA-SPEKTROSKÓPIAI MEGHATÁROZÁSA

Nguyen Cong Tam, Zsigrai József

Az előadásban egy olyan módszert mutatunk be, amellyel a nukleáris anyagok illegális forgalmában lefoglalt mintákban található dúsított urán gyártási ideje meghatározható. Ennek segítségével a dúsított uránminta származási helye behatárolható. A világ kutatólaboratóriumaiban erre a célra korábban kifejlesztett módszerek roncsolják a vizsgálandó mintát, továbbá meglehetősen bonyolult és költséges a minták méréshez való előkészítése. Magyarországon a közelmúltig nem folytak kutatások az említett témakörben. Az előadásban bemutatásra kerülő (gamma-spektroszkópiára épülő) módszer roncsolásmentes, és nem igényli a mérendő minták semmiféle különleges előkészítését. Ez a kutatás hozzájárult ahhoz, hogy Magyarország megerősítse kiemelkedő helyét a nukleáris anyagok illegális forgalmának felderítését és megakadályozását célzó kutatások élvonalában, egy világviszonylatban új, versenyképes analitikai módszer létrehozásával. A módszer versenyképessége elsősorban viszonylag egyszerű alkalmazhatóságában és költségkímélő voltában rejlik, a korábbi módszerek pontosságával megegyező pontosság mellett.

IRODALOMJEGYZÉK

1. Tam Nguyen C.
Age-dating of highly enriched uranium by gamma-spectrometry
Nucl. Instrum. Meth. B 229, 103-110 (2005)
2. Tam Nguyen C., Zsigrai J.
Gamma-spectrometric methods for age-dating of highly enriched uranium
27th ESARDA Annual Meeting, London, 2005

PÓRUSOS MONOLITOK ELŐÁLLÍTÁSA SUGÁRZÁSOS POLIMERIZÁCIÓVAL

Sáfrány Ágnes, Beiler Barbara*

A monolitoknak nevezett pórusos polimer tömbök a hagyományos töltött kolonnáknak látványos alternatívái lettek a proteinek és peptidek szeparációjának, mivel a monolitokban a tömegátvitel sokkal gyorsabb. A kromatográfia mellett a monolitokat számos más területen is alkalmazzák, mint pl. a katalízis, szeparáció, diagnosztika és peptidszintézis.

Poli(dietilén-glikol-dimetakrilát) (DEGDMA), poli(hidroxietilakrilát-ko-DEGDMA) és poli(glicidilmetakrilát-ko-DEGDMA) monolitokat szintetizáltunk besugárzással iniciált polimerizáció és térhálósodás segítségével. Ez a módszer bármilyen mérettel és alakkal rendelkező monolit helyben történő előállítását lehetővé teszi, ezáltal nincs szükség a kolonna utólagos feltöltésére. Az egyszerű előállítás, a rövid reakcióidő és a reakció bármilyen hőmérsékleten való indítása jelenti a besugárzás legfontosabb előnyeit a hő iniciált polimerizációval szemben. A pórusképződés az oldószer minőségével, a monomer koncentrációjával, a dózissal, a dózisteljesítménnyel és a hőmérséklettel szabályozható.

Teflon csöveket töltöttünk meg különböző monomer koncentrációt (legfeljebb 55 tf.%) és oldószereket (alkoholok, aceton, etil-acetát, tetrahidrofurán, acetonitril) tartalmazó oldatokkal. A csöveket nitrogénnel történő átbuborékolás után lezártuk, és különböző dózissal (max. 50 kGy) besugároztuk. A dózisteljesítményt 1-15 kGy/h között, a besugárzási hőmérsékletet pedig 0-60 °C között változtattuk. A besugárzás után a csöveket kromatográfiai pumpához csatlakoztattuk, és meghatároztuk a fluxust különböző nyomásokon. A monolitok morfológiáját pásztázó elektronmikroszkópiával vizsgáltuk. A pórusméretet és a pórusméret-eloszlást higany poroziméterrel, a pórusfelszínt a nitrogén adszorpciós izotermákból határoztuk meg a BET-egyenlet segítségével.

Az oldat kis dózissal történő besugárzása kismonomer koncentrációnál metanolban, magas hőmérsékleten és nagy dózisteljesítménnyel nagy pórusokkal rendelkező monolitot eredményezett. Ezzel ellentétben nagy pórusfelszínnel rendelkező monolitokat kaptunk acetonban oldott nagyobb koncentrációjú monomer nagy dózissal történő besugárzásakor alacsony hőmérséklet és kis dózisteljesítmény mellett. A körülmények megfelelő megválasztásával az adott alkalmazáshoz leginkább megfelelő monolitok állíthatók elő. A DEGDMA és a hidroxietilakrilát kopolimerizációjakor különböző hidrofóbicitással rendelkező monolitok képződtek, míg glicidil metakrilát kopolimerizációjakor epoxi funkcionalitással rendelkező monolit jött létre.

* BME Fizikai Kémia Tanszék (egyetemi hallgató)

IRODALOMJEGYZÉK

1. Grasselli M., Smolko E., Hargittai P., Sáfrány Á.
From microspheres to monoliths: synthesis of porous supports with tailored properties by radiation polymerization
Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section B-Beam Interactions with Materials and Atoms *185*, 254-261 (2001)
2. Sáfrány Á., Beiler B., Graselli M.
Radiation synthesis of porous polymer supports with tailored properties
POLYCHAR-10. World Forum on Polymer Applications and Theory, January 8-10, 2002, Denton, Texas, USA, Book of Abstracts p. 65.
3. Sáfrány Á., Beiler B., László K., Svec F.
Control of formation in macroporous polymers synthesized by a one-step radiation-initiated polymerization and cross-linking
Polymer (elfogadva)

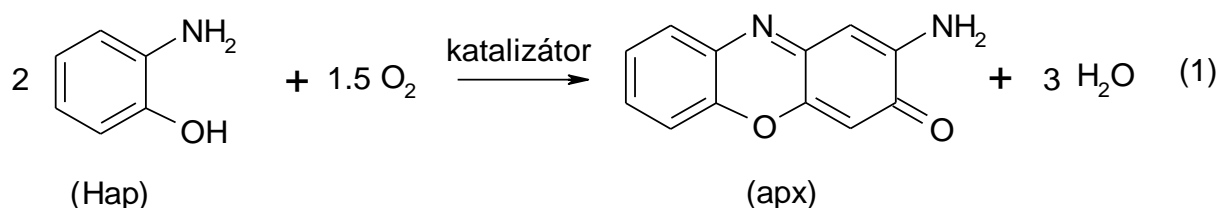
FELÜLETKÉMIAI ÉS KATALÍZIS SZEKCIÓ

A DIOXIGÉN BIOMIMETIKUS AKTIVÁLÁSA DIOXIMÁTOMANGÁN(II) KOMPLEXSZEL

Szigyártó Imola Csilla, Simándi László

Előállítottuk a H_2L ligandum ($H_2L = R[N=C(CH_3)C(CH_3)=NOH]_2$, ahol $R = CH_2CH_2NHCH_2CH_2$) $[Mn_2(HL)_2][B(C_6H_5)_4]_2$ (**1**) összetételű dimer mangán(II)-komplexét, amelynek szerkezetét elemanalízis, electrospray tömegspektrometria, elektronspin rezonancia, infravörös spektroszkópia és röntgendiffrakció segítségével jellemeztük. Kimutattuk, hogy az **1** komplex a pirokatechin oxidáz funkcionális modellje [1].

Újabb vizsgálataink szerint, az **1** dioximátomangán(II) komplex a *fenoxazinon szintetáz* enzim funkcionális modelljeként is működik. Szobahőmérsékleten és 1 atm nyomáson aktiválja a dioxigént és katalizálja a 2-amino-fenol (Hap) oxidációját a megfelelő 2-amino-3*H*-fenoxazin-3-onná (apx) (1. egyenlet).



Részletesen vizsgáltuk az oxidáció kinetikáját és megállapítottuk a kinetikai egyenletet. A sebességmeghatározó lépésben a mangánkomplexet, a szubsztrátumot és a dioxigént tartalmazó terner komplex keletkezik, amelyből elektron- és protonátvitellel 2-amino-fenoxil köztitermék gyök képződik. ESR-spektroszkópiás mérések tanúsága szerint ez a gyök benzokinon-monoiminin át egy további szabadgyökös köztiterméket képez, amely végül a 2-amino-3*H*-fenoxazin-3-on terméké oxidálódik.

IRODALOMJEGYZÉK

1. Szigyártó I. Cs., Simándi L. I., Párkányi L., Korecz L., Schlosser G.
Biomimetic oxidation of 3,5-ditert-butylcatechol by dioxygen catalyzed by a dioximatomanganese(II) complex. Kinetics and mechanism
Inorganic Chemistry (benyújtva)

ÁTMENETIFÉMEKET TARTALMAZÓ MEZOPÓRUSOS SZILIKÁTOK REDOXI ÉS KATALITIKUS TULAJDONSÁGAI

Szegedi Ágnes, Pálné Borbély Gabriella, Hegedűs Mihály, Margitfalvi József,
Lázár Károly, Kiricsi Imre*

A kilencvenes évek elején felfedezett M41S jelű anyagcsalád megjelenésével lehetővé vált a zeolitokénál nagyobb pórusátmérőjű katalizátorok/katalizátorhordozók kifejlesztése. Az anyagcsalád legtöbbet vizsgált tagja az MCM-41, melyben szabályos, méhsejt elrendeződésű, egységes méretű, 3-10 nm átmérőjű pórusok találhatóak. A pórusfalak nem kristályosak, azaz az MCM-41 amorf szilikátnak tekinthető. Az MCM-41 anyagok mind pórusméretüket, mind szerkezetüket tekintve alapvetően különböznek a kristályos aluminoszilikát zeolitoktól. Az alumíniummal szubsztituált MCM-41 anyagok gyengébb savak, mint a zeolitok, így nagyobb pórusátmérőjük ellenére, a szénhidrogének savkatalizált átalakítási reakcióiban nem mutattak olyan aktivitást, mint a zeolitok. A tudományos érdeklődés a savkatalízis felől mindinkább az átmenetifémekkel módosított, redoxi reakciókban használható MCM-41 alapú katalizátorok kialakítása felé tolódik el.

Munkánk célja az volt, hogy új, a zeolitokétól eltérő szerkezetű, azoknál aktívabb, redoxi katalizátorokat állítsunk elő. Közvetlen szintézissel, szol-gél és hidrotermális módszerrel vas-, réz- és kobalttartalmú MCM-41 mintákat készítettünk.

Megállapítottuk, hogy az átmeneti fémek kb. 4 tömeg % mennyiségben helyettesíthetik a szilíciumot, anélkül, hogy az MCM-41 pórus szerkezete károsodna. Minden készítményben kimutatható volt Lewis-savas centrumok jelenléte, ami arra utalhat, hogy az átmeneti fémek beépültek az MCM-41 szerkezetébe.

A redoxi tulajdonságokat vizsgálva kimutattuk, hogy a Fe-MCM-41 redukciójakor csak egy elektronátmenettel járó folyamat megy végbe 700°C -ig ($\text{Fe(III)} \rightarrow \text{Fe(II)}$). A kationos vas annak következtében stabilizálódik, hogy oxigéneken keresztül az MCM-41 vázhoz kapcsolódik. Az anyagon redoxi mechanizmusú katalitikus reakció játszódhat le.

A kétértékű rézionok kevésbé kötődnek a szilikátvázhoz, redukció során finom eloszlású fémes réz klaszterek képződnek, melyek egy kis hányada visszaoxidálható. A kobalt-tartalmú MCM-41 mintákban 800°C -ot meghaladó hőmérsékleten is csak a kobalt egy része redukálható fémes állapotig, ami arra utal, hogy a minta kobalt-szilikátot tartalmazhat.

Fe-MCM-41 készítményeink aktív katalizátorok voltak a toluol benzil-kloridos alkilálásában. A reakció intermedierjei, a benzil-karbénium ionok, redoxi mechanizmussal

képződhetnek. A vastartalmú MCM-41 anyagok magas hőmérsékletű redukció után kiemelkedő aktivitást mutattak szén-monoxid oxidációjában alacsony hőmérsékleten (40-50°C). Hasonló aktivitást eddig csak nemesfém tartalmú katalizátorokon figyeltek meg. Vizsgálatainkból arra következtettünk, hogy a katalitikus aktivitásért ionos és nagydiszperzitású fémes vas képződmények együttes jelenléte felelős.

* Szegedi Tudományegyetem, Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék

IRODALOMJEGYZÉK

1. Szegedi Á., Pál-Borbély G., Lázár K.
Comparison of the redox properties of iron incorporated in different amounts into MCM-41
React. Kinet. Catal. Lett. *74*, 277-287 (2001)
2. Pál-Borbély G., Szegedi Á., Lázár K., Beyer H. K.
State and redox behavior of iron in MCM-41
Stud. Surf Sci. Catal. *135*, 150-151 (2001)
3. Lázár K., Pál-Borbély G., Szegedi Á., Beyer H. K.
Coordination and oxidation states of iron incorporated in mesoporous MCM41
Hyperfine Interactions *139*, 19-31 (2002)
4. Lázár K., Pál-Borbély G., Szegedi Á., Beyer H. K.
Coordination and oxidation state of iron incorporated into MCM-41
Stud. Surf Sci. Catal. *142*, 13470-1354 (2002)
5. Szegedi Á., Kónya Z., Méhn D., Solymár E., Pál-Borbély G., Horváth Zs. E., Biró L. P., Kiricsi I.
Spherical mesoporous MCM-41 materials containing transition metals: synthesis and characterization
Applied Catalysis A: General *272*, 257-266. (2004)
6. Szegedi Á., Hegedűs M., Margitfalvi J. L., Kiricsi I.,
Low temperature CO oxidation over iron-containing MCM-41 catalysts,
Chemical Communication 1441-1443, (2005)

ÚJ, MÉHSEJT SZERKEZETŰ ZEOLIT/SZÉN KOMPOZIT ANYAGOK

Onyestyák György, Valyon József, Papp Katalin

Zeolit kristályok agglomerátumaiban gyakran a kristályok közötti diffúzió sebessége szab határt az adszorpciós vagy katalitikus folyamatok sebességeinek. A zeolit adszorbensek és katalizátorok előnyös tulajdonságai teljesen csak akkor nyilvánulhatnak meg, ha nem a kristályközi anyagtranszport a sebességmeghatározó, azaz a makropórusok ellenállása az anyagtranszporttal szemben kicsi. Ebben a tekintetben előnyösnek bizonyultak a méhsejt szerkezetű anyagok. Kerámia (pl. kordierit) hordozós katalizátorok igen elterjedten használatosak a gépkocsik szennyező anyag kibocsátásának csökkentésére. A jelenlegi gyártástechnológiai korlátok miatt, az ipari méhsejtszerű monolitok hátránya a viszonylag nagy csatornaátmérők miatti kicsiny falfelület. Toboztermésű fák szabályos darabjainak elszenesítésével hasonló csatorna szerkezetű, de több mint egy nagyságrenddel nagyobb falfelületű hordozók állíthatóak elő.

Faanyagok elszenesített sejtszövegeinek hordozóként, ill. templátként történő alkalmazása új utat jelent az egységes, hierarchikusan szervezett, mikro-és makro-pórusokat tartalmazó adszorbensek és katalizátorok (kompozitok) előállítására. Hordozóként 700 °C-on nitrogén áramban karbonizált 1 cm³-es lucfenyő kockákat alkalmaztunk. E faszén darabkák 1-3 mikron falvastagságokkal 20-30 mikron átmérőjű szögletes alakú és egymással párhuzamos csatornákat tartalmaznak. Az elszenesedet sejtfa belső felületei hidrofób tulajdonságúak és ez hátrányos a csatornák víztartalmú géllal való feltöltése során, ami a zeolit szintéziséhez szükséges. A szén hordozó hidrofób jellege különféle oxidatív eljárásokkal, oxigéntartalmú funkciós csoportok létrehozásával csökkenthető. Evakuálást követően a faszén kockákat telítjük a szintézis géllal és a zeolit-szintézis érdekében hidrotermális kezelésnek vetjük alá. Az eljárás során olyan kompozit anyag jön létre ahol a szén makropórusait vékony, kristályos zeolitréteg (pl. Na-X vagy -mordenit) boríthatja be. Az anyagra jellemző az alacsony kristályközi diffúziós ellenállás, ezért kedvező tulajdonságú adszorbensek, ill. katalizátorok nyerhetők. Részletesen tanulmányoztuk az előállítás körülményei és a kapott kompozit anyag tulajdonságai közötti kapcsolatokat.

A szénhordozó felületén elegendő poláros funkciós csoportot létrehozva és mikro-kristályok képződéséhez elegendő számú kristálygóc létrejöttét lehetővé téve a méhsejtszerű szénszerkezet belső felülete összefüggően beborítható vékony zeolit kéreggel. A viszonylag tág csatornák kicsiny ellenállású utat biztosítanak a zeolit kristályokhoz.

IRODALOMJEGYZÉK

1. Onyestyák Gy., Rees L. V. C., László K.
Molecular sieve honeycomb for air separation from *Picea abies*
Helvetica Chimica Acta 87, 1888-1893 (2004)
2. Onyestyák Gy., László K.
Picea Abies- A Precursor for Molecular sieve honeycomb monolith,
CD-ROM of the Carbon 2004 (Proceedings produced for the American Carbon Society by
Omnipress)
3. Onyestyák Gy., Vályon J., Papp K.
Novel biomorphous zeolite/carbon composite having honeycomb structure
Materials Science and Engineering (nyomdában)
4. László K., Onyestyák Gy., Rochas C., Marthi K., Geissler E.
Honeycomb carbon monoliths from *Pinus sylvestris*
Carbon (nyomdában)

NANOGYŰRŰK ÉS MIKROSZERKEZETEK ÓN-OXID VÉKONYRÉTEGEKBEN

Tolnai Gyula, Nagy Péter, Trif László, Kormos Fiammetta*, Kálmán Erika

Az antimonnal dópolt ón-oxid (ATO) vékonyrétegek jelentősége széleskörű alkalmazhatóságuknak köszönhetően közismert. Különböző hordozókra (üveg, fém és kerámia) felvitt ATO-rétegek kiválóan alkalmasak az érzékelők, a korrózióvédelem, valamint az elektrokémia számos területén. Az antimon, mint adalékanyag bevezetése révén az eredetileg nem vezető ón-oxid vezető tulajdonságúvá válik és az adalék mennyiségének változtatásával a kompozit optikai és vezetőképességi tulajdonságai egyszerűen szabályozhatóak. ATO-filmek kialakíthatóak CVD, Spray-pirólízis, illetve az ún. nedves kémiai eljárásokkal is. Az ezek közé tartozó szol-gél technika számos előnyös vonással rendelkezik, úgymint: egyszerű előállítási folyamat, az adalékkomponens mennyisége precíz és megbízható szabályozhatóságának lehetősége, valamint alacsony költség.

Munkánk során különböző mennyiségű (0-5% között) antimonnal dopolt ón-oxid nanoszerkezetű rétegeket állítottunk elő üvegfelületeken, spin-coating technikával. Az előállított rétegek mikro- és nano-léptékű morfológiai tulajdonságait optikai mikroszkópiás, valamint atomerő mikroszkópiás technikákkal tanulmányoztuk. A szol-gél eljárás megvalósítása a következő lépéseket foglalta magába: (1) ón-oxid nanorészecskék etanol-közegű szoljainak előállítása, (2) mono- és multirétegek kialakítása spin-coating technikával, (3) a rétegek szárítása és hőkezelése.

Az előállított nanorétegek jellemzése az alábbi módszerekkel történt (1) mikroszkópos vizsgálatok a rétegek jellemző mintázatainak és az elért fedettségnek a megállapítására, (2) a tökéletes fedettségű rétegek előállításához szükséges paraméterek kísérleti meghatározása, (3) felület-analitikai vizsgálatok az összetétel (XPS) és a kristályszerkezet (XRD) megállapítása végett.

Munkánk során azt tapasztaltuk, hogy a szol-gél rétegek spin-coating technikával történő kialakítása, illetve az ezt követő hőkezelés megvalósításától függően a legváltozatosabb mikro- és nanoszerkezettel rendelkező vékonyrétegek keletkeznek, melyek a mikro-fenyő szerkezettől a nanogyűrűig vezetnek el.

*Institute of Chemistry „Raluca Ripan”, Cluj-Napoca, Románia

A KORRELÁCIÓS ÉS ZÉRÓPONT-ENERGIA NUKLEÁRIS KONFIGURÁCIÓ ÉS ELEKTRONSZÁM FÜGGÉSÉNEK STATISZTIKUS ANALÍZISE MOLEKULÁRIS RENDSZEREKBE

Kristyán Sándor, Margitfalvi L. József

Az utóbbi években egy módszer-párt fejlesztettünk ki: a REBECEP-et (Rapid Estimation of Basis Set Error and Correlation Energy from Partial Charges) [1-3] a korrelációs energia és bázishiba becslésére, valamint a REZEP-et (Rapid Estimation of Zero Point Energy from Partial Charges) [4-5] a zérópont-energiára; mindkettő számítása a parciális töltésekből történik. A G2 és G3/99 totál elektronikus energia adatbázist használtuk, valamint a skálázott HF-SCF/6-31G(d) zérópont-energiákat, mindkettőt bizonyos parciális töltésekkel együtt. Több mint száz zárt héjú, semleges molekulát vizsgáltunk, melyek H, C, N, O és F atomokból épülnek fel. Módszerünk 1 kcal/mol átlagos abszolút eltérés körüli értéket mutatott a kísérleti értékektől, ugyanakkor a CPU idő és merevlemez terület igény sokkal kisebb volt. Bemutatásra kerül egy statisztikai analízis és néhány összefüggés, ami egyben plauzibilis fizikai háttérrel ad a paramétereknek melyek empirikus módszerünkben előfordulnak. A címben jelzett összefüggés egyébként is érdekes lehet a korrelációs energia és zérópont-energia általános elméletében. Erre a módszerre szeretnénk alapozni a kombinatorikus [6] kutatásainkhoz kapcsolódó számításainkat is a katalízis és az anyagtudomány területén.

IRODALOMJEGYZÉK

1. Kristyán S.
Immediate estimation of correlation energy for molecular systems from the partial charges on atoms in the molecule
Chemical Physics 224, 33-51 (1997)
2. Kristyán S., Csonka G. I.
Fitting atomic correlation parameters for RECEP (Rapid Estimation of Correlation Energy from Partial Charges) method to estimate molecular correlation energies within chemical accuracy
Journal of Computational Chemistry 22, 241-254 (2001)
3. Kristyán S., Csonka G. I.
Accurate thermochemistry from corrected Hartree Fock results: Rapid Estimation of Correlation Energy from Partial Charges (RECEP) using the small 6-31G(d) basis set
Theoretical Chemistry Account 106, 319-328 (2001)

4. Ruzsinszky A., Kristyán S., Margitfalvi J. L., Csonka G.I.
Rapid estimation of zero point energies of molecules using Hartree-Fock atomic partial charges
Journal of Physical Chemistry A *107*, 1833-1839 (2003)
5. Kristyán S., Margitfalvi J.L., Csonka G. I.
The performance of the method rapid estimation of zero point energies for corrected potential energy surfaces
Reaction Kinetics and Catalysis Lettes (nyomdában)
6. Morgan D., Ceder G., Curtarolo S.
High-throughput and data mining with ab initio methods
Measurement Science & Technology *16*, 296-301 (2005)

KORRÓZIÓVÉDŐ LANGMUIR-BLODGETT ÉS ÖNSZERVEZŐDŐ RÉTEGEK VIZSGÁLATA ÖSSZEGFREKVENCIA-KELTÉSI SPEKTROSKÓPIÁVAL

Keszthelyi Tamás, Pászti Zoltán, Rigó Tímea, Hakkel Orsolya, Telegdi Judit, Guzzi László

Felületek tudatos, célorientált módosítását mono- és multimolekuláris rétegek alkalmazásával érhetjük el, melyek létrehozására gyakorta alkalmazott módszer a molekulák önszerveződése, valamint a Langmuir-Blodgett (LB) filmtechnika. Jelen vizsgálataink hosszú szénláncú hidroxámsavak és foszfonovegyületek üveg és fém (armcovas és réz) felületeken való viselkedésének jellemzésére irányultak. Ezen vegyületekből LB és önszerveződő technikával kialakított felületi mono- és multimolekuláris rétegekkel módosított szilárd hordozókról korábbi elektrokémiai és mikrobiológiai vizsgálatokkal kiderítettük, hogy ezek a nanorétegek mind a fémek korrózióját, mind mikroorganizmusok megtapadását nagymértékben gátolják.

A Langmuir-Blodgett technikával készült mintákról felvett összegfrekvenciás spektrumok arra utalnak, hogy mindegyik minta esetében sikeres volt egy homogén, rendezett réteg kialakítása. A korróziógátlás szempontjából fontosabb vas és rézfelületeken az SFG- spektrumokat a hordozóról származó nemrezonáns jel bonyolítja. Az üveghordozóra felvitt rétegek spektrumai ezen interferenciától mentesek, így hasznos kiindulópontul szolgálnak az anyagrendszer vizsgálatában. A spektrumok analízisével megállapítottuk, hogy a hidroxámsavak és foszfonovegyületek molekuláinak alkilláncai az üveghordozó felületére közel merőlegesen helyezkednek el. Az alkilláncok konformációját a fejcsoport milyensége nem befolyásolja jelentősen.

Az önszerveződő rétegek kialakulásának időfüggését is tanulmányoztuk vas és réz felületen, továbbá a kialakult réteg szerkezetét az LB-technikával készült rétegek szerkezetével hasonlítottuk össze. Az önszerveződő rétegek végleges rendezettségének kialakulásához az egyes hordozó/adszorbens párok esetén eltérő időre van szükség, azonban az összegfrekvencia-keltési spektrumok tanúsága szerint mindegyik esetben a kialakuló réteg rendezettsége megközelíti az LB-technikával kialakított réteg rendezettségét.

IRODALOMJEGYZÉK

1. Telegdi J., Rigó T., Kálmán E.
Nanolayer barriers for inhibition of copper corrosion
Corrosion Engineering Science and Technology 39, 65-70 (2004)
2. Telegdi J., Rigó T., Kálmán E.
A réz korróziójának gátlása molekuláris nanofilm-bevonatokkal
Magyar Kémiai Folyóirat 109-110, 116-118 (2004)
3. Keszthelyi T., Pásztai Z., Rigó T., Hakkel O., Telegdi J., Gucci L.
Nemlineáris optikai módszer határfelületi jelenségek *in-situ* vizsgálatára: az
összegfrekvencia-keltési spektroszkópia és néhány alkalmazása
Magyar Kémiai Folyóirat (benyújtva)
4. Telegdi J., Rigó T., Beczner J., Kálmán E.
Influence of Langmuir-Blodgett nanolayers on microbial adhesion
Surface Engineering (nyomdában)
5. Telegdi J., Rigó T., Kálmán E.
Molecular layers of hydroxamic acids in copper corrosion inhibition
Journal of Electroanalytical Chemistry (nyomdában)

ELEKTROKÉMIAI VIZSGÁLATOK VAS POLIKRISTÁLY SZEMCSEHATÁRON

Kármánné Herr Franciska, Kálmán Erika, Andreas Schreiber*, Joachim W. Schultze*,

Manuel M. Lohrengel*

Az irodalomban néhány éve jelentek meg először a polikristályos anyagok passzivációs viselkedésével foglalkozó cikkekben az egyes eltérő orientációjú szemcsék in situ tanulmányozására vonatkozó adatok Ti, Zr, Zn, Al fémek esetén. Az atmoszférikus körülmények között oxidos réteggel borított acélfelület ilyen jellegű vizsgálatai eddig elsősorban rozsdamentes (erősen ötvözött) acélok sajátságaira vonatkozott.

Amennyiben polikristályos szerkezetű anyag tulajdonságait vizsgáljuk, a szövetszerkezet viselkedése rendszerint az egyes szemcsék eltérő sajátságait elfedő, átlagos tulajdonságokat mutatja. Az eltérő kristályorientáció hatását egykristályokon tanulmányozhatjuk, bár ennek a módszernek számos hátránya van, pl. az ilyen vizsgálatokkal nehéz elérni a technikailag lehetséges szerkezeti anyagokkal való hasonlóságot. A tudományos igényű vizsgálatokban ezért elterjedőben van, az egykristályok mellett, a polikristályos anyagok egy-egy szemcséjének vagy a szemcsehatároknak a vizsgálata.

Nemzetközi együttműködés keretében Düsseldorfban, az egyetem Fizikai Kémiai Intézetében kidolgozott "droplet cell/ csepp cella" alkalmazásával 10-150 µm területen tudunk elektrokémiai méréseket végezni. Ez a technika alkalmas polikristályos és "iker kristály" tiszta vas felületén az eltérő orientációjú kristályok viselkedésének tanulmányozására. A kristályorientációt visszaszórt elektron diffrakció (EBDS)-technikával határoztuk meg a csepp cellában; ciklikus voltammetriát alkalmaztunk.

Méréseink azt mutatták, hogy különböző oxidrétegek alakulnak ki a különböző kristályorientációkon, ezért ezek elektrokémiai viselkedése is eltérő.

*AGEF e.V. - Institut an der Heinrich-Heine-Universität, Düsseldorf

IRODALOMJEGYZÉK

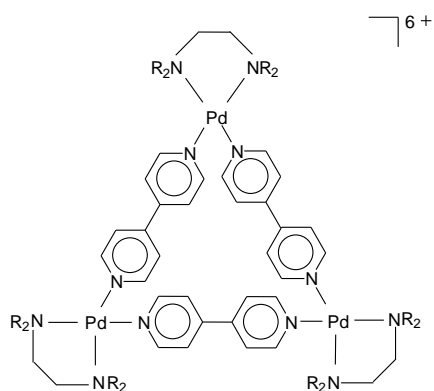
1. Schultze J. W., Davepon B., Kármán F., Rosenkranz C., Schreiber A., Voigt O.
Corrosion and passivation in nanoscopic and microscopic dimensions: the influence of grains and grain boundaries
Corrosion Engineering, Science and Technology 39, 45-52 (2004)

SZERKEZETI KÉMIAI SZEKCIÓ

SZTÉRIKUS HATÁSOK MEGNYILVÁNULÁSA PALLÁDIUMKOMPLEXEK ÖNSZERVEZŐDÉSÉBEN

Hollóné Sitkei Eszter, Tárkányi Gábor, Párkányi László és Besenyei Gábor

A kémiai kötések klasszikus, lépésenkénti kialakításához képest felbecsülhetetlen értékű előrelépést jelent a szerves szintéziseknek az az új megközelítése, mely szupramolekuláris szerkezetek kialakításához kinetikailag labilis, másodrendű kötések használ. E módszert alkalmazva mintegy tizenöt éve vizsgálják átmenetifém-komplexek gyűrűs nanoszerkezetekké történő szerveződését. Az így előállított molekulák alakja különféle geometriai formákra emlékeztet, úm. négyzet, háromszög, tetraéder, gömb, létra stb. Eddig viszonylag kevés figyelmet fordítottak a sztérikus kölcsönhatások vizsgálatára, bár ezek döntően meghatározhatják a molekulák alakját vagy a reakcióelegyben fellépő specieszek egyensúlyi viszonyait.



Munkánk során azt tűztük ki célul, hogy a kelátképző ligandum térigényének változtatásával befolyásoljuk az önszerveződési folyamatot. A $[Pd(N^N)]^{2+}(NO_3^-)_2$ komplexek (M) előállításához etilén-diamin származékokat és analógokat használtunk, majd ezeket 4,4'-bipiridinnel (L) reagáltattuk (N^N jelentése: etilén-diamin, en, 1,3-diamino-propán, 1,3-dap, tetrametil-etilén-diamin, tmen, tetraetil-etilén-diamin, teen, dimetil-piperazin, dmpip és homopiperazin, hpip). DOSY és VT NMR vizsgálatok azt mutatták, hogy a reakciókban molekuláris háromszögek és négyzetek elegye képződik. Amint a táblázat adataiból látható, a kelátképző nitrogénatomok közötti szénláncok száma és mérete nincs jelentős hatással a Δ/\square arányra, azonban az etilén-diamin NH₂-hidrogénatomjait metil- vagy etilcsoportokra cserélve az M₃L₃ komponens arányának jelentős növekedése figyelhető meg. Ezek az eredmények azt jelzik, hogy a $\phi(N-Pd-N)$ harapási szög nem alkalmas paraméter a ligandumok térigényének előrejelzésére. Érdeemes megemlíteni, hogy a viszonylag kis térigényű etilén-diamin ligandumnál is megfigyeltük az M₃L₃ összetételű komplex képződését, bár e speciesz létezésére az eddigi irodalmi adatok nem utaltak. Az adatok az 1. táblázatban láthatók.

	Kelátképző ligandumok					
	dmpip	hpip	1,3-dap	en	tmen	teen
$\phi(N-Pd-N)^a$	72°	77°	90°	84°	85°	85°
Δ/\square arány ^b	17:100	7:100	16:100	5:100	63:100	>250:100

1. táblázat: ^a a CCDC adatbázisban szereplő szerkezetek alapján; ^b ¹H NMR, 25 °C, D₂O

MORFOTRÓPIA: KAPCSOLAT A SZERVES KRISTÁLYOK IZOSZTRUKTURALITÁSA ÉS POLIMORFIÁJA KÖZÖTT

Kálmán Alajos

A. I. Kitajgorodszkij 1955-ben oroszul, majd "*Organic Chemical Crystallography*" címmel 1961-ben angolra lefordított könyvében "*morfotróp lépésnek*" nevezte azt a szoros illeszkedés-átrendeződést, amely a kémiaailag hasonló molekulák nemizomorf kristályait összekapcsolja. Az átrendeződés a molekulák méret (vagy szubsztituens) változásából eredő szoros (60-70%-os) illeszkedés csökkenését ellensúlyozza. Az átrendeződés(ek) mibenlétének leírásával azonban adós maradt. 2000-től kezdődően az általunk vizsgált 2-hidroxicikloalkán karbonsavak és analóg karboxamidok szupramolekuláris önszerveződésének vizsgálata a szoros illeszkedés kilenc kanonikus formáját derítette fel [1-3, 7]. Ezek homo-, illetve heterokirális molekulák hidrogénhidakkal összekötött láncainak *antiparallel* vagy *parallel* társulásából épülnek fel. Mivel mind a kilenc mintát legalább egy kristályban azonosítottuk, kémiai hasonlóságaik és krisztallográfiai jellemzőik ahhoz a felismeréshez vezettek, hogy ezek a *minták* páronként egy-egy *motívum* (dimer, tetramer, helix) nem krisztallográfiai (90° vagy 180°-os) elfordulásában különböznek [4-6]. Határesetben, triklin, ill. monoklin elemi cellában, 180°-kal a teljes minta is megfordulhat. Eredményeink, valamint a szakirodalomban talált hasonló esetek mellett, a görög *morfo* és *troposz* szavak helyes fordítása is segített abban, hogy a morfotrópiát általánosan értelmezzük. A jelenség tehát a szerkezeti motívumoknak a szoros illeszkedés csökkenését kiegyenlítő nem krisztallográfiai elfordulása. Kimutattuk: (1) hogy az izostrukturális sorok *megtörése* motívumátfordulással a molekulák szoros illeszkedésének egy másik kanonikus mintáját hozza létre, (2) hogy a (*cisz-transz*) sztereoiszomerek kristályai kiralitásbeli különbségeiket gyakran morfotrópián keresztül demonstrálják, (3) és amennyiben polimorf kristályok mutatnak morfotrópiát, akkor az oldószer vagy más fizikai hatás (pl. olvadás) alatt a motívum nemcsak jelképesen (virtuálisan), hanem valóban át is fordul.

A morfotrópia általunk közölt korábbi (1993, 1997) észlelése után, az utóbbi öt év kutatási eredményei a *nem krisztallográfiai* szimmetriák, azaz *forgások* szerepét a szoros illeszkedés fenntartásában jobb megvilágításba helyezték. E sokáig figyelmen kívül hagyott jelenség tisztázása új gondolkodásmódot vezethet be olyan látszólag ellentétes szupramolekuláris jelenségek vizsgálatában, mint az izostrukturalitás és a polimorfia.

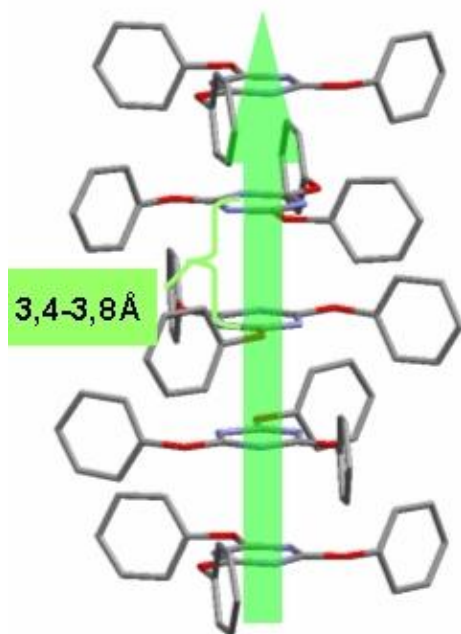
IRODALOMJEGYZÉK

1. Kálmán A., Argay Gy., Fábrián L., Bernáth G., Fülöp F.
Basic form of supramolecular self-assembly organized by parallel and antiparallel hydrogen bonds in the racemic crystal structures of six disubstituted and trisubstituted cyclopentane derivatives
Acta Cryst. B 57, 539-550 (2001)
2. Kálmán A., Fábrián L., Argay Gy., Bernáth G., Gyarmati Zs.
Novel, predicted patterns of supramolecular self-assembly afforded by tetrameric $R_4^4(12)$ rings of C_2 symmetry in the crystal structures of 2-hydroxy-1-cyclopentanecarboxylic acid, 2-hydroxy-1-cyclohexanecarboxylic acid and 2-hydroxy-1-cycloheptanecarboxylic acid
Acta Cryst. B 58, 494-501 (2002)
3. Kálmán A., Fábrián L., Argay Gy., Bernáth G., Gyarmati Zs.
Predictable close packing similarities between *cis*- and *trans*-2-hydroxy-1-cyclooctanecarboxylic acid and *trans*-2-hydroxy-1-cyclooctanecarboxamide
Acta Cryst. B 58, 855-863 (2002)
4. Kálmán A., Fábrián L., Argay Gy., Bernáth G., Gyarmati Zs.
Dipole induced polymorphs of *trans*-2-hydroxycycloheptanecarboxylic acid with virtually the same unit cell
J. Am. Chem. Soc. 125, 34-35 (2003)
5. Kálmán A., Fábrián L., Argay Gy., Bernáth G., Cs. Gyarmati Zs.
Different forms of antiparallel stacking of hydrogen-bonded antidromic rings in the solid state: polymorphism with virtually the same unit cell and two-dimensional isostructurality with alternating layers
Acta Cryst. B 60, 755-762 (2004)
6. Fábrián L., Kálmán A., Argay Gy., Bernáth G., Cs. Gyarmati Zs.
Two polymorphs of β -lactam (trans-13-azabicyclo[10.2.0]tetradecan-14-one) Concomitant crystal polymorphism and isostructurality
Chem. Commun 2114-2115 (2004)
7. Fábrián L., Kálmán A., Argay Gy., Bernáth G., Cs. Gyarmati Zs.
Crystal engineering with alicyclic β -amino acids: Construction of hydrogen-bonded bilayers
Crystal Growth & Design 5, 773-782 (2005)

ÚJ, KRISTÁLYOS SZUPRAMOLEKULÁRIS RENDSZEREK SZINTÉZISE ÉS RÖNTGENDIFFRAKCIÓS SZERKEZETMEGHATÁROZÁSA

Báthori Nikoletta, Czugler Mátyás, Bombicz Petra, Bihátsi László*

A szupramolekuláris kémia dinamikusan fejlődő ága a tervezett tulajdonságú zárványkristályok előállítására. Szerkezetvizsgálatokból kapott ismereteket felhasználva új, megváltozott szterikus és elektronikus tulajdonságú, más molekulák befogására képes gazdamolekulákat terveztünk. Ezek kémiai szintézisét követi a szupramolekuláris szintézis: a kristályosítás. C_3 szimmetriájú gazdavegyületeket állítottunk elő, melyektől azt vártuk, hogy kristályrácsba rendeződéskor Piedfort-párként asszociálódjanak. A háromfogású szimmetria előnyös nagypórusú, esetenként nem centroszimmetrikus kristályok kialakulásakor.



1. ábra Piedfort elrendeződés a kristályban

Ilyen szupramolekuláris rendszerekben a háromfogású szimmetriájú molekulák pszeudohatfogású párhoz esetenként helikális elrendeződést alkotnak. Az asszociációt elektronikus ($\pi \cdots \pi$) és szterikus kölcsönhatások tartják össze a szimmetria-tengely mentén. (1. ábra). A központi gyűrű „oldalkarjaira” szimmetrikus, szubsztitúciós reakcióval halo-, alkil-, aril- és szilil-szubsztituált fenolokat vittünk fel. A szubsztituens változtatásával valósítjuk meg az intermolekuláris kölcsönhatások finomhangolását, vizsgáljuk hatásukat a Piedfort-pár kialakulására és azok elrendeződési módjára a kapott kristályokban.

Köszönjük az OTKA támogatását (T042642).

*BME Szervetlen Kémia Tanszék

IRODALOMJEGYZÉK

1. Nitsche S. I., Weber E., Seichter W., Báthori N., Beketov K. M., Roewer G.
Crystalline inclusion compounds derived from bulky organosilicon host - design,
synthesis, structure and stability
Silicon Chemistry 2, 55-71 (2003)

TERMIKUSAN INDUKÁLT METIL-VÁNDORLÁSSAL JÁRÓ KRISTÁLY-KRISTÁLY ÁTALAKULÁSOK ORGANOÓN(IV)-KOMPLEXEK KÖRÉBEN

Deák Andrea, Tárkányi Gábor

1998-ban meghatároztuk egy önszerveződő triorganoón(IV)-tetramer $[\text{Me}_3\text{Sn}(\text{PhN}_2\text{O}_2)]_4$ ($\text{PhN}_2\text{O}_2 = N$ -nitrozo- N -fenil-hidroxilamináto) kristályszerkezetét, és azt találtuk, hogy a röntgendiffrakciós mérés során az egykristály „összezsugorodott” és egyharmada elbomlott [1]. Ennek okaként először az egykristály röntgensugarakkal szemben mutatott érzékenységét és termikus instabilitását valószínűsítettük. Spektroszkópiai vizsgálatokból (NMR, Mössbauer) tudtuk [2, 3], hogy bizonyos oldószerekben beindul a triorganoón(IV)-tetramer *metil-vándorlással* járó *diszmutációja*, melynek során a megfelelő dimetilón(IV)-komplex és illékony tetrametilón(IV) képződik. Az előzőekben vázolt megfigyeléseink valószínűvé tették, hogy a röntgendiffrakciós mérések során tapasztalható nagyarányú bomlást a triorganoón(IV) \rightarrow diorganoón(IV) + tetraorganoón(IV) diszmutációs átalakulás okozta. Ezt a feltevésünket alátámasztandó, célul tűztük ki a diszmutációs reakciónak a végrehajtását *szilárd és olvadékfázisban*, kinetikájának meghatározását és a képződő termékek szerkezetvizsgálatát.

Azt találtuk, hogy melegítés hatására a $[\text{Me}_3\text{Sn}(\text{PhN}_2\text{O}_2)]_4$ tetramer $[\text{Me}_2\text{Sn}(\text{PhN}_2\text{O}_2)_2]_2$ dimerré történő diszmutációja szilárd és olvadékfázisban is végbemegy. Az újonnan képződött egykristályokon elvégzett röntgendiffrakciós szerkezetmeghatározás bebizonyította, hogy a szilárdfázisú metil-vándorlás eredményeképpen a *tetramer* (egy)kristályainak *szupramolekuláris szerkezeti átalakulása* a *dimer* (egy)kristályainak kialakulásához vezet. A *kristály-kristály átalakulás* az eredeti kristályszerkezet összeomlásán keresztül valósul meg, a kiinduló $P \bar{4}2_1/c$ tércsoport $P \bar{1}$ -re változik és a 20-atomos $\text{Sn}_4\text{O}_8\text{N}_8$ metallomakrociklus ötatomos SnO_2N_2 kelát gyűrűkké alakul, mialatt a ligandum koordinációs módusa is megváltozik: híd \rightarrow kétfogú kelát + kétmagvú híd. Kimutattuk, hogy az olvadékból nyert $[\text{Me}_2\text{Sn}(\text{PhN}_2\text{O}_2)_2]_2$ dimer a hagyományos, metatézissel előállított komplexszel [4] izostrukturális, polimorf és morfoftróp viszonyban van.

A szilárd és olvadékfázisú reakcióban képződött termékek molarányát és az olvadékfázisú átalakulás kinetikáját NMR-mérésekkel derítettük fel. A másodrendű $2A \rightarrow B + C$ kinetikával végbemenő átalakulás jelentősen gyorsabb olvadékból mint szilárd fázisban.

IRODALOMJEGYZÉK

1. Deák A., Haiduc I., Párkányi L., Venter M., Kálmán A.
Main group metal directed self-assembly in a tetrameric trimethyltin(IV) *N*-nitroso-*N*-phenylhydroxylaminato complex containing an unprecedented 20-membered inorganic (carbon-free) metallamacrocycle
European Journal of Inorganic Chemistry 1593-1596 (1999)
2. Deák A., Radics L., Kálmán A., Párkányi L., Haiduc I.
Heptacoordinate dimethyltin(IV)cupferronato complexes – X-ray and solid-state NMR structural analysis – Hydrogen bond supramolecular self-assembly
European Journal of Inorganic Chemistry 2849-2856 (2001)
3. Kárpáti Sz., Vankó Gy., Deák A., Kálmán A., Vértes A.
Investigations on structure and transformation of some organometallic compounds in solution
Hyperfine Interactions 144/145, 231-238 (2002)
4. Deák A., Venter M., Kálmán A., Párkányi L., Radics L., Haiduc I.
Synthesis and structural characterization of tin(IV) *N*-nitroso-*N*-phenylhydroxylaminato complexes: Crystal structures of $\text{Sn}(\text{O}_2\text{N}_2\text{Ph})_4$, $\text{Ph}_2\text{Sn}(\text{O}_2\text{N}_2\text{Ph})_2$ and $[\text{Me}_2\text{Sn}(\text{O}_2\text{N}_2\text{Ph})_2]_2$
European Journal of Inorganic Chemistry 127-132 (2000)

AZ ALUMÍNIUM ELOSZLÁSA MORDENITEK ÉS BÉTA ZEOLITOK KÜLÖNBÖZŐ PERIODIKUS ÉPÍTŐEGYSÉGEIBEN

Korányi Tamás I., B. Nagy János*

Zeolitok jellemzése szilárd fázisú Mágikus Szöggel Pörgetett Magmágneses Rezonancia (Magic Angle Spinning Nuclear Magnetic Resonance, MAS-NMR) spektroszkópiával szinte rutinfeladatnak tekinthető. Zeolitokban az Si-Al elrendeződés és a vázba beépült vagy a rácson kívüli pozíciókban elhelyezkedő alumínium állapota ^{29}Si - és ^{27}Al NMR-rel megismerhető. Az Si/Al arány és az öt különböző Si(nAl) (n=0-4) konfiguráció kristallográfiaiailag különböző helyeinek száma ^{29}Si -NMR-rel meghatározható a zeolitokban.

Bodart et. al. (1986, Journal of Physical Chemistry, 90, 5183) kiszámították az SiOH csoportok számát mordenitek (MOR) dezaluminálódását követően a tömbi Si/Al arányokból és a ^{29}Si - és ^{27}Al NMR eredményekből. Megmutatták, hogy az alumíniumatomok elsősorban tetraédes helyeket foglalnak el a MOR szerkezetének négytagú gyűrűiben.

Munkánk célja Bodart et. al. az előbbieken hivatkozott módszerének továbbfejlesztése abból a célból, hogy megértsük az Al-helyek eloszlását a tetraédes kristallográfiai helyeken és a MOR és béta (BEA) zeolitok dezaluminálódásának folyamatát egy magasabb szinten.

Előzetes (Korányi et. al., nyomdában) és jelenlegi (Korányi T. I., B. Nagy J., benyújtva) eredményeink alapján egy új módszert mutatunk be az alumínium atomok eloszlásának számítására ezen zeolitok különböző periodikus építőegységeiben.

A MOR és BEA rácsok részletes elméleti szerkezetanalízise lehetővé tette a hibahelyek eredetének, a dezaluminálódás és az ioncsere mechanizmusának mélyebb megértését az Si- és Al-helyek eloszlásának ^{29}Si - és ^{27}Al NMR analízise alapján. Képesek vagyunk megkülönböztetni az eredeti hibahelyekből származó vagy a dezaluminálódási, ill. kalcinálódási folyamatban keletkező Si(OH)_x csoportokat. A mordenitek nagyobb arányban tartalmaznak szilikalit periodikus építőegységeket, mint a béta zeolitok hasonló Si/Al arányoknál. A mordenitek dezaluminálódása az eredeti hibahelyek eltűnését és új szilanol csoportok képződését eredményezte. A MOR-nál szimmetrikusabb BEA-szerkezet jobban megőrzi mindkétféle hibahely jelenlétét. A protonok ioncseréje kobalt ionokra befolyásolta az oktaédes környezetű alumínium tetraédesre alakulását a BEA-zeolitokban.

* Laboratoire de R.M.N, Facultes Universitaires Notre Dame de la Paix, Namur, Belgium

IRODALOMJEGYZÉK

1. Korányi T. I., Föttinger K., Vinek H., B. Nagy J.
Characterization of aluminium siting in MOR and BEA zeolites by ^{27}Al , ^{29}Si NMR and FTIR spectroscopy
Studies in Surface Science and Catalysis (nyomdában)
2. Korányi T. I., B. Nagy J.
Distribution of aluminium in different periodical building units of MOR and BEA zeolites
Journal of Physical Chemistry B (benyújtva)

**RÉZ(II)-OLIGOGLICIN KOMPLEXEK SZERKEZETI VÁLTOZATOSSÁGA:
MIKROSPECIÁCIÓ ÉS KOORDINÁCIÓS MÓDOK MEGHATÁROZÁSA
KÉTDIMENZIÓS ESR-SPEKTROSKÓPIÁVAL**

Nagy Nóra Veronika, Plánkáné Szabó Terézia*, Rockenbauer Antal, Peintler Gábor*,
Nagypál István*, Korecz László

Réztartalmú metalloenzimeket modellező réz(II)-oligopeptidek komplex egyensúlyi rendszereit vizsgáltuk. A diglicin-, triglicin- és tetraglicin- réz(II) egyensúlyi rendszerekben a peptidváz koordinációs tulajdonságairól nyerhetünk részletes felvilágosítást, ami lényegesen elősegíti, hogy tisztázzuk a kistagszámú peptidek koordinációját. Elsősorban a ligandumfeleslegben képződő biszkomplexek összetételét és szerkezetét kívántuk meghatározni, mert e területen csak ellentmondásos irodalmi adatok állnak rendelkezésre.

Az említett paramágneses rendszerek vizsgálatát kétdimenziós ESR-spektroszkópiai módszerrel végeztük el, amelynek előnye, hogy: (1) felvilágosítást nyújt a fémion közvetlen koordinációs környezetéről, (2) a mérések folyékony vizes oldatban végezhetőek jól közelítve a biológiai rendszerek körülményeit, (3) a kapott spektrumsorozat jól felbontható az egyidejűleg megjelenő komplexek színeképeire, (4) az azonos összetételű, de eltérő szerkezetű komplexek (izomerek) megkülönböztethetők különböző ESR-spektrumaik alapján. Az általunk kidolgozott spektrumfelbontási módszer a teljes spektrumcsomag egyidejű szimulációjával határozza meg valamennyi fémkomplex képződési állandóját és az aktív molekulafajták

ESR-paramétereit.

A réz(II) – oligoglicin rendszerekben nagyon változatos koordinációs módok alakulnak ki: mindhárom rendszerben egyaránt 14-14 fémkomplexet mutattunk ki. A monokomplexek a peptid-NH csoportok lépcsőzetes deprotonálódásával jönnek létre. Megállapítottuk, hogy erősen kovalens réz(II) – N síkbeli σ -kötések stabilizálják a növekvő számú kelátgyűrűt tartalmazó szerkezeteket. A módszer jó felbontóképessége lehetővé tette, hogy számos esetben kimutassuk a ligandumfeleslegben képződő biszkomplexek izomerjeit. Az ESR-paraméterek alapján megállapítottuk, hogy a biszkomplexekben is megmarad a csatolt kelátgyűrűs struktúra az egyik ligandum esetén, ha a kelátgyűrűben erősen koordinálódó terminális donoratom van jelen.

*Szegedi Tudományegyetem, Fizikai Kémia Tanszék

IRODALOMJEGYZÉK

1. Rockenbauer A., Szabó-Plánka T., Árkosi Zs., Korecz L.
A two-dimensional (magnetic field and concentration) electron paramagnetic resonance method for analysis of multi-species complex equilibrium systems. Information content of EPR spectra
J. Am. Chem. Soc. *123*, 7646-7654 (2001)
2. Nagy N. V., Szabó-Plánka T., Rockenbauer A., Peintler G., Nagypál I., Korecz L.
Great structural variety of complexes in copper(II)-oligoglycine systems. Microspeciation and coordination modes as studied by the two-dimensional simulation of electron paramagnetic resonance spectra
J. Am. Chem. Soc. *125*, 5227-5235 (2003)

FOURIER-TRANSZFORMÁCIÓS (FT-ICR) TÖMEGSPEKTROMÉTEREN VÉGZETT KÍSÉRLETEK MODELLEZÉSE

Drahos László, Peltz Csaba^{*}, Somogyi Árpád^{**}, Ron M. A. Heeren^{***}, Vékey Károly

Az elmúlt években elméleti modellt dolgoztunk ki tömegspektrométerekben lejátszódó folyamatok leírására, amelyet "MassKinetics"-nek nevezünk el. Ez a modell a vizsgált vegyület sorsát az ionizálástól a detektálásig nyomon követi, és alkalmas arra, hogy molekuláris paraméterek ismeretében a tömegspektrometriás kísérletek eredményét elméleti úton számolja. A modell alapján számítógépes programot fejlesztettünk ki, amely az internetről is letölthető (<http://www.chemres.hu/ms/masskinetics>). A program népszerűségét az 1052 regisztrált felhasználó jelzi.

A gázfázisú ionkémiában az ion-molekula ütközések vizsgálata régóta az érdeklődés középpontjában áll. Az ütközés energetikájáról és mechanizmusáról azonban csak néhány atomos molekulák esetén rendelkezünk részletes információval. Kutatásaink során olyan új kísérleti és számítási módszert dolgoztunk ki, amelynek segítségével nagy méretű molekulák - akár fehérjék vagy más biomolekulák - ütköztetési aktivációja vizsgálható. A módszer lényege, hogy FT-ICR tömegspektrométeren speciális gerjesztést végzünk: az ütközés hatására bekövetkező reakciót vizsgáljuk a hőmérséklet, a kinetikus energia és az idő függvényében, amelyet a MassKinetics program segítségével értékelünk ki. A számításainkkal gázfázisú ion-molekula ütközések során bekövetkező gerjesztés, valamint - a fotonkibocsátás hatására bekövetkező - hűlés mértékét határoztuk meg.

A módszer gyakorlati szempontból rendkívül hasznos, mert lehetőséget biztosít új elven alapuló tömegspektrometriás kísérletek tervezésére. Elméleti megfontolásaink alapján egy új kísérleti módszert terveztünk és ezt biokémiai szempontból fontos molekulákon (peptideken, proteineken és oligoszacharidokon) a gyakorlatban alkalmaztuk. Ennek során FT-ICR tömegspektrométeren nagy energiájú fragmens ionokat figyeltünk meg, ami a gyakorlati szerkezetkutatás, így pl. peptidszekvenálás hatékonyságát növeli.

* EGIS Gyógyszergyár Rt.

** University of Arizona, Tucson, USA

*** FOM AMOLF, Amsterdam, Hollandia

IRODALOMJEGYZÉK

1. Drahos L., Vékey K.,
MassKinetics: a theoretical model of mass spectra incorporating physical processes,
reaction kinetics and mathematical descriptions
Journal of Mass Spectrometry 36, 237-263 (2001)
2. Guo X. H., Duursma M. C., Kistemaker P. G., Nibbering N. M. M., Vékey K., Drahos L.;
Heeren R. M. A.,
Manipulating internal energy of protonated biomolecules in electrospray ionization
Fourier transform ion cyclotron resonance mass spectrometry
Journal of Mass Spectrometry 38, 597-606 (2003)
3. Drahos L., Sztáray J., Vékey K.,
Theoretical calculation of isotope effects, kinetic energy release and effective
temperatures for alkylamines
International Journal of Mass Spectrometry 225, 233-248 (2003)
4. Herrmann K. A., Somogyi Á., Wysocki V. H., Drahos L., Vékey K.
A new excitation technique for FT-ICR producing both high and low energy fragment
ions in a single spectrum
Journal of the American Society for Mass Spectrometry (közlésre elküldve)

KIS MOLEKULÁK ADSZORPCIÓJÁNAK VIZSGÁLATA

PT(111), PD(111), RH(111) FELÜLETEN

Bakó Imre

A molekulák átmeneti fémek felületén történő adszorpciójának vizsgálata jelentős érdeklődésre tart számot az elektrokémiában, korróziós folyamatokban, katalízisben stb. Annak ellenére, hogy ezt a kérdést már évtizedek óta vizsgálják, az adszorbeált molekulák geometriája, illetve a molekulák különböző rezgési módusainak meghatározása nem megoldott feladat.

Különböző kis molekulák (metanol, hexán, furán, formaldehid) adszorpcióját vizsgáltuk elméleti kémiai módszerekkel Pt(111), Pd(111) és Rh(111) felületen. Megvizsgáltuk a fém-molekula kötés tulajdonságait elektronsűrűség-különbség és PDOS (partial density of state) módszerekkel. A felületen kialakuló képződmények rezgési spektrumát is vizsgáltuk. Megállapítottuk, hogy metanol molekulák között a hidrogénkötés az adszorpció során megerősödik. Ezen számolások segítséget nyújtottak a Rh(111) felületen kialakuló metanol láncszerkezetek azonosításában [1]. Megmutattuk, hogy a formaldehid adszorpciója során a formaldehid HOMO pályájáról elektront küld a fém felé, míg a fém a formaldehid LUMO pályájára ad elektronokat.

IRODALOMJEGYZÉK

1. Koch H. P., Krenn G., Bakó I., Schennach R.
A RAIRS and DFT investigation of methanol dehydrogenation on Rh(111)/V alloy surfaces
J. Chem. Phys. (közlésre elfogadva)

AZ ACETON LÉGKÖRI FOTOKÉMIÁJA

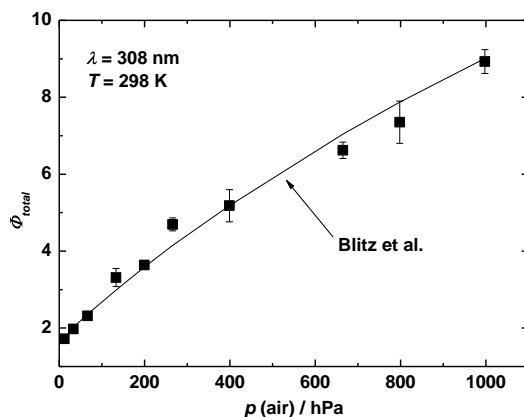
Kovács Gergely

Az aceton a troposzférában igen jelentős koncentrációban előforduló szerves molekula. A felső troposzférában az aceton fotolízise az egyik legjelentősebb HO_x forrás.

A legújabb laboratóriumi eredmények szerint – Blitz et al. (2004, Geophysical Research Letters, 31, L06111) – az aceton légköri körülmények között mért fotolízis kvantumhatásfoka hosszabb hullámhosszon erősen hőmérsékletfüggő, ellentétben a korábbi mérésekkel. Az új kvantumhatásfokokkal végzett modellezés eredményeként az aceton fotodisszociációja sokkal kisebb szerepet játszik a felső troposzféra kémiájában, mint korábban gondolták.

A korábban javasolt kvantumhatásfokok és a legújabb eredmények közti ellentmondás feloldására átfogó vizsgálatokba kezdünk az aceton légköri fotokémiáját és fotofizikáját illetően. Kidolgoztunk egy impulzus lézerfotolízis / gázkromatográfiás analízis módszert az aceton fogyási kvantumhatásfokának (Φ_{total}) meghatározására.

Meghatároztuk a fogyási kvantumhatásfokot 298-, 273-, 253-, és 233 K hőmérsékleten, két különböző nyomáson, szintetikus levegőben. Adatainkból a kvantumhatásfok csökkenése a hőmérséklet csökkenésével egyértelműen megállapítható, nagyon jó egyezést mutatva a hivatkozott irodalommal, cáfolva a korábbi hőmérséklet-független eredményeket.



1. ábra: Az aceton fogyási kvantumhatásfokának nyomásfüggése

Kimértük a fogyási kvantumhatásfok nyomásfüggését szintetikus levegőben, szobahőmérsékleten is. Az eredményeket az 1. ábrán, Stern-Volmer diagramon szemléltetjük. A tapasztalt nyomásfüggés nagyon jól reprodukálja az említett hivatkozásban előrejelzett, nyomásfüggő kvantumhasznosítási tényezőt.

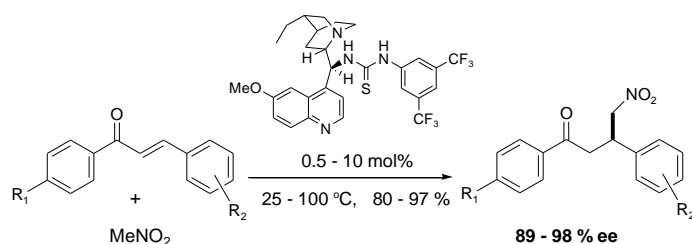
BIOMOLEKULÁRIS KÉMIAI SZEKCIÓ

KININ ALAPÚ ORGANOKATALIZÁTOR SZINTÉZISE ÉS MECHANIZMUSÁNAK VIZSGÁLATA

Vakulya Benedek, Varga Szilárd, Schubert Gábor, Pápai Imre, Soós Tibor

Az organokatalízis kifejezést azon reakciókra alkalmazzák, amelyekben szubsztöchiometrikus mennyiségű szerves molekula (mikroenzim) katalizálja a kémiai reakciót. Az elmúlt négy év során e kutatások óriási fejlődésen mentek keresztül, s ma már az organokatalízis a modern szerves kémia önálló területének tekintendő (Dalko P. I., Moisan L.: 2004, *Angew. Chem., Int. Ed.*, 43, 5138). Különösen nagy hatással vannak ezek az ismeretek a katalitikus aszimmetrikus reakciók vizsgálatára, hiszen számos esetben kiküszöbölhető fémtartalmú katalizátorok alkalmazása.

Vizsgálataink során előállítottunk egy bifunkcionális, kinin alapú organokatalizátort, amit aszimmetrikus Michael-addíciós reakciókban alkalmaztunk. Munkánk során arra is törekedtünk, hogy értelmezzük a katalitikus reakció enantioszelektivitását, valamint javaslatot tegyünk a lehetséges mechanizmusra is (1. ábra).



1. ábra

IRODALOMJEGYZÉK

1. Vakulya B., Varga Sz., Csámpai A., Soós T.
Highly enantioselective conjugate addition of nitromethane to chalcones using bifunctional cinchona organocatalysts
Organic Letters 7, 1967-1969 (2005)

A P450 ÖNSZERVEZŐDÉS HATÁSA AZ ENZIMAKTIVITÁSRA

Hazai Eszter, Bikádi Zsolt

Korábbi eredményeink szerint a P450 enzimek katalitikus aktivitását más P450 enzimek egyidejű jelenléte befolyásolhatja. Irodalmi adatok utalnak arra is, hogy nemcsak több enzimet tartalmazó komplex rendszerekben, hanem egyetlen izoenzimet tartalmazó rendszerben is a katalitikus aktivitáshoz szükséges a P450 enzimek kölcsönhatása. Kutatásaink célja annak megértése, miképpen képes befolyásolni az enzimek kölcsönhatása aktivitásukat. A publikált P450 szerkezetek elemzésével és fehérje-fehérje dokkolással a P450 enzimek négy dimerizációs típusát különböztettük meg. Ezek közül kettőben a dimerizáció befolyásolja a kötődés erősségét a P450 és a NADPH citokróm P450 (CPR) között – ez utóbbi flavoprotein biztosítja az elektronokat a P450 monooxigenázok működéséhez. A dimer motívumok közül kettő csak az enzim zárt (szubsztrát kötött) állapotából képződhet, míg a másik kétféle típus nyitott (szubsztrát mentes) állapotában is stabilis. A dimerek ezen tulajdonságai magyarázni képesek a kísérletileg megfigyelt adatokat, amik szerint a szubsztrát és a P450 enzimes család más tagjának jelenléte egyaránt befolyásolja az enzimaktivitást. Kinetikai modellt fejlesztettünk ki, mely alkalmasnak bizonyult a P450 önszerveződés hatásának leírására, saját és más szerzők kísérleti eredményeinek értelmezésére.

IRODALOMJEGYZÉK

1. Hazai E., Kupfer D.
Interactions between CYP2C9 and CYP2C19 in reconstituted binary systems influence their catalytic activity: possible rationale for the inability of CYP2C19 to catalyze methoxychlor demethylation in human liver microsomes.
Drug Metab. Dispos. 3, 157-164 (2005)
2. Hazai E., Bikádi Zs., Simonyi M., Kupfer D.
Association of cytochrome P450 enzymes is a determining factor in their catalytic activity
Journal of Computer-Aided Molecular Design (nyomdában)

**A 2-METIL-4-OXO-3H-KINAZOLIN-3-ACETILPIPERIDIN (Q5)
ANTIEPILEPTIKUS HATÁSA ÉS HATÁSMECHANIZMUSA *IN VITRO***

Lasztóczy Bálint, Emri Zsuzsa, Nyikos Lajos, Kardos Julianna

Mivel az epilepsziás betegek egyharmada még mindig nem gyógyítható a jelenleg rendelkezésre álló gyógyszerekkel, ezen a területen új hatásmechanizmusú gyógyszerek létrehozatalára van szükség. Ennek egy lehetőségét kínálja a serkentő L-glutaminsav (Glu) receptorok farmakológiai befolyásolása. Patkány agykéregből előállított membrán-vezikula preparátumon végzett korábbi, funkcionális vizsgálatok szerint a 2-metil-4-oxo-3H-kinazolin-3-acetilpiperidin (Q5) egy altípus-szelektív Glu receptor (α -amino-3-hidroxi-5-metilizoxazol-4-propionsav: AMPA) antagonistájaként mutatott sajátságait mutatta. Ez a megfigyelés vetette fel azt a kérdést, hogy hat-e a Q5 az epilepsziás aktivitásra, amennyiben igen, mi a Q5 hatásmechanizmusa?

A rohamszerű elektromos aktivitást (SLE) hippocampális agyszelet preparátumon hipomagnéziás mesterséges agyfolyadékkal váltottuk ki, és a CA3 régió piramiselt rétegében regisztráltuk. Fiatal felnőtt (28-34 napos) állatokból származó agyszeletekben az SLE aktivitás teljesen megszűnt 50 μ M Q5 hatására, míg kölyök (9-13 napos) patkányokból származó szeleteken antiepileptikus hatás csak nagyobb Q5 koncentrációk alkalmazásakor lépett fel (200 μ M és 500 μ M). Kimutattuk, hogy a Q5 specifikusan hat az SLE-t megelőző folyamatokra, melyek során a neuronális szinkronizáció fokozatosan nő, míg végül az idegsejtek kiterjedt populációinak együttes aktivációja vezet el az SLE megjelenéséhez. A spontán posztzinaptikus áramok frekvenciáját (serkentő és gátló) és amplitúdóját (gátló) a Q5 csökkentette. A serkentő és gátló neuronhálózatok aktiválhatóságának csökkentése valamint a Q5 *in vitro* SLE gátló-hatása közvetlen ok-okozati összefüggésben állhatnak. A Ca^{2+} ionszenzitív festékkel és konfokális mikroszkóppal nyert képsorozatok azt mutatták, hogy a Q5 gátolta egy ismert metabotróp Glu receptor (mGlu) agonistával kiváltott intracelluláris $[Ca^{2+}]$ növekedést. Eddigi eredményeink azt valószínűsítik, hogy 1) a Q5 egy potenciális antiepileptikum, mely 2) csökkenti a hippocampális serkentő és gátló neuronhálózatok spontán aktivitását és 3) antiepileptikus hatását egy mGlu-n keresztül fejt ki, amely 4) vagy ismert mGlu új hatásmechanizmussal vagy egy eddig nem azonosított, új mGlu.

Köszönetnyilvánítás a kutatások anyagi támogatásáért a következő programoknak: OTKA F043589, OTKA T035225, MediChem2 1/A/005/2004 NKFP és CBCH QLK2-CT-2002-90436.

IRODALOMJEGYZÉK

1. Szárics É., Lasztóczy B., Nyikos L., Barabás P., Kovács I., Skuban N., Nagy I. P., Kökösi J., Takács-Novák K., Kardos J.
Kinazolon-alkil-karbonsavszármazékok hatása az alpha-amino-3-hidroxi-5-metiliszoxazol-4-propionsav (AMPA) receptor által szabályozott transzmembrán Ca^{2+} ion fluxusra
Acta Pharmacologica Hungarica 72, 116-122 (2002)
2. Lasztóczy B., Kovács R., Nyikos L., Kardos J.
A glutamate receptor subtype antagonist inhibits seizures in rat hippocampal slices
NeuroReport 13, 351-356 (2002)
3. Nyikos L., Lasztóczy B., Antal K., Kovács R., Kardos J.
Desynchronisation of spontaneously recurrent experimental seizures proceeds with a single rhythm
Neuroscience 121, 705-717 (2003)
4. Lasztóczy B., Antal K., Nyikos L., Emri Zs., Kardos J.
High-frequency synaptic input contributes to seizure initiation in the low- $[\text{Mg}^{2+}]$ model of epilepsy
European Journal of Neuroscience 19, 1361-1372 (2004)
5. Lasztóczy B., Emri Zs., Kardos J.
AMPA receptor function in low- $[\text{Mg}^{2+}]$ induced seizure-like events of juvenile rat hippocampal slices
4th Forum of European Neuroscience, 2004. július 10-14., Lisszabon, Portugália, A227.10
(Szerk.: José M. Castro-Lopes)
6. Lasztóczy B., Emri Zs., Szárics É., Kovács I., Kardos J.
Regulation of network activity in hippocampus by metabotropic glutamate receptors: action mechanism of a novel anticonvulsant.
ISN-ESN-20th Biennial Meeting, 2005. augusztus 21-26., Innsbruck, Ausztria

**ABC TRANSPORTEREK GYÓGYSZER-INTERAKCIÓKBAN JÁTSZOTT
SZEREPÉNEK TANULMÁNYOZÁSA PRIMER HEPATOCYTA
SZENDVICSKULTÚRÁBAN**

Lengyel György, Veres Zsuzsa, Vereczkey László, Jemnitz Katalin

Az utóbbi időben egyre nagyobb jelentőséget tulajdonítanak az ABC transzporterek (pl. MRP2, MRP3) gyógyszer-interakciókban játszott szerepének, ami a klinikai gyakorlatban hiperbilirubinaemia, kolesztázis és sárgaság formájában jelentkezhet. Fiziológias körülmények között a bilirubin glukuronsavval konjugálódik majd MRP2 – a májsejtek apikális membránján lokalizálódó multidrog rezisztencia protein – közreműködésével az epecsatornába ürül. Ha az MRP2 működése gátolt, akkor a bilirubin-glukuronid az MRP3 segítségével – a májsejtek szinuszoidális membránján lokalizálódó multidrog rezisztencia protein – a véráramba kerül, majd vizelettel ürül. Így a szervezet egy alternatív útvonal segítségével kompenzálja a kóros bilirubin és epesav felhalmozódását. Ha mind az apikális, mind a szinuszoidális transzport gátolt, akkor kialakul az epepangás, azaz a kolesztázis állapota, mely súlyos vagy végzetes májelégtelenséghez vezethet.

Munkánk során olyan modellrendszerben vizsgáltunk meg ismert MRP gátlószereket (rifampicin, indometacin, klofibrát, probenecid) melyben a májsejtek megtartják a polarizált membrán struktúrát (szinuszoidális, kanalikuláris membrán) a specifikusan lokalizálódó transzporterekkel együtt. A kollagén szendvics konfigurációban tartott májsejtek a 96 órás inkubáció során epecsatornákat képeznek, melyek funkcionális szempontból azonosak az in vivo epevezető rendszerrel. A sejthatárok mentén kalciumfüggő szoros sejtkapcsolatok (tight junction) biztosítják a permeabilitási barriert, azaz a csatornák átjárhatatlanok a szekrénum számára. Kalcium megvonás hatására a csatornák felnyílnak, így tartalmuk meghatározhatóvá válik. A kalcium jelenlétében végzett inkubálás a szinuszoidális, míg kalcium hiányában végzett inkubálás a kumulatív (szinuszoidális plusz kanalikuláris) transzport mértékéről nyújt felvilágosítást, a kanalikuláris transzportot a kumulatív és a szinuszoidális transzport különbségeként kapjuk meg.

Vizsgálataink során a gátlószereknek a bilirubin konjugátumok szinuszoidális és kanalikuláris transzportjára való hatását tanulmányoztuk. A sejteket gátlószerek jelenlétében bilirubinnal inkubáltuk, majd mértük a konjugátumok mennyiségét kalciumtartalmú és kalciummentes médiumban. Azt tapasztaltuk, hogy a rifampicin, indometacin, klofibrát, probenecid a bilirubin-konjugátumok szinuszoidális effluxát nem, azonban a kanalikuláris effluxot nagymértékben, rendre 22, 68, 64, 49 %-ban gátolták. A rifampicin a szinuszoidális

transzportot 130%-al megnövelte. Adatainkból azt a következtetést vonhatjuk le, hogy a transzporterek ebben a modellrendszerben térben izoláltan vizsgálhatóak, valamennyi gátlószer gátolja a bilirubin epével történő ürülését. A rifampicin esetében a szinuszoidális transzport fokozódásával a májsejtek kompenzálják a bilirubin intracelluláris akkumulációját. Megállapíthatjuk, hogy a modell alkalmas a gyógyszermolekulák kolesztatikus mellékhatásainak előrejelzésére.