

Mátrixizolációs infravörös spektroszkópai vizsgálatok

OTKA F042722 projekt
(2005–2008)
zárójelentése

Tarczay György

Eötvös Loránd Tudományegyetem
Természettudományi Kar
Kémiai Intézet



2009. február 24.

Alkil-nitritek konformációanalízise és fotolízise, valamint légkör-kémiai szempontból fontos alkoxigyökök vizsgálata

Az alkil-nitriteket elterjedten használják a fontos légkörkémiai szerepet betöltő alkoxigyökök generálására gázfázisban. Mi is ilyen céllal foglalkoztunk alkil-nitritekkel, nevezetesen az *i*-propil-nitrittel és az *n*-propil-nitrittel. A fotokémiai reakciók előtt vizsgáltuk az alkil-nitrit prekursorok konformáció-eloszlását. A vizsgálatokban a kihívást az jelentette, hogy az mindkét alkil-nitritnek több konformere van, az egyes konformerek IR spektruma pedig csak kis mértékben különbözik egymástól.

Az UV fotolízis során észlelt sebességkülönbségek, az effúziós valamint a fúvókás mintabeeresztés közötti sávintenzitás-különbségek alapján, valamint a kvantumkémiai számítások segítségével az *i*-propil-nitrit két(–három) konformerét, valamint a *n*-propil-nitrit nyolc konformerét sikerült azonosítani Ar mátrixban.

Korábbi, más alkil-nitritekkel végzett mátrix fotolízises vizsgálatokban azt feltételezték, hogy a fotolízis első lépése a NO kihasadása és alkoxigyök képződése. A két reaktív gyök azonban ugyanabban a mátrixüregben képződik, így azonnal reagálnak egymással HNO (tercier nitritek esetében RNO), valamint a megfelelő aldehid vagy keton képződése közben. A gyors reakció miatt az így képződő alkoxigyököket kizárólag egy korábbi lézerindukált fluoreszcenciás kísérlettel tudták kimutatni mátrixban.

A körülményektől függően a HNO és az oxovegyületek is tovább reagálhatnak az üregben, amikor nitrozóvegyületek képződnek. A korábbi megfigyelésekkel összhangban főtermékként sikerült kimutatnunk HNO-t, acetont, HNO·aceton komplexet, valamint acetaldehidet és nitrozó-metánt az *i*-propil-nitrit fotolízisekor, míg HNO-t, propanolt és *cis*-1-nitrozó-propanolt az *n*-propil-nitrit fotolízisekor. A fotolizált *i*-propil-nitrit mátrixizolációs IR spektrumának kisintenzitású sávjai között azonban találtunk olyanokat is, amelyek pozíciója jó egyezést mutat a gázfázisban diszperz fluoreszcenciával megállapított rezgési átmenetek energiájával. Ez az egyezés, valamint egyéb kísérleti egyezések is azt igazolták, hogy kis mennyiségben, de sikerült előállítanunk az *i*-propoxigyököt Ar mátrixban, valamint kimértük ennek a légköri folyamatokban is szerepet játszó gyöknek néhány infravörös átmenetét.

Alkil-peroxigyökök spektroszkópai vizsgálata (együttműködésben)

A légkörkémiában szintén fontos szerepet játszó alkil-peroxigyökök gázfázisú spektroszkópai (cavity ringdown, CRD) vizsgálata során magyar közreműködőként a spektrumok értelmezésében, asszignációjában vettem részt.

Az etil-peroxigyök és a perdeuterált etil-peroxigyök CRD spektrumában azonosítottuk a *transz* (*T*) és *gauche* (*G*) konformereket. Megállapítottuk a két speciesz mindkét konformerének $\bar{A} \leftarrow \bar{X}$ adiabatikus gerjesztési energiáját, valamint asszignáltunk további 8+3 (*T* és *G* C₂H₂O₂), illetve 9+3 (*T* és *G* C₂D₂O₂) átmenetet.

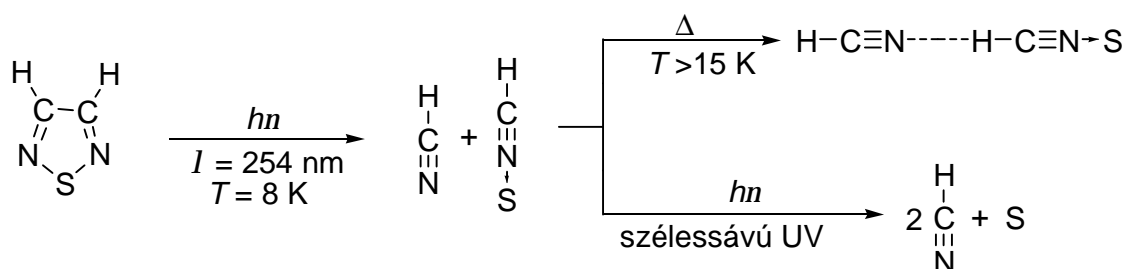
A propil-peroxigyökök CRD spektrumában az $\bar{A} \leftarrow \bar{X}$ adiabatikus átmenethez tartozó sávrendszeren túlmenően – a hasonlóan intenzív – $n_{O-O} \bar{A} \leftarrow \bar{X}$ gerjesztéshez tartozó sávrendszert elemeztük. Az elméleti számításokkal összhangban az 1-propil-peroxigyök esetében öt, a 2-propil-peroxigyök esetében pedig két konformert azonosítottunk.

Egzotikus szervesetlen vegyületek, csillagközi térben potenciálisan előforduló instabil specieszek előállítása és spektroszkópai vizsgálata

Az 1,2,5-tiadiazol elvben felfogható a hidrogén-cianid és a tiofulminsav (HCNS) adduktjának. A HCNS a [H, C, N, S] rendszernek ez az egyetlen olyan nem-ciklikus izomere, amely számítások szerint létezik, de spektrumát még nem vették fel, létezésére még csak közvetett kísérleti bizonyíték volt (ionneutralizációs-újra ionizációs tömegspektrometria). A 1,2,5-tiadiazol pirolízisével, valamint gázfázisú fotolízisével *Pasinszki Tibor* és munkatársai már korábban is próbálták előállítani a tiofulminsavat, de kísérleteik nem vezettek eredményre. Ezekben a kísérletekben termékként kizárólag hidrogén-cianidot és kenet kaptak.

A kísérleteket Ar és Kr mátrixban végzett fotolízissel folytattuk. A vegyületet 1:1000 arányban argonba vagy kriptonba fagyasztottuk, majd 8 K-en higanygőzlámpa és interferenciaszűrő segítségével 254 nm-es hullámhosszú UV fényel sugároztuk be. (Ez a gázfázisú UV-látható spektroszkópai mérésünk szerint az $\bar{A} \leftarrow \bar{X}$ átmenetnek felel meg.)

Ebben a fotokémiai reakcióban a vegyület valóban hidrogén-cianidra és tiofulminsavra esik szét (lásd 1. reakcióséma).



1. reakcióséma A 1,2,5-tiadiazol fotolízise

A vegyületet jól be lehetett azonosítani a magas szintű (CCSD(T)/aug-cc-pVTZ harmonikus + CCSD(T)/aug-cc-pVDZ anharmonikus korrekció) rezgési számítási eredmények összevetésével). A mátrix kis mértékű melegítésével a HCN és HCNS hidrogénhidas dimerét is megfigyeltük. A HCNS szélessávú UV besugárzás hatására elbomlik.

Jelenleg 3,4-diszubsztituált-1,2,5-tiadiazolok fotolízisét vizsgáljuk Ar és Kr mátrixokban. A difluorszubsztituált prekursorok fotolízisével – ugyancsak elsőként – felvettük az FCNS mátrixizolációs IR spektrumát. Várhatóan CICNS, NCCNS, CH₃CNS valamint (kén helyett) a megfelelő szelénzubsztituált molekulák is előállíthatóak hasonló módon.

Kísérleteket végeztünk izolált szénsav és kénessav előállítására is. Ezek a próbálkozások még nem vezettek egyértelmű eredményre, a kísérletek jelenleg is folynak. A részeredményeket az MTA Szervetlen és Fémorganikus Munkabizottságának ülésén mutattuk be.

Asztrokémiai szempontból érdekes aromás gyökök vizsgálata

Aromás gyökök közül a fenalénygyökkel (C₁₃H₉), valamint külföldi együttműködésben a tropilgyökkel (C₇H₇) foglalkoztunk. Az előbbire elméleti számításokat végeztünk, és elkezdtük mátrixizolációs vizsgálatát, az utóbbit pedig együttműködésben lézerspektroszkópai technikákkal (lézer indukált fluoreszcencia, illetve diszperz fluoreszcencia: LIF és LEDF) vizsgáltuk, a spektrumokat elméleti számítások segítségével értelmeztük.

A tropilgyök az elméleti alapkutatás szempontjából azért érdekes, mert szimmetriája alapján nagyon ritka pontcsoportba tartozik (D_{7h}). Továbbá azért is, mert mind az alap, mind az első gerjesztett elektronállapota Jahn–Teller-aktív. Ennek megfelelően a spektrumok igen bonyolultak, értelmezésük elméleti modellezések nélkül reménytelen.

A tropilgyököt egyenáramú fúvókás kisülésben, cikloheptatriénből állítottuk elő. Felvettük az $\tilde{A} \leftarrow \tilde{X}$ LIF, valamint az \tilde{A} állapot három különböző vibronikus szintjét gerjesztve a $\tilde{A} \rightarrow \tilde{X}$ LEDF spektrumokat. A felvett LIF spektrumok jó egyezést mutattak a korábbi $\tilde{A} \leftarrow \tilde{X}$ REMPI spektrumokkal, a LEDF spektrumok pedig elsőként adtak részletes információt az \tilde{X} állapot vibronikus szintjeiről. (A spektrumok felvétele még a beszámolási időszak előtt történt.) A spektrumok igen bonyolultak, értelmezésük nagy kihívást jelentett. Asszignáltuk az \tilde{X} állapot, valamint újra asszignáltuk az \tilde{A} állapot rezgési szintjeit. Továbbá egy egyszerű vibronikus csatolási modellt alkalmazva a kísérleti szintekre illesztettük mindkét állapot Jahn–Teller csatolási állandóit.

A közelmúltban épített pirolízises fúvóka segítségével reprodukciós kísérleteket sikerült végeznünk (pl. C_6H_5 gyök előállítás). Felvettük és értelmeztük a fenalénygyök prekursorának, az 1-H-fenalénnek a mátrixizolációs spektrumát. Jelenleg a fenalénygyök elektronállapotait számítjuk, UV spektrumát szimuláljuk, valamint a gyök előállításával próbálkozunk.

A tropil- és a fenalénygyök asztrokémiai szempontból is érdekes lehet, hiszen feltételezések szerint az eddig azonosítatlan ún. „diffúz csillagközi sávok” (DIBs) különféle (poli)aromás szénhidrogénektől is származhatnak.

Fémorganikus vegyületek vizsgálata (együttműködésben)

Külföldi együttműködés keretében (DFG-MTA, *Dr. Werner Klotzbücher*) „csupasz” fématomok és szerves ligandumok koordinációját, valamint szerves vegyületek reakcióit kezdtük el vizsgálni 2008 őszén. Ezen a téren jelenleg $Cr(CO)_n$ és $Cr(N_2)_n$ komplexek mátrixizolációs spektroszkópiai vizsgálata folyik.

MI-VCD spektroszkópai mérések kidolgozása

A biológiai szempontból fontos modellvegyületek körében folytatott vizsgálataink legérdekesebb részét képezik a mátrixizolációs rezgési cirkuláris dikroizmus (MI-VCD) mérések. Ezeket a világviszonylatban is újszerű méréseket az tette lehetővé, hogy laboratóriumunkat az ELTE Kémiai Intézetének *Hollósi Miklós* által vezetett Kiroptikai Szerkezetvizsgáló Laboratóriumával osztjuk meg. *Vass Elemérrel* együttműködve kidolgoztuk az MI-VCD mérési módszert. Az MI-VCD vizsgálatok fő tanulsága az volt, hogy sokkonformer, hígítatlan fázisban vagy oldatban erős intermolekuláris kötések kialakítására képes molekulák esetében az MI-VCD spektrumok mind a hagyományos VCD, mind a mátrixizolációs IR spektrumok információit kiegészítik. A hagyományos VCD spektrumok esetében ugyanis a különböző konformerek hasonló energiánál megjelenő széles, konformerfüggő előjelű sávjai teljesen kioltathják egymást, amely szerkezetnélküli elmosódott spektrumokat eredményez. Kondenzált fázisban vagy oldatban további probléma lehet, hogy komplexek képződnek, amelyek befolyásolják a VCD sávok előjelét, így a monomerre végzett kvantumkémiai számítások segítségével a kísérleti spektrumot nem lehet értelmezni. Az MI-VCD technika használatakor ez a probléma kiküszöbölődik. (Ezt tapasztaltuk az Ac-Ala-NHMe CH_2Cl_2 -oldatban, illetve Ar mátrixban felvett spektruma esetében.) Fontos észrevétel az is, hogy az MI-VCD spektrumok a mátrixizolációs IR spektrumok asszignációját is segíthetik. A közepes és nagyintenzitású VCD sávok előjele ugyanis nagy megbízhatósággal számítható kvantumkémiai módszerekkel. Így két egymáshoz közel eső rezgési átmenet könnyen megkülönböztethető, ha a megfelelő VCD sávok intenzitása viszonylag nagy, de előjelük ellentétes. Jól tükrözi, hogy sikerült más kutatócsoportoknak is bizonyítani az MI-VCD technikában rejlő lehetőségeket az, hogy jelenleg *Dr. Yunjie Xu* csoportjában (University of Alberta) építés alatt áll egy ilyen berendezés.

Modellpeptidek konformációs vizsgálata

Biológiai szempontból fontos modellvegyületek közül az *R*-2-amino-1-propanolt (alaninolt), valamint számos modellpeptidet és ezek vízzel alkotott komplexeit vizsgáltuk.

Utóbbiakat foglalja össze az 1. táblázat. Ezek a mérések azért fontosak, mert információt adnak arról, hogy a peptidek ilyen kis építőelemeiben mennyire determinált a térszerkezet, továbbá arról, hogy a szerkezetet mennyire befolyásolja a közeg. Mindegyik esetben azonosítottuk a főbb konformereket a mátrixizolációs infravörös (MI-IR) spektrumokban; az Ac-Gly-NHMe és az Ac-L-Ala-NHMe esetében a β_L és γ_L konformereket, valamint nyomnyi mennyiségben a δ_L konformereket. Az Ac-L-Pro-NH₂ esetében pedig a domináns $\tau\gamma_L+$ konformer mellett kis mennyiségben észleltük a $c\alpha_L+$ konformert is. Ezek az eredmények jó egyezést mutattak kvantumkémiai számításainkkal, valamint alátámasztják a prolin „konformációs zár” szerepét peptidekben, fehérjékben.

Mint ahogy azt a 1. táblázat is mutatja, újabban β -aminosavakból alkotott modellpeptidek szerkezetét is vizsgáltuk. A β -aminosav-származékok jelentőségét az adja, hogy – szemben a természetes aminosavakkal – bizonyos enzimes lebontásokkal szemben stabilak. Így β -aminosavakat tartalmazó peptidek kiválthatnak olyan természetes gyógyszertmennyeket, elsősorban antibiotikumokat, amelyek hatását a gyors lebomlás korlátozza. Ilyen gyógyszer-molekulák tervezése előtt azonban fel kell deríteni a β -aminosavakból felépülő peptidek kis

1. táblázat Modellvegyületeken elvégzett MI-IR és MI-VCD vizsgálataink

<i>Modellvegyület</i>	<i>MI-IR</i>	<i>MI-VCD</i>
Formanilid	+	
Ac-Gly-NHMe	+	
Ac-L-Ala-NHMe	+	+
Ac-L-Phe-NHMe	+	
Ac-L-Pro-NH ₂	+	+
Ac- β -Ala-NHMe	+	
Ac- β -HAla-NHMe	+	
Ac-Gly-NHMe·H ₂ O	+	
Ac-L-Ala-NHMe·H ₂ O	+	+

építőelemeinek, 1–2 aminosavegységekből álló modellpeptidek konformációs eloszlását. Első eredményeink azt mutatják, hogy annak ellenére, hogy a természetes aminosavakból álló modellpeptidekhez képest a megfelelő β -aminosav-származékok flexibilisebbek, mégis csupán egy domináns konformerük van szobahőmérséklet közelében.

Molekulakomplexek vizsgálata, kiralitástranszfer

A biológiai szempontból érdekes modellvegyületek gázfázisú és mátrixizolációs spektroszkópai vizsgálatának legnagyobb előnye az, hogy a mérési eredmények közvetlenül összehasonlíthatók az elméleti számításokkal. A biológiai mátrixokban azonban teljesen más konformációs viszonyok uralkodnak. A biológiai mátrixok irányába történő első lépésként elkezdtük vizsgálni az Ac-Gly-NHMe, az Ac-L-Ala-NHMe és az Ac-L-Pro-NH₂ vízzel alkotott komplexeit mind elméleti, mind kísérleti MI-IR és MI-VCD módszerekkel. Megmutattuk, hogy elsősorban a β_L konformer komplexálódik, a komplexálódás során pedig jelentős térszerkezeti változás megy végbe.

Szintén érdekes eredmény, hogy a komplexálódott akirális víz hajlítási rezgései is megjelennek az MI-VCD spektrumban. Ezt, az ún. kiralitás transzfer (vagy indukált kiralitás) jelenségét eddig csak 3–4 esetben sikerült megfigyelni.

Egyéb műszerfejlesztések

Üzembe helyeztünk egy áramlásszabályzót, amely nemcsak jelentősen megkönnyíti a munkánkat, de az eddigieknél jobb minőségű mátrixok előállítását is lehetővé teszi.

Megépítettük és teszteltük a pirolízises fúvókát gyökök előállításához (pl. alkiljodidok hőbontásával alkilgyökök előállítása). Tesztelés alatt áll egy kisüléssel fúvóka ugyancsak gyökök előállításához.

Knudsen-cellát építettünk kevésbé illékony minták vizsgálatához. Jelenleg pedig egy kvarcmikrokristály-mérleget tesztelünk a leválasztott anyag pontos tömegének méréséhez.

Megteremtettük a mátrixizolációs Raman, valamint az UV-látható mérések lehetőségét.

Egyéb elméleti munkák

Pontos kvantumkémiai (focal-point approach, FPA) módszerrel számítottuk a CCl₂ és a HCCl specieszek pontos képződési entalpiáját, illetve szinglett-triplett felhasadását. Ezek a

számítások egyrészt cáfolták a CCl_2 korábban kísérleti úton tévesen megállapított szinglett-triplett felhasadásának értékét, továbbá fontos segítséget nyújtanak a szinglett-triplett energiakülönbség jövőbeni pontos kísérleti értékének meghatározásához. Az általunk számított képződési entalpiák pontosabbak, mint az irodalomban fellelhető korábbi számítási és kísérleti értékek.

Kiszámítottuk a szinglett és a tripllett CCl_2 és a HCCl specieszek negyedrendű erőterét, majd ezekből másodrendű rezgési perturbációs elmélet (VPT2), valamint (kvázi-)variációs (diszkrét változójú reprezentáció, DVR technika) segítségével a specieszek rezgési spektrumát. Ezek a számítások egyrészt a kísérleti spektrumok kiértékelésében nyújtottak elengedhetetlen segítséget, másrészt ezek is segítik a CCl_2 szinglett-triplett energiakülönbségének jövőbeni pontos kísérleti meghatározását.

Gyökök nagyfelbontású forgási spektrumát az elektronspin és a molekulaforgások csatolódása bonyolítja. A csatolás a gyakorlatban a spektrumvonalak felhasadását eredményezi. A csatolás nagyságát az ún. elektronspin-rotációs tenzorral szokás leírni. Ha a csatolás nem elhanyagolható, akkor a nagyfelbontású spektrumból nyerhető szokásos kísérleti paraméterek (pl. forgási állandók) pontos meghatározása csak ezen állandók és az elektronspin-rotációs tenzor szimultán finomításával lehetséges. A spektrum illesztéséhez azonban a paraméterek viszonylag jó kiindulási becslésére van szükség.

Az elektronspin-rotációs tenzor számítása korábban egyik kvantumkémiai programcsomaggal sem volt lehetséges. A Curl által vezetett összefüggéseket az ACES2 programcsomagba építettük be. A programot 12 gyök 14 elektronállapotához tartozó elektronspin-rotációs tenzorán teszteltük, különböző elektronkorrelációs szinteken, különböző méretű egyelektron bázisok használatával. Vizsgáltuk a törzselektron-korreláció elhanyagolásának, valamint a referencia geometria választásának hatását is. Programunkkal mind szinglett, mind tripllett specieszek esetében pontosan számítható az elektronspin-rotációs tenzor. Egyes esetekben (pl. HNF) számításaink pontosabbak, mint a kísérleti értékek.

Szisztematikus kvantumkémiai számítássorozatot is végeztünk modellpeptidek VCD spektrumára. Előzetes eredményeink azt mutatják, hogy a peptidek vázkonformációjának azonosításánál sokkal gondosabban kell elemezni a VCD spektrumokat, mint eddig azt az irodalomban tették. Vizsgálataink szerint ugyanis az aminosav oldalláncoknak jelentősebb hatása van a VCD spektrumokra, mint azt korábban feltételezték.

Nagyobb (zárthéjú) molekulák (pl. modellpeptidek) mátrixizolációs vizsgálata során a Pulay-féle skálázott kvantummechanikai (SQM) módszert alkalmazva számoltuk a rezgési spektrumokat. Az SQM eredmények a legtöbb esetben igen jó egyezést mutattak a kísérleti mérésekkel. Sok konformerrel rendelkező molekulák mátrixizolációs infravörös spektrumainak megbízható kiértékeléséhez azonban szükség volt arra, hogy SQM skálafaktorokat állapítsunk meg viszonylag pontosabb elektronszerkezet-számítási szintekre. Az irodalomban a B3LYP/6-31G* a fellelhető legmagasabb szint, amelyre SQM skálafaktorok ismertek, ezért új SQM skálafaktorokat optimáltunk több mint 30 molekula kísérleti spektrumára. A skálafaktorokat egyrészt olyan bázisokra optimáltuk (pl. 6-31++G**, aug-cc-pVDZ, aug-cc-pVTZ), amelyek a hidrogénkötés pontosabb leírására is alkalmasak, másrészt a B3LYP módszer mellett olyan más DFT módszerre is optimáltuk a skálafaktorokat, amely korábbi tesztek szerint a hidrogénkötést jobban írja le (BPE), vagy amely rezgési cirkuláris dikroizmus (VCD) spektrumok számítására alkalmasabb (B3PW91).

Az SQM skálafaktorok optimálása során külön illesztettük a skálafaktorokat a gázfázisú, valamint az Ar mátrixban mérhető rezgési frekvenciákra. Az így optimált skálafaktorok természetesen nem tudnak elszámolni minden fontos effektussal, amelyek a gázfázisú és az Ar mátrix mérések között adódnak (pl. üregeffektus, gyenge molekulakomplex kialakulása a vizsgált molekula és a mátrixgáz között, stb.), de több rezgéstípusra statisztikailag jól visszaadják a különbséget, az ún. mátrixeltolódást. Szignifikáns különbséget találtunk pl. a torziós rezgések (X-X-X-X), valamint a X-Cl, X-S, N-H, és O-H nyújtási rezgések gázfázisú és az Ar mátrixhoz tartozó skálafaktorai között. Ezek az új skálafaktorok továbbiakban segíthetik saját és más csoportok mátrixizolációs konformációanalízisét.

A beszámolási időszak alatt született publikációk, előadások konferenciákon

1. G. Tarczay, S. J. Zalyubovsky, T. A. Miller:
Conformational Analysis of the 1- and 2-Propyl Peroxy Radicals
Chem. Phys. Lett. 406, 81 (2005).
Impakt05: 2.438 Hivatkozások száma (összes/független): 12 / 4

Zalyubovsky SJ JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 109 (7): 1308-1315 FEB 24 2005
Glover BG JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 2005
Wu SH PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS 8 (14): 1682-1689 2006
Miller TA MOLECULAR PHYSICS 104 (16-17): 2581-2593 AUG-SEP 2006
Rupper P JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 111 (5): 832-840 FEB 8 2007
Wu S JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 127 (22): Art. No. 224305 DEC 14 2007

Sharp EN JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A V: 112 Issue: 7 Pages: 1445-1456 Published: FEB 21 2008
Sharp EN PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS Volume: 10 Issue: 27 Pages: 3955-3981 Published: 2008

Zwier TS JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 110(12): 4133-4150 2006
Fu HB JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 125 (1): Art. No. 014310 JUL 1 2006
Kupper J INTERNATIONAL REVIEWS IN PHYSICAL CHEMISTRY 26 (2): 249-287 2007
Xu WG JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A Volume: 112 Issue: 30 Pages: 6999-7014 Published: JUL 31 2008

2. G. Tarczay, T. A. Miller, G. Czakó, A. G. Császár:
Accurate Ab Initio Determination of Spectroscopic and Thermochemical Properties of Mono- and Dichlorocarbenes

Phys. Chem. Chem. Phys. 7, 2881 (2005).

Impakt05: 2.519

Hivatkozások száma: 19 / 19

Rizzo A JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 124 064302 2006
Wang Z JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 124 074314 2006
Tao C JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 124 (22): Art. No. 224314 JUN 14 2006
Shin SK PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS 8 (29): 3446-3452 AUG 7 2006
Mukarakate C PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS 8 (37): 4320-4326 2006
Shin SK JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 125 (13): Art. No. 133317 OCT 7 2006
Tao C JOURNAL OF MOLECULAR SPECTROSCOPY 241 (2): 180-185 FEB 2007
Tao C JOURNAL OF MOLECULAR SPECTROSCOPY 241 (2): 136-142 FEB 2007
Tao C JOURNAL OF MOLECULAR SPECTROSCOPY 241 (2): 143-150 FEB 2007
Seal P CHEMICAL PHYSICS 332 (2-3): 232-242 FEB 14 2007
Shin SK JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 126 (13): Art. No. 134302 APR 7 2007
Tian ZX INT J MASS SPECTROMETRY 267(1-3): 288-294 2007
Tao C JOURNAL OF MOLECULAR SPECTROSCOPY 246 (1): 113-117 NOV 2007
Shin SK JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 128 (6): Art. No. 064309 FEB 14 2008
Shin SK JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS V: 128 Issue: 15 Article Number: 154322 Published: APR 21 2008
Tao C JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS Volume: 128 Issue: 17 Article Number: 171101 Published: MAY 7 2008
Yockel S THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS Volume: 120 Issue: 1-3 Pages: 119-131 Published: MAY 2008
Tao C JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 129 10 Article Number: 104309 SEP 14 2008
Richmond C JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 112 45 11355-11362 NOV 13 2008
Villano SM INT J MASS SPECTROMETRY 2008

3. Z. Kolos, D. Knausz, J. Rohonczy, E. Vass, G. Tarczay, and G. Pongor:
On the use of empirically corrected theoretical procedures in preparative chemistry: Synthesis, spectroscopic and theoretical studies on 1,3-bis(trimethylsilyl)benzimidazol-2-one

Chem. Phys. 318, 191 (2005).

Impakt05: 1.934

Hivatkozások száma: 0 / 0

4. G. Tarczay, G. Magyarfalvi, E. Vass
Towards the Determination of the Absolute Configuration of Complex Molecular Systems: Matrix Isolation Vibrational Circular Dichroism Study of R-2-amino-1-propanol

Angew. Chem. Int. Ed. 45, 1775 (2006).

Impakt06: 10.232

Hivatkozások száma: 13 / 11

Pohl G PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS 9 (33): 4698-4708 2007
Pohl G TETRAHEDRON Volume: 64 Issue: 9 Pages: 2126-2133 Published: FEB 25 2008

Mori T JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY 71 (26): 9797-9806 DEC 22 2006
Dobrowolski JC CHEMPHYSICHEM 8(7): 1085-1094 2007
Mori T JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 111 (20): 4222-4234 MAY 24 2007
Losada M PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS 9 (24): 3127-3135 2007
Mori T JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 111 (32): 7995-8006 AUG 16 2007
Sadlej J JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 111 (42): 10703-10711 2007
Schuehly W Proceedings of the International Electronic Conference on Synthetic Organic Chemistry, 11th, Nov. 1-30 (2007)
Hembury GA CHEMICAL REVIEWS 108 (1): 1-73 JAN 2008
Zehnacker A ANGEWANDTE CHEMIE-INTERNATIONAL EDITION Volume: 47 Issue: 37 Pages: 6970-6992 2008
Reinscheid UM J MOL STRUCTURE 2008
Smulders MMJ CHIRALITY 20(9) 1016-1022 2008

5. E. Mátyus, G. Magyarfalvi, G. Tarczay
Conformers and Photochemistry of Propyl Nitrites: A Matrix Isolation Study

J. Phys. Chem. A 111, 450 (2007).

Impakt07: 2.918

Hivatkozások száma: 1 / 0

6. P. Rupper, E. N. Sharp, G. Tarczay, T. A. Miller
Investigation of Ethyl Peroxy Radical Conformers via Cavity Ringdown Spectroscopy of the A–X Electronic Transition
J. Phys. Chem. A 111, 832 (2007).
Impakt07: 2.918 Hivatkozások száma: 4 / 1
- Chung CY JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 127 (4): Art. No. 044311 JUL 28 2007
Wu S JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 127 (22): Art. No. 224305 DEC 14 2007
Sharp EN JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A V: 112 Issue: 7 Pages: 1445-1456 Published: FEB 21 2008
- Wilke JJ JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 128 (7): Art. No. 074308 FEB 21 2008
7. G. Pohl, A. Perczel, E. Vass, G. Magyarfalvi, G. Tarczay
A Matrix Isolation Study on Ac-Gly-NHMe and Ac-L-Ala-NHMe, the Simplest Chiral and Achiral Building Blocks of Peptides and Proteins
Phys. Chem. Chem. Phys. 9, 4698 (2007).
Impakt07: 3.343 Hivatkozások száma: 3 / 2
- Pohl G TETRAHEDRON Volume: 64 Issue: 9 Pages: 2126-2133 Published: FEB 25 2008
- Albrecht M JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A V: 112 Issue: 33 Pages: 7530-7542 Published: AUG 21 2008
Gaignot M.-P. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 112 (51), 13507–13517, 2008
8. G. Pohl, A. Perczel, E. Vass, G. Magyarfalvi, G. Tarczay
A Matrix Isolation Study on Ac-L-Pro-NH₂, a Frequent Structural Element of β - and γ -turns of Peptides and Proteins
Tetrahedron, 64, 2126 (2008).
Impakt07: 2.869 Hivatkozások száma: 0 / 0
9. V. Stakhursky, I. Sioutis, G. Tarczay, T. A. Miller:
Computational Investigation of the Jahn-Teller Effect in the Ground and Excited States of the Tropylium Radical, Part I: Theoretical Calculation of Spectroscopically Observable Parameters
J. Chem. Phys., 128, 084310 (2008).
Impakt07: 3.044 Hivatkozások száma: 0 / 0
10. I. Sioutis, V. Stakhursky, G. Tarczay, T. A. Miller:
Experimental Investigation of the Jahn-Teller Effect in the Ground and Excited States of the Tropylium Radical, Part II: Vibrational Analysis of the A-X Electronic Transition
J. Chem. Phys., 128, 084311 (2008).
Impakt07: 3.044 Hivatkozások száma: 1 / 0
- Stakhursky VL JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS V: 128 Issue: 8 Article Number: 084310 Published: FEB 28 2008
11. G. Tarczay, S. Góbi, G. Magyarfalvi, E. Vass:
Model Peptide - Water Complexes in Ar Matrix: Complexation Induced Conformation Change and Chirality Transfer
Vibrational Spectroscopy (invited article), in press.
Impakt07: 1.780 Hivatkozások száma: 0 / 0

Bírálat alatt álló és előkészületben levő tudományos közlemények

12. T. Pasinszki, M. Krebsz, G. Bazsó, G. Tarczay
Isolation and spectroscopic observation of HCNS
beküldve.
13. G. Tarczay, P. G. Szalay, J. Gauss:
First Principles Calculation of Electron Spin-Rotation Tensors
előkészületben.

14. T. Beke, C. Somlai, G. Magyarfalvi, A. Perczel, G. Tarczay:
A matrix isolation study on the chiral and achiral fundamental building units of β -peptides: Conformers of Ac- β -Ala-NHMe and Ac- β -HAla-NHMe.
beküldve.
15. C. Fábri, T. Szidarovszky, G. Magyarfalvi, G. Tarczay
SQM Scaling Factors for the Analysis of Gas-phase and Matrix-Isolation Vibrational Spectra előkészületben

Összefoglaló közlemény

1. G. Bazsó, G. Magyarfalvi, G. Tarczay: A mátrixizolációs technika: molekulakomplexektől reaktív gyökökig, *Magyar Kémiai Folyóirat*, 112, 137-148, 2006

Előadások nemzetközi konferenciákon

- G. Tarczay, G. Magyarfalvi, E. Vass: On the Advantages of Matrix-Isolation Vibrational Circular Dichroism Spectroscopy
61th Ohio State University International Symposium on Molecular Spectroscopy, 2006, Columbus, Ohio.
- György Tarczay, Gábor Magyarfalvi and Elemér Vass: Matrix Isolation Vibrational Circular Dichroism Spectroscopy: New Perspectives or Much Ado about Nothing?
Spectroscopy Dynamics Interest Group Annual Conference, 2006, Oxford.

Poszterek nemzetközi konferenciákon

- E. Mátyus, G. Tarczay, and G. Magyarfalvi:
Conformational Analysis and Photochemistry of Matrix-isolated Propyl Nitrites
Matrix 2005, Funchal, Portugália.
- G. Tarczay, E. Vass, and G. Magyarfalvi:
Matrix Isolation Vibrational Circular Dichroism Study of 2-Amino-1-Propanol
Matrix 2005, Funchal, Portugália.
- G. Tarczay, P. G. Szalay, and J. Gauss:
Electron Spin-Rotation Tensor from First Principles
29th International Symposium on Free Radicals, 2006, Big Sky, Montana, USA.
- G. Tarczay, G. Magyarfalvi, S. Góbi, E. Vass, G. Pohl, T. Beke, and A. Perczel:
Exploring Conformational Landscapes of Model Peptides and Their Complexes by Matrix Isolation Techniques
First International Vibrational Optical Activity Conference, 2008, Manchester, UK
The 20th International Conference on High Resolution Molecular Spectroscopy, 2008, Prague
Latsis-Symposium "Intramolecular Dynamics, Symmetry and Spectroscopy", 2008, Zürich
- C. Fábri, T. Szidarovszky, G. Magyarfalvi, G. Tarczay
Transferable Scaling Factors for the Analysis of Gas-phase and Matrix-Isolation Vibrational Spectra
The 20th International Conference on High Resolution Molecular Spectroscopy, 2008, Prague
Latsis-Symposium "Intramolecular Dynamics, Symmetry and Spectroscopy", 2008, Zürich