

Beszámoló az Anyag- és Molekulaszerkezeti Munkabizottság (AMMB) 2007. évi tevékenységéről

Anyag- és molekulaszerkezeti kutatásokkal sokan foglalkoznak Magyarországon, és tevékenységük differenciálódott, amit szerkezetvizsgálati módszerekre specializálódott munkabizottságok megalakulása követett. Az AMMB igyekszik összefogni a különféle szerkezetvizsgálati módszerekkel foglalkozó kutatókat, olyan rendezvényeket tartani, amelyeken dominálnak a project-orientált kutatások, és amelyeken előtérben vannak a többféle szerkezetvizsgálati módszert használó kutatási témák.

Rendezvények

A Kémiai Osztály Sohár Pál szervezésében 2007. május 9-én előadói ülést tartott „Molekulaspektroszkópia a szerkezetkutatásban” címmel, amelyen az AMMB-hez tartozó kutatók is beszámoltak eredményeikről.

Emellett, az AMMB keretében 2007-ben a „Szerkezeti kémiai előadások” sorozatban hat előadói ülést tartottunk, négy hazai és két külföldi előadó részvételével. Az előadások listáját mellékeljük.

Az AMMB területén elért új eredmények

- Az elméleti kémikusok új algoritmusokat dolgozták ki, amelyek segítségével a számítások gyorsabbá és pontosabbá tehetők, [1,2] ill. elősegítik a molekuláris folyamatok, pl. elektrongerjesztések szemléltetését [3]. Kritikusan értékelték kvantumkémiai módszerek alkalmazását [4].

- Együttműködve szintetikus kémikusokkal új szerves vegyületcsaládok jellemző szerkezeti sajátosságait (elektronszerkezet, kiralitás) határozták meg [5,6,7], reakciómechanizmusokat tártak fel [8].

- Kristályokban fellépő szupramolekuláris kölcsönhatásokat [9,10,11], önszerveződő rendszerek kristályos fázisait [12] írták le diffrakciós és spektroszkópiai mérések, ill. elméleti kémiai számítások alapján. A kísérleti módszerek között Magyarországon újdonságnak számít a szilárd-fázisú NMR.

- Folyadékok rendezettségét jellemezték röntgendiffrakciós kísérletek és molekulamechanikai számítások alapján [13].

- Fehérjekémikusokkal közös kutatások során spektroszkópiai mérésekkel és molekulamechanikai számításokkal tanulmányozták peptidek kötőhelyeit [14], fehérjék konformációs sajátosságait [15].

- Lézeres kísérletekkel rövid élettartamú részecskék (gyökök [16], gerjesztett festékpróbák [17], szennyező fémionok [18]) tulajdonságait határozták meg.

1. A. Tajti, P. G. Szalay, J. Gauss, J. Chem. Phys. 127, 014102 (2007)
2. J. Gauss, K. Ruud, M. Kállay: J. Chem. Phys. 127, 074101 (2007)
3. I. Mayer: Chem. Phys. Lett. 437, 284 (2007)
4. Z. Varga, M. Hargittai: J. Phys. Chem. A 111, 6 (2007)
5. P. Sohár, A. Csámpai, R. Sillanpaa, F. Fülöp, G. Stajer: Heterocycles 71, 1315 (2007)
6. F. Ullah, G. Bajor, T. Veszprémi, P. G. Jones, J. W. Heinicke: Angew. Chem. Internat. Ed. 46, 2697 (2007)
7. K. Pál, M. Kállay, M. Kubinyi, P. Bakó, A. Makó: Tetrahedron: Asymmetry 18, 1521 (2007)
8. J. Kaizer J, I. Ganszky, G. Speier, A. Rockenbauer, L. Korecz, M. Giorgi, M. Reglier, S. Antonczak: J. Inorg. Biochem. 101, 893 (2007)
9. M. Czugler, T. Körtvélyesi, L. Fábian L, M. Sípos, G. Keglevich: Crystengcomm 9, 561 (2007)
10. I. Lois I, E. Holló-Sitkei, L. Párkányi, G. Keresztury, I. Sajó, G. Besenyei, Inorg. Chim. Acta 360, 2686 (2007)
11. F. Billes, I. Mohammed-Ziegler, P. Bombicz: Vibrat. Spectrosc. 43, 193 (2007)
12. A. Deák, T. Tunyogi, G. Tárkányi, P. Király, G. Pálinkás: Crystengcomm 9, 640 (2007)
13. T. Megyes, S. Bálint, T. Grósz T, T. Radnai, I. Bakó, L. Almási: J. Chem. Phys. 126, Art. No. 164507 (2007)
14. O. Tőke, R. Tugyi, K. Uray, F. Hudecz: Biochem. Biophys. Res. Comm. 358, 739 (2007)
15. V. Horváth, A. Kovács, D. K. ,Menyhárd: J. Mol. Struct. - THEOCHEM 804, 9 (2007)
16. L. Nemes, A. M. Keszler, C. G. Parigger, J. O. Hornkohl, H. A. Michelsen, V. Stakhursky, Appl. Opt. 46, 4032 (2007)
17. Z. Miskolczy, L. Biczok, I. Jablonkai: Chem. Phys. Lett. 440, 92 (2007)
18. M. Ignatovych, V. Holovey, T. Vidozy, P. Baranyai P, A. Kelemen: Radiat. Chem. Phys. 76, 1527 (2007)

Budapest, 2007. november 14.

titkár

Dr. Simon Kálmán

elnök

M. K. Uray

2007

Január 16.	Lendvay György MTA KK SZKI	Hogyan mozognak az atomok gázfázisú reakciókban? Elemi reakciók dinamikájának elmélete
Március 5.	Paul Reinhard COHERENT GmbH.	Coherent lasers in the research of ultrafast processes
Június 7.	Tőke Orsolya MTA KK SZKI	Stratégiák a biomolekulák NMR vizsgálatában
Szeptember 18.	Bacsik Zoltán MTA KK SZKI	Infravörös mikrospektroszkópia: Légköri aeroszolok és zeolit mikrokristályok vizsgálata
Október 16.	Susan A. Bourne Dept. of Chemistry, Univ. of Cape Town, South Africa	Supramolecular coordination chemistry: designing functional compounds
November 20.	Kamarás Katalin MTA Szilárdtest Fizikai és Optikai Kutatóintézet	Átlátszó szén nanocső vékonyrétegek