

Zárójelentés a „Kísérleti és elméleti kutatások fotofizikai folyamatok oldószerfüggésének általánosabb leírására (OTKA T045890) pályázat végrehajtásáról.

- Az izoindolo[2,1-*a*]indol-6-on (**I**) *n*-hexánban alifás alkoholokkal (**X**) egyszeresen komplexált hidrogénhidas komplexet (**IX**) képez. A szingulett gerjesztett **IX** fluoreszcencia-színképének alakja hasonló az szingulett gerjesztett **I**-éhez, de kisebb a fluoreszcencia kvantumhasznosítási tényezője, és pozíciója jelentősen eltolódott a nagyobb hullámhosszak felé. Időfelbontott fluoreszcencia-lecsengési mérések alapján, különböző alkoholok felhasználásával, meghatároztuk a gerjesztett állapotban lejátszódó komplexálódási reakció sebességi állandóit és a komplexek élettartamát. A gerjesztett szingulett állapot hidrogénhíd-bázicitási adatait felhasználva származtatni tudtuk a komplexálódási reakció szabadentalpia-változását (ΔG°). Egy lineáris szabadenergia összefüggés és a ΔG° adatok segítségével kvantitatív leírást adtunk arról, hogy hogyan függ a komplexálódási reakció sebességi együtthatója a komplexáló alkoholtól. A kapott egyenletet felhasználva az alapállapotban lejátszódó komplexképződési és disszociációs reakciók sebességi állandói becsülhetőek.

A szingulett gerjesztett **IX** kicsi fluoreszcencia-hatásfokát a szingulett gerjesztett **I**-nél sokkal rövidebb élettartama okozza, mivel egyrészt a jelenlévő alkohol a szingulett gerjesztett **IX**-et is kioltja, másrészt a szingulett gerjesztett **IX**-ből kiinduló belső konverzió is mintegy egy nagyságrenddel gyorsabb, mint az analóg reakció a szingulett gerjesztett **I** esetében. A szingulett gerjesztett **IX**-ből kiinduló belső konverziós reakció sebességi együtthatója korrelációt mutat a komplexképző alkohol ionizációs potenciáljával, következésképpen valószínű, hogy az energiavesztő folyamat a komplexált molekula egy közeli elektronátviteli állapotán keresztül játszódik le, amit a belső konverziós reakció Arrhenius-paraméterei is alátámasztanak. Reaktánsként izopropil-alkoholt használva a reakció preexponenciális tényezője valamivel nagyobb, mint 10^{14} s^{-1} . Ez a nagy érték potenciálfelület-kereszteződésre utal. A szintén nagy, 28 kJ mol^{-1} aktiválási energia összhangban van azzal, hogy a komplexen belüli elektronátlépés energetikailag meglehetősen kedvezőtlen.

A. Demeter and T. Bérces: Hydrogen bond formation between **isoindolo[2,1-*a*]indole-6-one** and aliphatic alcohols in *n*-hexane, *J. Phys. Chem. A*, 109 (10), 2043 -2049., (2005)

- Időfelbontott és állandósult állapotú rendszereken végzett fluoreszcencia vizsgálatainkban megmutattuk, hogy a legpolárosabb oldószerekben az *N*-fenil-pirrol kettős-lumineszcenciát mutat, és fotofizikai viselkedése leírható a reverzibilis kétállapotú rendszerekre jellemző kinetikával. Meghatároztuk a kinetikai rendszer paramétereit, és azok felhasználásával diszkutáltuk a folyamatok tulajdonságait. Megállapítottuk, hogy a tripllett gerjesztett állapot képződése a leghatékonyabb energiavesztő folyamat függetlenül attól, hogy milyen az oldószer polaritása.

T. Yoshihara, S.I.Druzhinin, A.Demeter, N.Kocher, D.Stalke, and K.A.Zachariasse: Kinetics of Intramolecular Charge Transfer with **N-Phenylpyrrole** in Alkyl Cyanides, *J. Phys. Chem. A*, 109 (8), 1497-1509., 2005

- Megvizsgáltuk azt, hogy hogyan függ az *N*-fenil-2,3-naftálimid (NF23NI) fluoreszcencia-színképe a gerjesztési hullámhossztól, és azt tapasztaltuk, hogy triacetinben -30 °C-on a $\Phi_f(\text{ICT})/\Phi_f(\text{LE})$ arány jelentősen módosul a gerjesztő hullámhossz változásával. Analóg, de kiértékelés szempontjából előnyösebb eljárás, ha a két kritikus hullámhosszon mért gerjesztési színképet hasonlítjuk össze. Ez a két hullámhossz természetesen az, ahol a minta csak az lokálisan gerjesztett (LE) illetve csak az töltésátviteli (ICT) állapotból emittál. A gerjesztési színképek közül a 385 nm-en detektált alakja a hasonló körülmények között az *N*-(2,2'-dimetilfenil)-2,3-naftálimiddel (DMPN) mérhető elnyelési színképre hasonlít, míg az 520 nm-es detektálás mellett mérhető sokkal közelebb áll az NF23NI-re (önmagára) jellemző elnyelési színképhez. Ha a színképek eltérését nézzük, akkor két karakterisztikusabb különbséget vehetünk észre. Az első jellegzetesség az, hogy az ${}^1A_2 \leftarrow {}^0A_2$ abszorpcióhoz tartozó 0/0 átmenet energiája mintegy 100 cm^{-1} -gyel (1.4 nm) nagyobb, ha a detektálás az ICT sávban végezzük, mintha az LE emissziós sávban detektálnánk. A másik, talán fontosabb eltérést a 340 nm-nél rövidebb hullámhosszaknál tapasztalhatjuk. Ha a legkisebb energiájú elnyelési sáv elnyelési színképtartományában normáljuk a két gerjesztési színképet, a különbség görbén olyan elnyelési sáv rajzolódik ki, (33250 és 35650 cm^{-1} maximummal) amelynek megfelelő hullámhosszakon gerjesztve a molekulát intenzívebb ICT fluoreszcenciát kapunk. A fentebb leírtakat úgy értelmezhetjük, hogy a viszkózus triacetin az alapállapotban meglévő konformáció eloszlást és solvatációs viszonyokat

mintegy befagyasztja. Azok a véletlen konformációval (és/vagy szolvátburokkal) rendelkező molekulák, amelyek tulajdonságai előnyösebbek az ICT emisszió kialakulásához, vagyis azok ahol a fenil – naftálimid térszög közelebb áll a koplanaritáshoz, illetve ahol a szolvátburok szerkezete jobban kedvez a 1B_1 stabilizálódásának, azok nagyobb valószínűséggel fogják eredményezni a hosszabb hullámhosszakon fluoreszkáló gerjesztett molekulát. Azok a konformációk viszont, amelyek kedveznek az ICT állapot stabilizálódásának, eltérő elnyelési színeképet mutatnak: a koplanáris konformációnál bizonyos nagyobb energiájú sávok intenzívebben jelennek meg (például a $^1B_1 \leftarrow ^0A_2$ átmenet).

Hasonló magyarázattal szolgálhatunk a 0/0 átmenetek közötti különbségre: az 520 nm-es emisszió detektálásával azokat a molekulákat részesítjük előnyben, amelyek szolvatációja kevésbé kedvez az LE állapot stabilizációjának, következésképpen nagyobb is az átmenet energiája.

Alátámasztja az előbb elmondottakat, hogy ha összehasonlítjuk az ezzel a módszerrel, analóg körülmények között megbecsült $^1B_1 \leftarrow ^0A_2$ átmenethez tartozó energiákat. Az pFF23NI, az NFNI és az mFF23NI esetében a kísérleti adatok a következők: 32770, 33250 és 33500 cm^{-1} . Az átmenet energiájának a növekedése összhangban van a spektroszkópai és molekulaszervezeti várakozásainkkal.

Az itt bemutatott vizsgálatok eredményét a közeljövőben tervezzük publikálni.

Részletesen vizsgáltuk a 9,10-bis-{(4-difenilamino)-feniletinil}-antracén (BDFAFEA) és az azzal rokon vegyületek fotofizikájának és fluoreszcenciás tulajdonságainak felderítésére. A BDFAFEA fluoreszcencia-maximumának, ellentétben a 9,10-bis-(feniletinil)-antracénnel (BFEA), jelentős oldószerfüggése van, ami nem magyarázható azzal, hogy a molekula dipólusmomentuma számottevően megváltozna a gerjesztés során, mivel szerkezeti okokból ez a változás nulla. Feltételezésünk szerint apoláros oldószerben a molekula kvadrupólusmomentuma az, ami kölcsönhat az oldószerrel, míg poláros esetben felmerült annak a lehetősége, hogy a gerjesztett állapot szerkezete eltérő: aszimmetrikus jelleget mutat és így már valódi dipólusmomentummal rendelkezik. Jelenleg vizsgáljuk, hogy a jelenség hogyan értelmezhető a „reakció-tér elmélet” keretein belül. Sajnos vizsgálataink közben hasonló rendszerekről würtzburgi kutatóktól

megjelent egy színvonalas publikáció (J. Phys. Chem. A 2006, 110, 5204-5214.), így kénytelenek voltunk a vizsgálatokat sokkal nagyobb volumenre kiterjeszteni, hogy a több adattal (pl. több oldószer) és a magas szintű kiértékeléssel (pl. a rezgési szerkezet dekonvolúciója) ismét jó helyen publikálhatóvá tehesük a méréseket. Az eredmények kiértékelése jelenleg is folyamatban van. Hasonlóan érdekes megfigyeléseket tettünk a 4-(9,10-bis-(feniletinil)-antracén-1-il)-morfolin vegyülettel. Itt az oldószerhatás, hasonlóan a BFEA-hoz viszonylag kicsi, de ellentétben a másik két származékkal a molekula színképei alapján nagy Stokes-eltolódás mérhető. Feltételezésünk szerint a morfolin konformációja megváltozik a gerjesztés hatására, és ez okozza a jelentős effektust. Vizsgálatokat végeztünk a szintén szimmetrikus tris-(4-ciano-fenil)-aminon. A vegyületet a megfelelő, egyébként a kereskedelmi forgalomban kapható, jó származékból állítottuk elő. A molekula fluoreszcencia színképe, és élettartama a jól mérhető tartományba esik, és paraméterei várakozásunknak megfelelően enyhe oldószerpolaritás-függést mutatnak. A mérések befejezése és a kiértékeléshez kapcsolódó számítások folyamatban vannak.

4-(dimetilamino)benzonitril (DMABN) tetrafluoro-származékának (DMABN4F) és más rokon vegyületeknek a fotofizikája: A tetrafluoro-származékok esetében a molekulán belüli töltésátviteli állapot, hasonlóan a nem fluorozott modellvegyületekhez, a helyileg gerjesztett állapotból keletkezik. A fluorozott származékok esetében a gerjesztett állapotban lejátszódó reakció exotermebb, ennek következményeképpen az LE emisszió alig vagy egyáltalán nem észlelhető a fluoreszcencia-színképekben. Ugyanakkor az ICT fluoreszcencia maximuma jelentősen eltolódik a vörös irányba. Egyes esetekben – például az apoláros *n*-hexánban – olyankor is megjelenik, sőt dominánssá válik az ICT emisszió, amikor egyébként a referencia molekulák csak az LE állapotból emittálnak. Hasonlóan, az ICT állapot kialakulása szempontjából kedvezőtlenebb szerkezetű 4-aminobenzonitril esetében (ABN), amely molekulánál egyébként egyetlen oldószerben sem tapasztalható az ICT gerjesztett állapotú species keletkezése, a négy fluoratom jelenléte kiváltja az ICT állapot létrejöttét, és hatékony belső konverziós reakciót is indukál. Különböző polaritású oldószerekben felvett fluoreszcencia-színképek analízisével meghatároztuk a kérdéses molekulák ICT gerjesztett állapotához tartozó dipólusmomentumokat, és megállapítottuk, hogy a tetrafluor-származékok esetében ez az

adat rendre kisebb, mint a megfelelő fluormentes származékoknál. Ennek oka, hogy a szétváló töltések súlypontjának távolsága - mivel a fluoratomokon jelentős negatív töltés jelenik meg az ICT állapotban - a fluorozás hatására lecsökken.

Femtosekundum időfelbontású mérésekkel megállapítottuk, hogy az LE \rightarrow ICT reakció rendkívül gyors (szobahőmérsékleten pikosekundumnál rövidebb a karakterisztikus ideje). Fontos megállapítás, hogy a reakció gyorsabb, mint ami a megfelelő nem-fluorozott származékok esetében tapasztalható. Az acetonitrilben mérhető, (az *N*-szubsztituenstől független,) 90 fs-os LE élettartam megegyezik az acetonitril oldószerre jellemző dielektromos relaxáció időállandójával, ami arra utal, hogy ezen a relaxációs folyamaton kívül más folyamatra, pl. nagy amplitúdójú geometriai relaxációra, már nincs elegendő idő.

A különböző oldószerekben mért ICT fluoreszcencia-élettartamok, fluoreszcencia és triplett-képződési kvantumhasznosítási tényezők mérései alapján megállapítottuk, hogy a gerjesztett molekulák domináns energiavesztő folyamata az ICT állapotból az alapállapotra vezető belső konverzió. (Az LE állapotból kiinduló egyéb folyamatok jelentősége az LE \rightarrow ICT reakció mellett elhanyagolható.) A nem-fluorozott molekulák fotofizikáját domináló spínváltó folyamat jelentősége a DMABN4F esetében hexánban a legnagyobb, de mind az oldószer polaritás növekedésével, mind az *N*-szubsztituens számának csökkenésével, szerepe csökken, mivel a belső konverzió egyre nagyobb sebességgel játszódik le.

A tetrafluor-származékok vizsgálata befejeződött, jelenleg az 1, 2 illetve 3 fluoratomot tartalmazó molekulákat vizsgáljuk. Megállapítottuk, hogy az ICT állapotból kiinduló belső konverziós reakció sebességének a logaritmus korrelál a megfelelő fluoreszcencia intenzitásának a maximumával. A jelenség az energiakülönbség törvénnyel (energy – gap – law) rokonítható.

V.A.Galievsky, S.I.Druzhinin, A.Demeter, Y.B.Jiang, S.A.Kovalenko, L.P.Lustres, K.Venugopal, N.P.Ernsting, X.Allonas, M.Noltemeyer, R.Machinek, and K.A.Zachariasse: Ultrafast Intramolecular Charge Transfer and Internal Conversion with Tetrafluoro-aminobenzonitriles, Chem. Phys. Chem. 6 (11), (2005) 2307-2323., 2005

Hidrogénhidás komplexek folytatódó vizsgálatában, egyrészt folytattuk a fentebb bemutatott cikkünkben tárgyalt kísérleteket: hőmérsékletfüggő fluoreszcencia-lecsengési mérések alapján megállapítottuk, hogy a hidrogén-hidas komplex képződési reakciójának aktiválási energiája számottevően negatív. Ennek az eredménynek paradigmaticus jelentősége lehet a kérdéses reakció megítélésében. A felismerés részleteinek tisztázása érdekében folytatni kívánjuk a vizsgálatokat.

Másrészt, a kutatási tervnek megfelelően vizsgáltuk az 1,1-biantril molekula gerjesztett állapotú komplexálódását, ahol hexán oldószerben hexafluoro-2-propanol hatására a fluoreszcencia-színkép jelentős megváltozását tapasztaltuk, amit azzal magyarázunk, hogy míg alkohol távollétében az ICT állapotú gerjesztett molekula képződésének a jelentősége energetikai okok miatt elhanyagolható, addig a dinamikus folyamatokban képződő komplexált szingulett gerjesztett biantril esetében már az ICT állapotú species a legkisebb energiájú. Úgy tűnik, ha kisebb mértékben is, de tapasztalható alapállapotú komplexképződés is, de az alapállapotú komplex nem prekuzora a gerjesztett komplexnek. Ezt mind gerjesztési színképek, mint időfelbontott fluoreszcencia-lecsengési görbék mérésével is bizonyítani tudjuk. Az eredmények újszerűsége miatt a kiegészítő vizsgálatok elhúzódtak: szeretnénk minél komplettebb és megbízhatóbb eredményeket közölni, hogy megállapításaink kevésbé legyenek vitathatóak, így több mérést is meg kellett ismételni a közelmúltban. Jelenleg ezen eredmények feldolgozása folyik.

Vizsgáltuk, hogy hogyan hat a kettős fluoreszcenciát mutató *N*-fenil-2,3-naftálimid-származékok színképére a hidrogénhidás komplex kialakulása. Megállapítottuk, hogy az ICT állapothoz tartozó fluoreszcencia maximumának vöröseltolódása korrelál a karbonil csoport oxigénjének elektrontöltés értékével. A.Demeter: The influence of hydrogen bond formation on the dual luminescence of *N*-phenyl-2,3-naphthalimide derivatives, *React. Kinet. Catal. Lett.* 85 (2), 331-339., 2005

Mintegy tizenöt oldószerben vizsgáltuk a *N*-(2-naftil)-fenantridinon molekula kettős fluoreszcenciáját felölelve a lehetséges hőmérséklettartományban. Az LE → ICT reakció termodinamikájának vizsgálatában különösen a kis viszkozitású oldószerben végzett mérések eredményei bizonyultak fontosnak, ezért vizsgálatokat folytattunk olyan

ritkábban használt oldószerekkel is, mint a propionitril vagy a metil-formiát. Azt tapasztaltuk, hogy *cisz*-dekalinban az LE → ICT reakció aktiválási energiája jóval nagyobb, mint amit *n*-hexánban mértünk. A kapott adatok az oldószer viszkozus folyására származtatható aktiválási energiával közel megegyeznek. Apoláros oldatokban az oldószer növekvő viszkozitása valószínűleg az aril-csoport elfordulását gátolja. A közepesen poláros dietil-éter oldószerben a reakció aktiválási energiája Steven-Ban analízis alapján egyértelműen nagyobb, mint a viszkozus folyásé. A legpolárosabb acetonitrilben a reakció megint diffúziókontrollált jelleget mutat. Feltételezésünk szerint a poláros oldószerekben az oldószer viszkozitása az oldószerburok átrendeződésének fékezésén keresztül fejt ki lassító hatását. A fluoreszcencia-színképek maximumainak hőmérsékletfüggéséről rendkívül nagymennyiségű adat gyűlt össze, azok feldolgozása nagyrészt befejeződött, jelenleg a végső kiértékelés folyik. Sajnos időfüggő lecsengések analíziséből a dietil-éteres adatokat nem tudtuk reprodukálni: viszonylag alacsony aktiválási paraméterek adódtak. Jelenleg azon is dolgozunk, hogy feloldjuk ezt az ellentmondást.

A projekt vége felé kutatásaink fókuszába a hidrogénhidas komplexképződés oldószer-függésének leírása került. Modell vegyületül a 4-(dimetilamino)-piridint választottuk, amely molekula nagyon erősen a komplexálódik alkoholokkal. Ez lehetővé tette, hogy amellet, hogy különösen alaposan megvizsgálhassuk *n*-hexán oldószerben, még mintegy 15-20 más oldószerben is felderítettük, hogy hogyan hat a hexafluor0-2-propanollal történő komplexálódás a molekula fotofizikájára, ezen belül is elsősorban a kettős-lumineszcenciás viselkedésére. Hexánban a döntően a helyileg gerjesztett állapotból emittáló molekula a hidrogén-hidas komplexálódás hatására dominánsan a töltésátviteli állapotból fluoreszkáló molekulává vált. Ezt az effektus részletesen elemeztük dolgozatunkban. A komplex fluoreszcenciájának oldószer-kromatizmusát leíró görbe – ellentétben a nemkomplexált molekuláéval – a dietil-éter oldószer polaritásánál megtörik, ami arra utal, hogy poláros környezetben más gerjesztett állapot emittál, mint apoláros oldószerekben. Vizsgálataink során több olyan felismerést tettünk, ami messze túlmutat a modellvegyület tárgykörén, reméljük hogy a munka rokon vegyületeken történő folytatásával ezen megfontolásokat alá tudjuk támasztani.

Mivel a triplett gerjesztett molekulának és komplexeinek mikroszekundumnál is rövidebb az élettartama, a triplett kvantumhasznosítási tényező meghatározására új eljárást dolgoztunk ki.

A. Demeter, V. Mile, and T. Bérces: Hydrogen Bond Formation between 4-(Dimethylamino)pyridine and Aliphatic Alcohols, *J. Phys. Chem. A* 111 (37) 8942-8949., 2007

A munkatervben szereplő „benzofenon izopropanolos fotoredukciójának kinetikai megismerése” irányuló vizsgálatainkban is jelentős előrelépések történtek: sikerült előállítanunk a 3,3',5,5'-tetra-(trifluorometil)-benzofenont és néhány ezzel rokon származékot. Összehasonlítóképpen vizsgáltuk a 4,4'-(dimetoxi)-benzofenon fotoredukciós tulajdonságait is. Megmértük az új vegyületek foszforeszcencia színképét (eredményeink alapján elmondhatjuk, hogy az általánosan használt EPA üvegben mért értékek félrevezetőek, mivel nem a gerjesztett molekulákból hanem azok alkoholos komplexeiből származik a foszforeszcencia), a triplett gerjesztett állapotának a kvantumhasznosítási tényezőjét, abszorpció színképeket, valamint a belőle származtatható ketil-gyökök színképét is. Ezen adatok a megfelelő benzofenon-paraméterekhez képest érdekes hasonlóságokat és eltéréseket mutatnak. Különösen izgalmas, hogy a különleges dimetil-ketil + benzofenon \rightarrow difenil-ketil + acetone reakció sebessége az új trifluorometil-származék esetében kb. ötvénszer nagyobb, mint amit a benzofenon – 2-propanol rendszerben tapasztaltunk, míg a dimetoxi-származék esetében ugyanez a reakció lényegesen lassabb. Ez azt mutatja, hogy igen különleges benzofenont találtunk, ami annak más előnyös tulajdonságaival együtt felveti számos gyakorlati alkalmazásának lehetőségét is. A jelentős különbségek magyarázatára, Lendvai György segítségével ab initio kvantumkémiai számításokat végeztünk, amely alapján arra a következtetésre jutottunk, hogy a trifluorometil-származék esetében a ketil-gyök rendkívül stabil, következésképpen az erre a gyökre vezető reakciók meglehetősen exotermek, és mivel érvényesül a lineáris szabadenergia összefüggés a gyökre vezető reakciók aktiválási energiája is sokkal kisebb, mint amit az összehasonlítás alapjaként használható benzofenon reakciói esetében mérhetünk és számolhatunk.

A szakirodalomban újabban megjelent közleményektől inspirálva felfigyeltünk arra, hogy a fotofizikai szempontból alapvető fontosságú DMABN molekula triplett gerjesztett állapotának mikrohullámú abszorpciós kísérletekkel meghatározott dipólusmomentuma nem tekinthető elfogadhatóan jó becslésnek. Korábbi vizsgálataink alapján valószínűsíthető volt, hogy a holland kutatók a mérések kiértékelésénél hibás triplett képződési kvantumhasznosítási tényezőket használtak, és ez okozta a végeredmény túlzottan magas értékét. A mikrohullámú kísérletekkel azonos oldószerekben meghatároztuk a delfi kutatók által is vizsgált nyolc DMABN-rokon vegyület triplett képződési kvantumhasznosítási tényezőjét, majd a publikált mikrohullámú mérési adatok segítségével újraszámoltuk a dipólusmomentumokat, amelyek így a várakozásunknak, és az irodalmi indikációknak jobban megfelelő, alacsonyabb értékeknek adódtak. Eredményeink azt mutatják, hogy az általunk vizsgált tartományban: az apoláros ciklohexántól a közepesen poláros dioxánig, a triplett gerjesztett állapot dipólusmomentuma, ha kismértékben is de növekszik. Méréseink alapján arra a következtetésre jutottunk, hogy alkalmasan választott oldószeres esetében a foszforeszcencia-színkép oldószer-kromatizmusából is származtathatóak ezek az értékek, de ennek bizonyítása még további vizsgálatokat igényel.

A. Demeter, and K.A. Zachariasse: Triplet State Dipole Moments of **Aminobenzonitriles**, J. Phys. Chem. A, 112 (7) 1359-1362., 2008

Az eredményekből 6 publikáció született 14,8-as összesített impakttal, valamint a ezen és a megelőző OTKA pályázatomban (T 33102) képezték az MTA Doktori Cím elnyerésére benyújtott és elnyert pályázatomban gerincét is (**Relaxáció szerepe a fotofizikai folyamatokban: a kettős fluoreszcencia és a hatékony belső konverzió létrejöttének feltételei.** (2006) <http://www.chemres.hu/scientists/demeter/disszertacio.pdf>). Ezúton is szeretném megköszönni az OTKA bizottság támogatását. A beszámolóban szerepelnek még publikálatlan eredmények, ezek befejezésén még dolgozom. Meggyőződésem, hogy ez többé-kevésbé természetes. Az eredeti pályázathoz képest a kutatások (kiegészítő) támogatása kb. felére csökkent, ennek ellenére mi nem csökkentettük kutatási tervünket, bízva abban, hogy menet közben más forrásból kaphatunk némi segítséget. Ez részben teljesült is Mile Viktória (ELTE TTK), és Horváth Klaudia (BMEK) hallgatók TDK

munkája mindenképp köszönetre méltó. Sajnos Bérces Tibor akadémikus betegsége, majd halála, mind szakmailag, mind emberileg nehezebbé tette kutatásainkat.

Mindemellett, el kell mondanom, hogy Bérces Tibor hozzájárulása a projekt sikeres befejezéséhez rendkívül fontos volt, és számára is sokat jelentett, hogy ilyen szép és nemegyszer meglepő eredményeket tudtunk elérni.

A költségtervben egy jelentősebb eltérést kell indokolni, amihez természetesen megkaptuk az OTKA bizottság engedélyét is. A kéréstől nem független megtakarításainkból (pl. konferencia-részvétel stb.) egy nagyteljesítményű Tiratron (HY 3202) vettünk kb. 1 MFt értékben, hogy vizsgálatainkhoz nélkülözhetetlen LamdaPhysics excimer lézereinket működőképés állapotba tudjuk tartani.