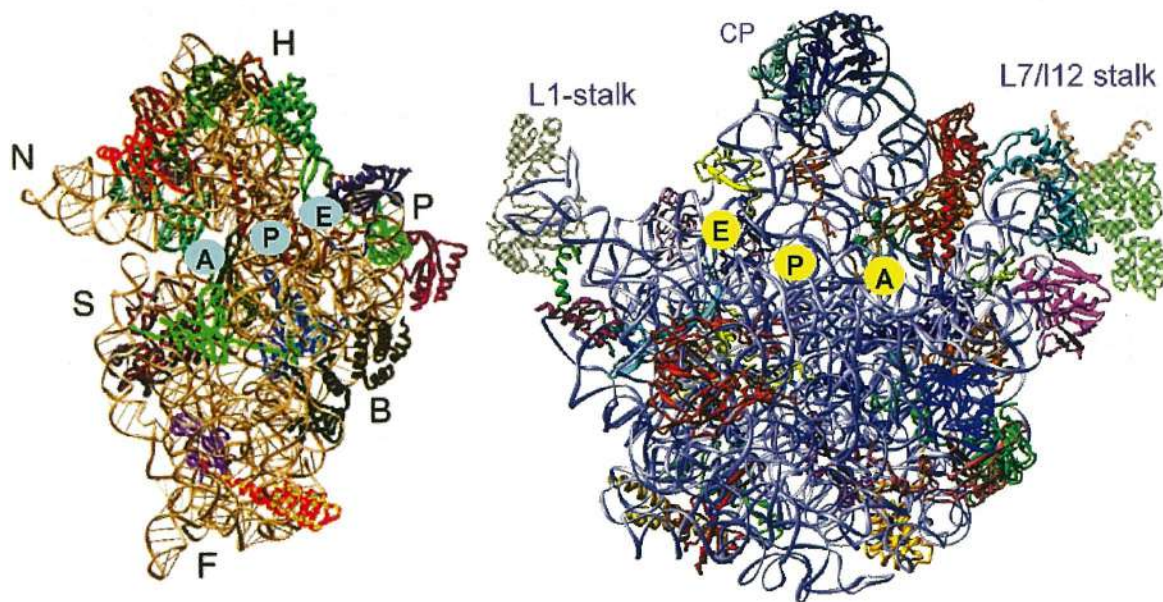


# כימיה בישראל CHEMISTRY IN ISRAEL



בטאון החברה הישראלית לכימיה Bulletin of the Israel Chemical Society

גליון מספר 9, ניסן התשס"ב, אפריל 2002 Issue No.9 April 2002



The 3-D structures of the small (left) and the large (right) ribosomal subunits.  
(See article by Ada Yonath)



# כימיה בישראל - בטאון החברה הישראלית לכימיה

גליון מספר 9, ניסן התשס"ב, אפריל 2002

web site: <http://www.weizmann.ac.il/ICS>

## תוכן העינינים

דווח על כינוסים ואירועים אחרים	2
הכינוס השנתי ה- 67 של החברה הישראלית לכימיה, ינואר 2002, ירושלים	23
הענקת פרסי החברה בכינוס השנתי	25
הכינוס השנתי ה- 30 של האגודה הישראלית לפולימרים ופולטיקה, דצמבר 2001, תל-אביב	27
פרס פוליכר ע"ש פלורי לפרופ' משה נרקיס	27
פרס HTC לפרופ' אביב עמירב	27
מן הארכיון	
ספרית הבר במכון ויצמן - אוסף נדיר של ההיסטוריה והפילוסופיה של המדע	28
"מחלת הבדיל" וארנסט יוליוס כרן	31
לזכרו	
פרופ' אברהם ורשבסקי, מכון ויצמן	33
תקצירים באונולית	35
דבר המערכת	2
קול קורא	
קול קורא להגשת מועמדים לפרס החברה לשנת תשס"ב	3
מאמרים מוזמנים	
The Ribosome: A molecular machine with brains	
עדה יונת, מכון ויצמן (פרס ישראל 2002)	4
Sonochemistry and its Application in Materials Science	
אהרון גדנקה, אוניברסיטת בר-אילן	13
דמויות בחברה הישראלית לכימיה	
אלפרד הסנר, אוניברסיטת בר-אילן	17
על האקדמיה והתעשייה בישראל	
המכון לכימיה - האוניברסיטה העברית בירושלים	19
מיכה אשר	

### חברי המערכת:

משה לוי יו"ר, מכון ויצמן למדע, טל: 08-9342120 [moshe.levy@weizmann.ac.il](mailto:moshe.levy@weizmann.ac.il)  
מוריס אייזן, הטכניון, טל: 04-8292680 [chunoris@technion.ac.il](mailto:chunoris@technion.ac.il)  
יוסי דנקונה, משרד התעשייה והמסחר, טל: 02-6220220 [dancona@moit.gov.il](mailto:dancona@moit.gov.il)  
מיירי קסנר, מכון ויצמן למדע, טל: 08-9343795 [ntkesner@wis.weizmann.ac.il](mailto:ntkesner@wis.weizmann.ac.il)  
אורנון שני, אוניברסיטת בן-גוריון, טל: 08-6461196 [ashani@bgumail.bgu.ac.il](mailto:ashani@bgumail.bgu.ac.il)

### חברי הוועד הפועל של החברה:

ארנון שני-נשיא, רשף טטא-גבר, חיים כהן - מזכיר, דוד אבנר, מיכאל אורבך, יצחק אפליק, רות כוזה, זאב גרוס, דוד לאוטב, דן מאירשטיין, רוני נוימן, בלהה פישר.

### חברי ועדת בקורת:

דן הופרט, חיים לבנון, אריה פרימר.

### עיצוב גרפי:

מחלקת גרפיקה, מכון ויצמן למדע, [www.weizmann.ac.il/graphics](http://www.weizmann.ac.il/graphics)

בכינוס השנתי ה-66 של החברה, שהתקיים בשנה שעברה, ניתנה הרצאת מליאה ע"י פרופ' עדה יונת, ממכון ויצמן, על הנושא The Ribosome: A molecular machine with brains. נושא זה פותח את הגליון הנוכחי של הבטאון. הריבוזומים, שהם אוניברסליים לכל עולם החי, מתרגמים את הקוד הגנטי לביסוינתזה של חלבונים, בדרגת דיוק ויעילות העולה על כל דמיון. לפני כ-20 שנה הפגיעה עדה יונת את העולם המדעי כשהצליחה לגבש ריבוזומים. מאז, היא ממשיכה בעקשנות והתמדה, לשפר את תוצאותיה ולהגיע לרזולוציה מקסימלית של המבנה. התוצאות עד עתה מרשימות מאד ומלמדות אותנו על מגוון של ריאקציות הקורות בו-זמנית בתוך המכונה הפנטסטית הזאת. הישגיה אלה זכו אותה בפרסים בינלאומיים ולאחרונה גם בפרס ישראל למדעים לשנת 2002.

המאמר השני נכתב ע"י פרופ' אהרון גדנק, מאוניברסיטת בר-אילן, על סונכימיה. המאמר מראה איך בעזרת מכונה פשוטה, כמו סוניקטור, אפשר לבצע ריאקציות כימיות רבות. למרות העובדה שהתיאוריה לא לגמרי ברורה, התוצאות מדברות בעד עצמן, בייחוד בתחום מדע החומרים והננוכימיה.

את "הדמויות בחברה הישראלית לכימיה" מייצג הפעם פרופ' אלפרד הסנר, מאוניברסיטת בר-אילן. פרופ' הסנר הוא כימאי בעל הישגים רבים בתחום הסינתזה האורגנית ושימש בעבר כנשיא

החברה הישראלית לכימיה.

פרופ' מיכה אשר, ראש המכון לכימיה באוניברסיטה העברית, מביא את חלקו השני של מאמרו על הפעילות המחקרית במכון לכימיה בירושלים, שהוקם עוד בשנת 1925.

הכינוס השנתי ה-67 של החברה נערך השנה בירושלים. למרות המצב הביטחוני הקשה, ההשתתפות היתה גדולה ואפילו מספר המרצים מחו"ל היה מרשים. במסגרת הכינוס חולקו כנהוג פרסי החברה, ופרסים אחרים לכימאים ותיקים, לצעירים, לסטודנטים, ולכימאי העתיד - תלמידי תיכון מצטיינים.

מן הארכיון הבאנו את ספרו של פריץ הבר, המדען היהודי הגרמני הנודע, שלמרות תרומתו האדירה למדע בכלל, ולגרמניה בפרט, נאלץ לעזוב את גרמניה בגלל רדיפות הנאצים. ספריתו הפרטית המפורסמת נתרמה למכון ויז, שהיה אז בהקמתו, ושימשה בסיס התחלתי לספריית מכון ויצמן. זהו אוסף נדיר וייחודי של ההיסטוריה והפילוסופיה של המדע בתקופתו.

בוב וינטראוב, מהמכללה האקדמית בנגב, מביא את ספרו של מדען יהודי הולנדי, ארנסט יוליוס כהן, שמצא פתרון ל"מחלת הבדיל" והציל בכך חיים של רבים, אבל מצא את מותו במחנה ריכוז נאצי.

לבסוף, מותו הפתאומי של פרופ' אברהם ורשבסקי, ממכון ויצמן, הכה כתדהמה את חבריו הרבים. דברים לזכרו מובאים בגליון.

## פרס החברה הישראלית לכימיה לשנת תשס"ב

החברה הישראלית לכימיה קבעה מאז שנת תשנ"ט (1998/9) פרס ייחודי לכימיה, שיוענק מדי שנה לכימאי ישראלי מצטיין, שהוכיח מקוריות ויצירתיות במחקר או בפתוח באחד או יותר ענפים של הכימיה, ואשר זכה להכרה והערכה בינלאומית. הפרס נועד להעלות על נס ולהוקיר את תרומת הכימאי הישראלי המצטיין.

על הממליץ להגיש מכתב המלצה (עד שני עמודים) בו יפורטו:

1. הנימוקים להענקת הפרס;
  2. מהלך-חיים של המועמד בקצרה, בצרוף רשימה ראויה של פרסומיו המדעיים של המועמד;
  3. תרומת המועמד לקהילה;
  4. רשימה של ששה ממליצים ידועי-שם עם כתובתם המלאה (כולל מספר טלפון, פקס ודואר אלקטרוני).
- ממליץ המגיש מועמד בפעם חוזרת יצרף מכתב לוואי המתאר את החידושים והתרומה הנוספת מאז ההגשה הקודמת ויצרף

שמותיהם של שני ממליצים חדשים עם כתובותיהם המלאות (ראה לעיל). תקנון הפרס קובע כי המועמדים לפרס הם אזרחי ישראל בלבד. הזוכה בפרס אמור לשאת הרצאה מרכזית במסגרת הכנס השנתי של החברה הישראלית לכימיה, אשר יתקיים בשנה הבאה בטכניון בחיפה.

בשנת תשנ"ט (1998/9) זכו בפרס פרופ' מאיר להב ופרופ' לסלי לייזרוביץ ממכון ויצמן למדע. בשנת תש"ס (1999/2000) זכו בפרס פרופ' ששון צחייק מהאוניברסיטה העברית ופרופ' משה שפירא ממכון ויצמן למדע. בשנת תשס"א (2000/2001) זכו בפרס פרופ' עוזי אבן מאוניברסיטת תל-אביב ופרופ' איתמר וילנר מהאוניברסיטה העברית.

**המלצות על מועמדים לפרס יש להעביר אל מ"מ נשיא החברה פרופ' רשף טנא, המחלקה לחומרים ופני שטח, מכון ויצמן למדע, רחובות 76100.**

**המועד האחרון להגשת המועמדים הוא י"ח באייר תשס"ב (30.4.2002).**

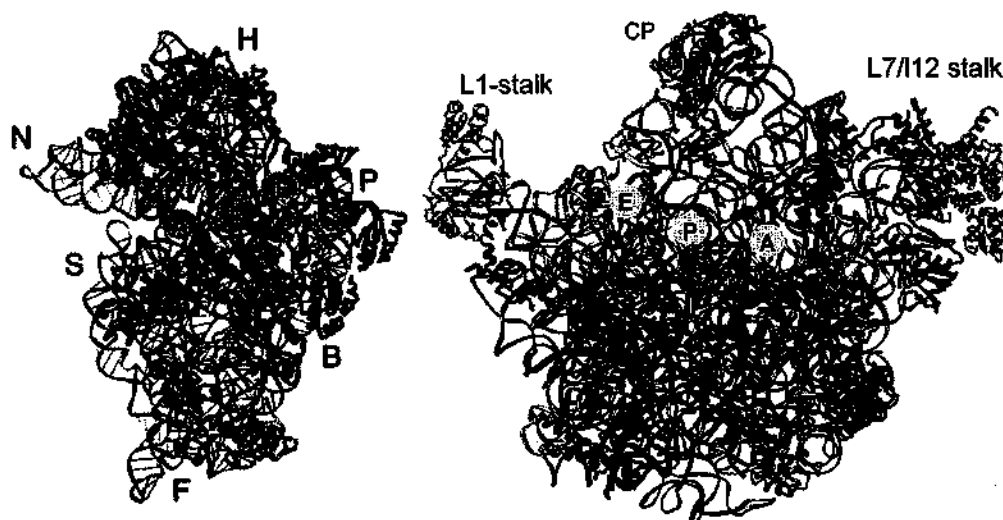
# THE RIBOSOME: A molecular machine with brains

**Ada Yonath**, Department of Structural Biology, Weizmann Institute of Science, Rehovot, Israel  
and Max-Planck-Research Unit for Ribosomal Structure, Hamburg, Germany.

## 1. INTRODUCTION

Ribosomes are the universal cellular organelles catalyzing the sequential polymerization of amino acids according to the genetic blueprint, encoded in the mRNA. They are built of two subunits that associate for performing this task. The larger subunit creates the peptide bonds and provides the path along which the nascent protein chain emerges out of the ribosome. The smaller subunit has key roles in the initiation of the process; in decoding the genetic message; in discriminating against cognate, non- and near-cognate aminoacylated tRNA molecules; in controlling the fidelity of codon-anti-codon interactions and in mRNA/tRNA translocation. The prokaryotic large ribosomal subunit (called 50S) has a molecular weight of  $1.5 \times 10^6$  Dalton, and contains two RNA chains with a total of about 3000 nucleotides and around 35 proteins. The small ribosomal subunit (called 30S) has a molecular weight of  $8.5 \times 10^5$  Dalton and contains one RNA chain of over 1500 nucleotides and around 20 proteins.

Over two decade ago we initialized a long and demanding search for the determination of the three-dimensional structure of the ribosome by X-ray crystallography. The key to high resolution data was to crystallize homogenous preparations under conditions similar to their in-situ environments or to induce a selected conformation after the crystals were formed. Relatively robust ribosomal particles were chosen, assuming that they would deteriorate less during preparation and therefore provide more homogenous starting materials for crystallization. The first crystals that yielded preliminary crystallographic information were grown from of the large subunit from *Bacillus stearothermophilus* (1). It took a few years until we identified an additional source, the large ribosomal subunit from *Haloarcula marismortui* (H50S) (2,3) that later yielded high resolution diffraction (4,5). A few additional years were needed for obtaining crystals of the small subunit from *Thermus thermophilus* (T30S) (6,7) and only recently we crystallized the large subunits from a mesophilic



### Front cover figure

The three-dimensional structures of the small (left) and the large (right) ribosomal subunits, both shown from their interface sides.

**Landmarks:** small subunit: H=head, B= body, P=platform, S=shoulder, large subunit: L1 stalk, L7/12 stalk= the GTPase stalk, CP=central protuberance. The RNA is shown in gold and silver (respectively) and the proteins in different colors. The semi-transparent proteins are less well resolved (see the front cover for color).

source, *Deinococcus radiodurans*, D50S, which was shown to yield quality diffraction at high resolution (8) (Front-cover figure). An alternative approach was to design complexes containing ribosomes at defined functional stages, such as of the entire ribosome with two tRNA molecules and a short mRNA analogue (9). *H. marismortui*, the bacterium that lives in the Dead Sea, the lake with the highest salinity in the world, was the source of the first ribosomal crystals that diffract to high resolution. This bacterium not only withstands the high salinity of the lake (~ 4 M NaCl) and the elevated temperatures of the neighborhood, it is dependent on extreme conditions. Furthermore, it accumulates enormous amounts of KCl, although the lake contains only 1% KCl (10). The reasons for the potassium intake are, most probably, not related to the ribosome function. Yet, the ribosomes of this bacterium adapted to the bacterial in-situ environment, and it was found that the ribosomal functional activity is directly linked to the concentration of potassium ions (3).

*D. radiodurans* was originally identified as a contaminant of irradiated canned meat, and later isolated from environments that are either very rich or extremely poor in organic nutrients, ranging from soil and animal feces to weathered granite in a dry Antarctic valley, room dust, wastes of atomic-piles and irradiated medical instruments. It also is the organism with the highest level of radiation-resistance currently known. It survives under conditions that cause DNA damage, such as hydrogen peroxide, and ionizing or ultraviolet radiation. It contains systems for DNA repair, DNA damage export, desiccation, starvation recovery and genetic redundancy. Well diffracting crystals of the large ribosomal subunit of *D. radiodurans* (D50S) and of its complexes with many antibiotics and substrate analogues were grown and kept under conditions almost identical to those optimized for testing their biological activity (8). These crystals were found to provide an excellent system to investigate the peptide bond formation, to gain more insight into functional flexibility and to extend the information of antibiotics binding towards rational drug design (11).

All ribosomal crystals present challenging technical problems, resulting from their enormous size; their complexity; their natural tendency to deteriorate and disintegrate; their internal flexibility and their sensitivity to irradiation. For minimizing the harm caused by the latter, we pioneered crystallographic data collection at cryogenic temperatures (12). This, together with the dramatic advances of the X-ray sources, namely the installation of third generation synchrotrons equipped with state-of-the-art detectors, and the increased sophistication in phasing, enabled us, as well as others, to handle most of the technical problems. Consequently, structures of ribosomal particles (13-15) and their complexes with substrate analogues and antibiotics that bind to ribosomes (16-22) are currently emerging at an impressive rate. Among them, the structures of the large ribosomal subunit from two phylogenetic kingdoms, eubacteria and archaea, were determined. This article compares these two structures, focusing on mobility flexibility and functional relevance.

## 2. COMPARATIVE STUDIES ON LARGE RIBOSOMAL SUBUNITS

The availability of two high resolution crystal structures of unbound large ribosomal subunits, the archaeal H50S and eubacterial D50S, as well as a lower resolution structure of T50S within the T70S ribosome, provide a unique tool for comparative studies. In the particular case of H50S and D50S, such comparison should shed light on the correlation between the structure, the function and the environment, as well as on phylogenetic aspects. We found that the structure of D50S is significantly more ordered than that of H50S. Thus, most of the features that are disordered in H50S (13) are resolved in T70S (20) and in D50S (8).

The gross similarity of the rRNA fold of D50S to the available 50S structures allowed superposition of the model of D50S onto that of the 2.4Å structure of H50S (13) and of the 50S subunit within the 5Å structure of

the T70S ribosome (20). We found that the RNA fold and the overall protein distribution are rather similar in the three structures, but detected significant structural differences even within the conserved regions, which cannot be explained solely by expected phylogenetic variations. In contrast to the significant similarity between the RNA fold of D50S and H50S, the proteins show remarkable differences, even when sharing homology with their counterparts in H50S. In addition, D50S contains several proteins that have no counterparts in H50S. We detected RNA segments replacing proteins and vice versa. Of structural interest is a three domain protein (CTC), alongside with an extended alpha helical protein (L20) and two Zn-finger proteins (L32 and L36). Analysis of the general modes of the RNA-protein interactions within D50S did not reveal striking differences from what was reported for the other ribosomal particles.

## 2.1 The peptidyl transferase center and its vicinity

The peptidyl transferase activity of the ribosome has been linked to a multi branched loop in the 23S secondary structure diagram, known as the peptidyl transferase ring (PTR). From the 43 nucleotides forming the PTR, 36 are conserved in *H. marismortui* and *D. radiodurans*. Superposition of the backbone of the high resolution structures of the PTR nucleotides in the two species (13 and in PDB 1JJ2) shows a similar fold, but the orientations of some of the nucleotides show distinct differences. The main differences in the peptidyl transferase ring include translational shifts of sugar moieties that maintain co-planar bases but are pointing to different directions in the two structures, or different degrees of rotation with hardly any change in the sugar moieties.

In unbound D50S, as in H50S, the peptidyl transferase center seems to be clear of proteins. Protein L2, a protein often implicated on peptide bond formation, was found rather far from the peptidyl transferase center, as in H50S. One of the only proteins residing

near or in the interface area of D50S, is protein L27. This protein is located at the base of the central protuberance, consistent with previous results of immuno electron microscopy, crosslinking, affinity labeling, chemical probing, mutations and footprinting (23,24 and A. Mankin, personal communication). L27 has been shown to influence the peptidyl transferase activity in *E. coli* 50S by a variety of experimental observations, including antibiotic cross-linking and a deletion mutant that shows deficiencies in the peptidyl transferase activity and impaired enzymatic binding of Phe-tRNA Phe to the A site (24,25). It has been proposed that protein L27 plays a role in mediating the proper placement of the 3' end of the A-site tRNA at the peptidyl transferase center, by screening the negative charge of the tRNA molecules from that of the ribosomal RNA during the peptidyl transferase reaction, and influence the interactions of the 3' end of deacylated tRNA with the ribosome after peptidyl transfer.

In D50S L27 is one of the most flexible proteins and its N-terminal tail is disordered. The parts of the protein that are well resolved, however, reach the proximity of the A- and the P-sites, consistent with the proposal that it contributes to peptide bond formation by facilitating the proper placement of the acceptor end of the A-site tRNA (24). Careful examination of the D50S electron density map in the vicinity of L27 indicated that in the unbound D50S the disordered tail may move around rather freely, since it is located at the particle's interface. However, based on the positions of the docked tRNA molecules according to the 5.5 structure of the T70S/tRNA complex (20), it seems that its movements will be drastically restricted once the two subunits associate to form the functionally active 70S ribosome. These restrictions, especially in the presence of tRNA molecules in the A- and the P- sites, practically dictate that the N-terminal tail of L27 must thread its way close to the tRNA molecules in the A- and P-sites, in the direction of the designated peptidyl transferase center. It was recently suggested that the exothermic reaction of peptide bond formation is



strongly dependent on proper orientation of the tRNA molecules and that the rRNA core provides the frame for the binding of the tRNA molecules (26). Protein L27 may be the component that enhances the accurate positioning of the tRNA molecules.

Interestingly, in H50S there is no homologous counterpart to L27. The protein that occupies the place of L27 is L21e. Contrary to L27, the tail of L21e folds backwards, towards the interior of the subunit, disabling potential contacts with the P-site tRNA. This may indicate that the halophilic ribosomes do not need a mediator for tRNA binding, perhaps because of the high salt concentration. It also may support our hypothesis that tails that are normally involved in binding factors or substrates, fold away from the action sites under less than optimal conditions.

## 2.2 The nascent-protein exit tunnel

More than three decades ago biochemical studies showed that the newest synthesized part of a nascent protein is masked by the ribosome (27,28). In the mid eighties, a feature that may account for these observations was first seen as a narrow elongated region in images reconstructed at very low resolution in 80S ribosomes from chick embryos (29) and at 45Å in images of 50S subunits of *Bacillus stearothermophilus* (30). Despite the low resolution, these studies showed that this tunnel spans the large subunit from the location assumed to be the peptidyl transferase site to its lower part, and that it is about 100Å in length and 15Å in diameter (30), as confirmed later at high resolution in H50S (13) and in D50S (8). The structural features building the walls of the tunnel, their chemical composition and the "nonstick" character in H50S are described in (16). We found in D50S the same characteristics - lack of well-defined structural motifs, large patches of hydrophobic surfaces and low polarity. Despite the gross similarities, it seems that the tunnel in D50S is, in several locations, somewhat wider than that of H50S.

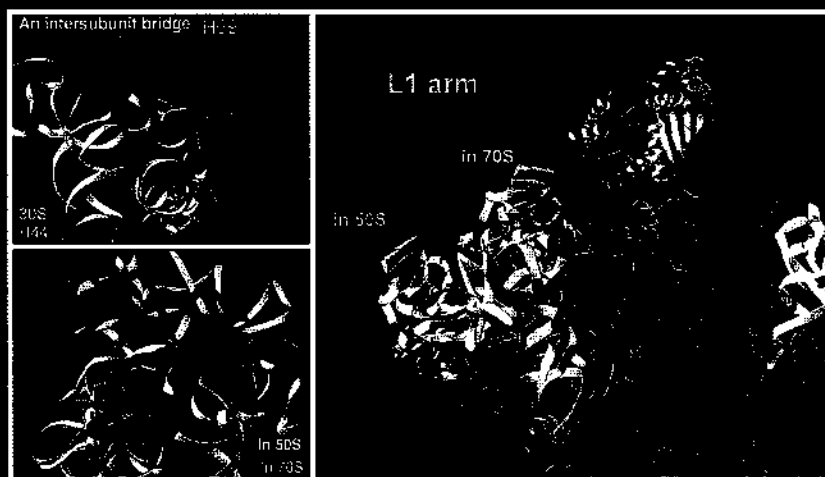
The opening of this tunnel, at the exit side, is located

at the bottom of the particle. In D50S it is composed of components of domain III, domain I as well as several proteins, including L4, L22, L23, L24 and L29. In H50S, two proteins that do not exist in D50S, L31e and L39e are also part of the lower part of the tunnel. Interestingly, the space occupied by protein L23 in D50S hosts two proteins in H50S. The halophilic L23 occupies the space taken by the globular part of L23, whereas the halophilic L39e replaces the extended loop of L23 in D50S. L39e is a small protein of an extended non-globular conformation, which penetrates into the RNA features that construct the walls of the tunnel in that region. Its extended tail is thinner than the extended loop of L23 (in D50S), therefore it penetrates deeper into the tunnel walls than the loop of L23 in D50S. L39e is present in archaea and eukaryotes, but not in eubacteria. Thus, it seems that with the increase in cellular complication, and perhaps as a consequence of the high salinity, a tighter control on the tunnel's exit was required, and two proteins (HL23 and L39e) replace a single one. So far there are no indications for a connection between this replacement and evolution. Nevertheless, a protein in this delicate position may provide the communication path between the ribosome and other cell components, as evolving further, to act as a hook for the ribosome on the ER membrane. A high resolution structure of a eukaryotic ribosome, bound to the ER membrane, should provide an answer to these open questions.

## 3. DISORDER, FLEXIBILITY AND FUNCTIONAL RELEVANCE

Most of the structural elements that are known to be involved in the non-catalytic functions of the large ribosomal subunit were found to be disordered in the 2.4Å structure of H50. Since a large number of them were clearly detected in the 5.5Å maps of the assembled 70S ribosome, it was suggested that these features are disordered in unbound subunits, and become stabilized once the two subunit associate and the 70S ribosome is being formed (see above and in (20)). The finding

## Functionally relevant flexible region in the large ribosomal subunit from *Deinococcus radiodurans*



### Back cover figure

#### **Left: The intersubunit bridge H69**

The intersubunit bridge formed by helix H69. Orange - H69 in the 70S ribosome and in cyan as in unbound D50S. Helix H44 of the small subunit is shown in gray and the docked P-site tRNA in magenta. For clarity, the mRNA is not shown.

#### **Right: The movement of the L1 stalk**

A part of the upper side of the view of D50S shown on the front cover with the L1-stalk on the left. The gold feature represents its position in unbound D50S (the "open-gate" state) and the green, as in the whole ribosome, in a conformation that may correspond to a "closed-gate". Red indicates a possible pivot point. For orientation, the P-site (blue) and the A-site (cyan) tRNAs are also shown. (see the back cover for color).

that almost all of these features are rather ordered in the unbound D50S indicates that H50S crystal structure contains features that flex more than in D50S. Biochemical, functional and electron-microscopical studies indicated that these functionally relevant features are inherently flexible. However, flexibility is not necessarily synonymous with disorder. In many cases, as in D50S and T70S, the flexible structural elements assume several well-defined conformations,

and their switch from one conformation to another is related to their functional states. It is likely that the crystallized H50S subunits underwent environmentally induced conformational changes, consistent with their storage under far from physiological conditions. This may indicate that the ribosomal strategy to avoid subunit association and substrate binding under far from physiological conditions, is to introduce disorder in the relevant features.

### 3.1 The lateral stalks

The L1 stalk (Back-cover figure) includes helices H75-H78 and protein L1. In the complex of T70S with three tRNA molecules, the L1 stalk interacts with the elbow of E-tRNA. This interaction, together with protein S7 of the small subunit, blocks the exit path for the E-tRNA. Consequently it was suggested that the release of the deacylated tRNA requires that one or both of these features move (20). In H50S, the entire L1 arm is disordered and therefore could not be traced in the electron density map (13), an additional hint of the inherent flexibility of this feature. In D50S the RNA helices of the L1 stalk have a similar fold to that seen in T70S. However, the entire D50S L1 stalk is tilted by about 30 degrees away from its position in the T70S ribosome, so that the distance between the outermost surface points of the L1 arm in the two positions is over 30Å (Back-cover Figure).

### 3.2 Flexible intersubunit bridges

The intersubunit bridges are the features connecting the two subunits within the assembled ribosome, namely the linkers between the two ribosomal subunits. The correct assembly of the entire ribosome from its two subunits is the key, or one of the major keys, for proteins biosynthesis, hence these bridges must be positioned accurately and point at the exact direction. Each intersubunit bridge is formed from two parts - one of the small and one of the large subunit. We found that whereas those of the small subunit have almost the same conformation in the unbound and bound subunit, those originating from the large one are inherently flexible, and may have different conformations or assume a high level of disorder. Upon subunit association the conformations of these bridges change so that they can participate in the creation of the assembled ribosome. Thus, their structure and the nature of their conformational mobility should show how the ribosome controls its intricate assembly. The Back-cover Figure demonstrates a feasible

sequence of events leading to the creation of the intersubunit bridge from the large subunit to the decoding center on the small one. Helix H69, that is responsible for this bridge lies in the unbound 50S subunit on the interface surface and interacts intensively with helix H70 and H71. Once the initiation complex, that includes the small subunit and tRNA at the P-site approaches the large subunit, the tRNA pushes helix H69 towards the decoding center, and the intersubunit bridge is formed.

In the 70S ribosome H69 interacts with the small subunit near the decoding center in Helix H44. In this position H69 can also contact the A- and P-site tRNA molecules, and be proximal to elongation factor EF-G (20). It seems that H69 undergoes conformational rearrangements between the free and the bound orientations and it is clear that the displacement and the rotation of a massive helix like H69 require a high level of inherent flexibility. This may explain why in the 2.4Å structure of H50S, that was determined at far from physiological conditions, H69 is disordered (13).

## 4. ANTIBIOTICS THAT BIND TO THE LARGE SUBUNIT

Ribosomes of pathogens are a major target for natural and synthetic antibiotics. The detailed knowledge of antibiotic binding sites is the key for the understanding of the mechanisms of drug action as well as an excellent tool for studying ribosomal function. *D. radiodurans* are sensitive to all clinically important antibiotic agents that target ribosomes, contrary to halophilic ribosomes that show significant resistance to antibiotics (31). Difference electron density maps in which the 3.1Å structure model of the 50S subunit of *D. radiodurans* (8) was used as a reference, allowed an unambiguous determination of the binding sites of the following antibiotics: chloramphenicol, clindamycin, erythromycin, clarithromycin and roxithromycin (11). All were found to target the 50S subunit only at the peptidyl transferase cavity, and explain previous mutational and footprinting data. Each class of

antibiotics among these five agents interacts exclusively with specific nucleotides, all within the so called PTR multi-branched loop of domain V of the 23S rRNA (8), and it was found that the binding of these antibiotics did not result in any significant conformational change of the peptidyl transferase cavity.

Chloramphenicol and clindamycin are known to block peptidyl transferase. In the crystal structure of the complex chloramphenicol with D50S, one of its reactive oxygens forms hydrogen bonds with C2452, which has been previously shown to be involved in chloramphenicol resistance. Its additional reactive oxygens interact with U2504, G2061 (that has been implicated in chloramphenicol resistance in rat mitochondria), U2506, G2505, U2506, and U2485 either directly or via  $Mg^{++}$  ions. The binding site of the lincosamide clindamycin partially overlaps with that of chloramphenicol. Its hydrogen bond system includes A2505, C2452 and G2505. Interestingly, neither of these antibiotics binds to A2451, the nucleotide assigned as one of the most important for the catalytic mechanism of the ribosome, based on the 2.4Å structure of *H. marismortui*.

All three macrolides, erythromycin, clarithromycin and roxithromycin, were located at the entrance of the protein exit tunnel, consistent with previous suggestions that they block the progression of the nascent peptide (32). The Back-cover Figure shows the binding site of erythromycin. Its binding site may allow the formation of 6-8 peptide bonds before the nascent protein chain reaches them. Once macrolides are bound, they reduce the diameter of the tunnel from the original 18-19Å to less than 10Å, and since the space not occupied by erythromycin hosts a hydrated  $Mg^{++}$  ion, the passage available for the nascent protein is 6-7Å. Moreover, in order to reach this narrow passage the nascent peptide needs to progress in a diagonal direction, thus imposing further limitations on the growing protein chain. These structural results are consistent with previous biochemical findings, showing that up to eight-mer peptides can be produced by

erythromycin-bound ribosomes (32).

The binding sites of all five antibiotics were found to be composed exclusively of segments of 23S rRNA at the peptidyl transferase cavity. The high affinity of the macrolides ( $K_{diss} 10^{-8}$  M) to the ribosome cannot be explained solely by their hydrogen bonding scheme, and it is likely their binding is being further stabilized by van der Waals forces, hydrophobic interactions, and the geometry of the rRNA that tightly surrounds the macrolide molecules. Similar to the small ribosomal subunit, ribosomal proteins may affect the binding and action of ribosome-targeted antibiotics, but the primary target of these antibiotics is rRNA. The two ribosomal proteins that have been implicated in erythromycin resistance are L4 and L22. However, the closest distances of erythromycin to these proteins are 8-9Å, distances that are too long to create meaningful chemical interactions, and it was suggested that the macrolides resistance acquired by mutations in these two proteins is an indirect effect, produced by a perturbation of the 23S rRNA induced by the mutated proteins, in accord with previous findings (33). These perturbations may or may not be connected to the changes in the width of the protein exit tunnel, as proposed based on cryo electron microscopy studies, performed at low resolution (34).

These studies illuminated some of the structural principles of antibiotics action. Chloramphenicol targets mainly the A-site. It is located close to the amino acceptor group of substrate analogue CC-Puromycin (16). It interferes with the aminoacyl moiety of the A-site tRNA, consistent with previous findings (35). The macrolides bind close to the entrance to the protein exit tunnel, hence sterically block the progression of the nascent peptide. Clindamycin interferes with the A-site and P-site substrate binding and physically hinders the path of the growing peptide chain. In this way it bridges between the binding site of chloramphenicol and that of the macrolides. It overlaps with both A- and P-sites, explaining its A/P hybrid nature (36). These antibiotics could also inhibit peptidyl transferase by interfering with the proper positioning

and the translocation of the tRNAs at the peptidyl transferase cavity. This hindrance may be direct, as in the case of chloramphenicol, or indirect, as in the case of the three macrolides. In addition, antibiotic binding physically link regions known to be essential for the proper positioning of the aminoacyl- and peptidyl-tRNAs and thus limit the conformational flexibility needed for protein biosynthesis.

The binding sites of these antibiotics have some overlapping nucleotides, explaining why clindamycin and macrolides bind competitively to the ribosome and why most RNA mutations conferring resistance to macrolides also confer resistance to lincosamides (reviewed in (32)). The common nucleotides targeted by antibiotics may be considered as essential to peptide bond formation. Hence, the information derived from the overlapping binding sites may indicate how to create powerful antibiotics combinations and how to design antibiotics of a higher stability.

## 5. CONCLUDING REMARKS

Ribosomal crystallography, initiated two decades ago, yielded recently exciting structural and clinical information. The findings that the studied antibiotics interact almost exclusively with the RNA chains, explains why resistance to antibiotics that target ribosomes in clinical strains can be linked, in many cases, to mutations of the ribosomal RNA within functional relevant regions. As the therapeutic use of antibiotics has been severely hampered by the emergence of drug resistance in many pathogenic bacteria, revealing antibiotics binding sites may assist not only rational drug design but may also open the door for minimizing drug resistance. Still to be revealed is the high resolution structure of the entire ribosome and the mechanism of peptide bond formation. The recently identified mesophilic source, the ribosomes of which crystallize under close to physiological conditions, in unbound state as well as in complexes with antibiotics or substrates, indicate that more excitements are due in the foreseeable future.

## Literature Cited

- (1) Yonath, A., Mussig, J., Tesche, B., Lorenz, S., Erdmann, V., Wittmann, H.G.  
(1980) *Biochem. Internat.*, 1, 428, 31-35
- (2) Yonath, A., Bartunik, A.D., Bartels, K., Wittmann, H.G., (1984) *J. Mol. Biol.*, 177, 201-6
- (3) Shevack, A., Gewitz, H.S., Hennemann, B., Yonath, A., Wittmann, H.G. (1985) *FEBS lett.* 184, 68-73
- (4) Makowski, I., Frolow, F., Shoham, M., Wittmann, H.G., Yonath, A., (1987) *J. Mol. Biol.*, 193, 819-22
- (5) von Boehlen, K., Makowski, I., Hansen, H.A., Bartels, H., Berkovitch-Yellin, Z., et al.,  
(1991) *J. Mol. Biol.*, 222, 11-15
- (6) Yonath, A., Glotz, C., Gewitz, H.A. Bartels, K.S. von Bohlen, K. et al. (1988) *J. Mol. Biol.*, 203, 831-4
- (7) Trakhanov, S.D., Yusupov, M.M., Agalarov, S.C, Garber, M.B., Ryazantsev, S.N., et al.  
(1987) *FEBS Letters*, 220, 319-22
- (8) Harms, J., Schlunzen, F., Zarivach, R., Bashan, A., Gat, S., et al. (2001) *Cell*, in press
- (9) Hansen, H.A.S., Volkmann, N., Piefke, J., Glotz, C., Weinstein, S., Makowski, I., et al.  
(1990) *Biochim Biophys Acta*, 1050, 1-7
- (10) Ginzburg, M., Sacks, L., Ginzburg, B.Z.,  
(1970) *J. Gen. Physiology*, 55, 178-207
- (11) Schlunzen, F., Zarivach, R., Harms, J., Bashan, A., Tocilj, A., et al. (2001) *Nature*, 413, 814-821
- (12) Hope, H., Frolow, F., von Boehlen, K., Makowski, I., Kratky, C. et al. (1989) *Acta Cryst.* B345, 190
- (13) Ban, N., Nissen, P., Hansen, J., Moore, P.B., Steitz, T.A., (2000) *Science* 289, 905-20
- (14) Schlunzen, F., Tocilj, A., Zarivach, R., Harms, J., Gluhmann, M., et al. (2000) *Cell*, 102, 615-23
- (15) Wimberly, B.T., Brodersen, D.E., Clemons, W.M., Jr, Morgan-Warren, R.J., Carter, A.P., et al.  
(2000) *Nature* 407, 327-39
- (16) Nissen, P., Hansen, J., Ban, N., Moore, P.B., Steitz, T.A. (2000) *Science* 289, 920-30
- (17) Brodersen, D.E., Clemons, W.M., Carter, A.P., Morgan-Warren, R.J., Wimberly, B.T., et al.  
(2000) *Cell* 103, 1143-54

- (18) Carter, A.P., Clemons, W.M., Brodersen, D.E., Morgan-Warren, R.J., Wimberly, B.T., et al. (2000) *Nature* 407, 340-8
- (19) Carter, A.P., Clemons, W.M., Jr, Brodersen, D.E., Morgan-Warren, R.J., Hartsch, T., et al. (2001) *Science* 291, 498-501
- (20) Yusupov, M.M., Yusupova, G.Z., Baucom, A., Lieberman, K., Earnest, T.N., et al. (2001) *Science* 292, 883-96
- (21) Ogle, J.M., Brodersen, D.E., Clemons, W.M., Jr, Tarry, M.J., et al (2000) *Science* 292, 897-902
- (22) Pioletti, M., Schlunzen, F., Harms, J., Zarivach, R., Gluhmann, M., et al. (2001) *EMBO J.* 20, 1829-39
- (23) Sonenberg, N., Wilchek, M., Zamir, A. (1973) *Proc Natl Acad Sci USA* 70, 1423-26
- (24) Wower, I.K., Wower, J. and Zimmermann, R.A. (1998) *J Biol Chem* 273, 19847-52
- (25) Bischof, O., Urlaub, H., Kruff, V. and Wittmann-Liebold, B. (1995) *J. Biol Chem.* 270, 23060-4
- (26) Polacek, N., Gaynor, M., Yassin, A., Mankin, A.S., (2001) *Nature* 411, 498-501
- (27) Malkin, L.I. and Rich, A.

- (1967) *J Mol Biol* 26, 329-46
- (28) Sabatini, D.D. and Blobel, G. (1970) *J Cell Biol* 45, 146-57
- (29) Milligan, R.A., and Unwin, P.N. (1986) *Nature* 319, 693-5
- (30) Yonath, A., Leonard, K.R., and Wittmann, H.G. (1987) *Science* 236, 813-6
- (31) Mankin, A.S, and Garrett R.A. (1991) *J Bacteriol* 173, 3559-63
- (32) Tenson, T., DeBlasio, A. and Mankin, A. (1996) *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* 93, 5641-5646
- (33) Gregory, S.T. and Dahlberg, A.E. (1999) *J. Mol. Biol.* 289, 827-834 [66] Vazquez, D. (1975) *Inhibitors of protein synthesis* (Springer Verlag, Berlin, Germany)
- (34) Gabashvili, I.S., Gregory, S.T., Valle, M., Grassucci, R., Worbs, M., Wahl, M.C., Dahlberg, A.E. and Frank, J. (2001) *Mol. Cell*, 8, 181-188
- (35) Vazquez, D. (1975) *Inhibitors of protein synthesis* (Springer Verlag, Berlin, Germany)
- (36) Kalliarafopoulos, S., Kalpaxis, D.L. and Coutsoygeorgopoulos, C. (1994) *Mol. Pharmacol.* 46, 1009-1014



#### **Ada Yonath**

Ada Yonath received her B.Sc. and M.Sc. degrees at the Hebrew University in Jerusalem, and her Ph.D at the Weizmann Institute of Science in Rehovot.

She holds the Martin A. Kimmel Professorial Chair in the Department of Structural Biology at the Weizmann Institute and is the Head of the Max-Planck Research Unit, in Hamburg, Germany.

She was a Visiting Professor at the Max-Planck Institute for Molecular Genetics in Berlin, and visiting scientist in the Universidad Austral de Chile, the University of Chicago and the University of Alabama. The Honors and Awards that she has received include: The Hassel Lecture, Oslo, Norway, the Frontier of

Science Lecture, Case Western University, the Maria Goeppert-Mayer Lecture, San Diego, address to the Japanese Biochemical society, Tokyo, the Stein Lecture, Rockefeller University, NY, the Welch Foundation Lecturer, Texas, Honorary Member of the Israeli Crystallographic Society, National Institutes of Health (NIH) Certificate of Distinction, the Kilby International Award, USA, the First European Crystallography Prize, Nancy, France, the Kolthof Award for outstanding research in Chemistry, Technion, Haifa, , the F.A. Cotton Medal, Texas and the Israel Prize in Science for 2002.

Ada Yonath is, a member of the European Molecular Biology Organization (EMBO), a member of the International Academy of Astronautics (IAA) and a member of the Israeli Academy of Sciences and Humanities.

# SONOCHEMISTRY

## and its Application in Materials Science

Aharon Gedanken, Department of Chemistry, Bar-Ilan University, Ramat-Gan.

We are all aware of the use of ultrasound radiation in medicine, where it is being used mostly for diagnosis, and more recently focused ultrasound radiation is being used to burn cancer cells. Less is known of its application in chemistry, despite the fact that it has applications across almost the whole breadth of chemistry. One of the main advantages in conducting sonochemical experiments is that it is very inexpensive to get started in the field. The current review is aimed at introducing the field of sonochemistry and describing the activities in our laboratory.

Let us first address the question of how 20kHz radiation can rupture chemical bonds, and try to explain the role of a few parameters in determining the yield of a sonochemical reaction, and what are the unique products obtained when ultrasound radiation is used in Materials Science. General introductions to the subject can be found in recent books and reviews [1-4].

A number of theories were developed in order to explain how a 20kHz sonic radiation can break chemical bonds. They all agree that the main event in sonochemistry is the creation, growth and collapse of a bubble that is formed in the liquid. The first puzzle is how such a bubble can be formed, considering the fact that the forces required to separate water molecules to a distance of two van-der Waals radii, would require a power of 105 W/cm<sup>2</sup>. On the other hand, it is well known that in a sonication bath, with a power of 0.3 W/cm<sup>2</sup>, water is already converted to hydrogen peroxide. Different explanations were offered; they are all based on the existence of unseen particles, or gas bubbles, that decrease the intermolecular forces, enabling the creation of the bubble. The experimental evidence, that when the solution undergoes ultrafiltration, before the application of the ultrasonic power, there is no sonochemistry, supports these theories. The second stage is the growth of the bubble, which occurs through the diffusion of solute vapor to the volume of the bubble. The third stage is the collapse of the bubble that happens when the bubble size reaches its maximum value. According to the hot-spot

mechanism, this implosive collapse raises the local temperature to 5000°K and the pressures to a few hundred atmospheres. These extreme conditions cause the rupture of chemical bonds.

From the time we entered the field in 1993, we were intrigued by the fact that the products of many sonochemical reactions were in the form of amorphous nanoparticles. For example, K. Suslick, who was one of the initiators of the field, has demonstrated that the sonication of Fe(CO)<sub>5</sub> as a neat liquid, or its solution in decalin, yielded 5-20 nanometer size amorphous iron particles [5]. The reason for the amorphicity of the products is related to the high cooling rates (>10<sup>11</sup> K/sec) obtained during the collapse of the bubble, which does not allow the products to organize and crystallize. These high cooling rates result from the fast collapse that takes place in less than a nanosecond [6]. For this reason, a sonicated solution containing a volatile solute will always lead to amorphous products. However, the reason for the nanometer-sized particles is not yet clear. The estimated size of the collapsing bubble varies from ten to a few hundred microns. In addition to the region inside the bubble, where a gas phase reaction takes place upon its collapse, a second important region is of great importance. This is the interfacial region, which surrounds the collapsing bubble. Its width is calculated to be 200 nm, and the temperature reached after collapse 1900°K [7]. Sonochemical reactions of nonvolatile compounds such as salts will occur in this region. In this case, the sonochemical reactions occur in the liquid phase. The products are either amorphous or crystalline nanoparticles depending on the temperature in the ring region where the reaction takes place.

We cannot mention here all the parameters (frequency, power, gas under which the sonication takes place, pressure of the gas, etc.) that affect the sonochemical yield and rate. We will just mention one important parameter, the temperature. The equation of an adiabatic implosion is

$$T_{\max} = T_0 \{P_{\text{ex}}(g-1)/P_{\text{bub}}\}.$$

where  $T_{\max}$  is the temperature reached after the collapse

of the bubble,  $T_0$  is the temperature of the sonication bath,  $g=C_p/C_v$ ,  $P_{ex}$  is the external pressure equal to the sum of the hydrostatic and acoustic pressure, and  $P_{bub}$  is the pressure of the gas inside the cavity, at the radius at which it collapses. The choice of a nonvolatile solvent (decalin, hexadecane, isodurene, etc.) guarantees that only the vapors of the solute can be found inside the cavitating bubble. Thus  $P_{bub}$  is practically the vapor pressure of the solute, and since it is found in the denominator, lower  $P_{bub}$  results in higher temperatures and faster reaction rates.

The conclusion is that the temperature affects the sonochemical reaction rate in two ways. On the one hand, lower temperatures cause a higher viscosity, which makes the formation of the bubble more difficult, and on the other hand, the dominant effect is that at lower temperatures higher rates will be achieved in sonochemical processes. This is why the sonic reaction involving volatile precursors is run at lower temperatures. Apparent negative activation energies were measured for sonochemical reactions.

Since 1996, when our first papers began to appear, we have published more than 100 papers describing the preparation of a large variety of nanomaterials, including metals, alloys, metal oxides, metal sulfides, metal nitrides, chalcogenides, metal-polymer composites, ceramic materials, dielectric materials, and others. In addition to the synthetic work, we have developed a number of fields that have emerged from our ability to prepare such a large variety of materials. Here are some of these research areas.

The self-assembly monolayer coating of many functional groups, especially thiols on surfaces and particles, have attracted many groups around the world. In about 60% of the reports gold served as the substrate. 30% of the studies were conducted on silver and 10% on copper. We have coated Fe and  $Fe_2O_3$  with long organic alkyl chains having a functional group at their ends. In addition to the regular questions such as organization of the alkyl chains, chemical bonding versus physical absorption, and thermal stability, a new dimension, the magnetic properties were added. The

question asked was whether by changing the functional group, or the alkyl chain, it is possible to "tailor" the magnetic properties. The answer obtained was positive. The magnetic properties depend strongly on the nature of the functional group bonded to the Fe, or  $Fe_2O_3$  nanoparticles. For example, the saturation magnetization (in fact saturation is not observed and it is only an approximate number) of thiols, carboxylic acids, and alcohols bonded to Fe are about 50-80 emu/gr Fe, whereas those having sulfonic and phosphonic acids are only 4-8 emu/gr Fe. The comparison is made for chains with an equal number of carbon atoms. These differences are also reflected in the blocking temperatures of the coated particles.

Another closely related field that we have developed is the sonochemical coating of submicron ceramic spheres (silica, alumina and zirconia) by a large variety of nanoparticles. This was done by synthesizing the ceramic spheres by conventional techniques (like the Stober method for silica particles). The spheres were then introduced in the sonication bath, mixed with the solution of the precursor and the ultrasonic radiation was passed through the solution for a predetermined time. In this way we were able to deposit on the surface of the ceramic sphere nanoparticles of metals (Ni and Co for example), metal oxides ( $Fe_2O_3$ ,  $Mo_2O_5$ ), rare earth oxides ( $Eu_2O_3$ ,  $Tb_2O_3$ ), semiconductors (CdS, ZnS) and  $Mo_3C$ . A figure presenting coated silica spheres is shown in Figure 1.

Obtaining amorphous products are of importance in a number of fields of science, in particular in catalysis, where an amorphous nanoparticle is more active than the corresponding nanocrystalline particle having the same diameter. This was explained as being due to the dangling bonds active in the amorphous catalyst. Over the years we have examined our products as catalysts in an oxidation reaction, the oxidation of cyclohexane. In a series of papers we compared the catalytic performance of sonochemically-made catalysts in this reaction.

In the last two years we concentrated our sonochemical efforts in two directions, sonochemical synthesis of



mesoporous (MSP) materials, and the use of ultrasound radiation in the deposition of amorphous nanomaterials into the mesopores. We have developed a sonochemical method to prepare MSP silica [8], MSP titania [9], MSP YSZ (Yttria stabilized zirconia), and other MSP materials. The sonochemical method is faster than the corresponding sol-gel preparation technique. The sonochemical products were shown to have thicker walls than those synthesized by the conventional methods. We have shown that the products are more hydrothermally stable than the sol-gel products. Our MSP titania has the highest surface area reported.

In addition, we have used sonochemistry for the insertion of amorphous nanoparticles into the mesopores. We have deposited  $\text{Mo}_2\text{O}_3$  into the mesopores of MCM-41 (MSP silica) [10], and amorphous  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  [11] in the mesopores of MSP titania. Five physical methods were used to prove that the amorphous nanoparticles are indeed anchored onto the inner walls of the channels. The amount of  $\text{Mo}_2\text{O}_3$  that was inserted in the mesopores was 45% by weight. An attempt to increase this amount showed that the excess is deposited outside the mesopores. In a recent paper submitted for publication we reported the synthesis of MSP iron oxide. Its catalytic activity in the oxidation of cyclohexane is the highest obtained so far. It converts 36% of cyclohexane to cyclohexanol and cyclohexanone (5:1 ratio) at 70°C and one atmosphere of oxygen.

The second project is related to the sonochemical preparation of air-stable iron nanoparticles having a very high magnetization. Iron nanoparticles are pyrophoric and protecting them against oxidation is a challenge. In the process developed in our laboratory we sonicated the solution of  $\text{Fe}(\text{CO})_5$  in diphenylmethane. The as-prepared material is composed of iron nanoparticles coated by a polymer. Further annealing of the sample yields the air-stable product [12]. The characterization of the product and the stability studies are based on Mossbauer spectroscopy, XRD, and magnetization measurements. Although some efforts in materials science are still

directed towards developing new methods for the fabrication of nanomaterials, more attention is directed these days to the control of the size and shape of the nanoparticles. We have demonstrated over the years, that the control of the particle size is quite easy when using sonochemistry. It is accomplished simply by the variation of the concentration of the precursor in the irradiated solution. The more dilute the solution, the smaller are the particles. The shapes of the products of the sonochemical process are less predictable. A major factor is the presence or absence of a surfactant. We can just mention that shapes such as olympic nanorings ( $\text{BaFe}_{12}\text{O}_{19}$ ) [13], nanocylinders ( $\text{GaOOH}$ ) [14], nanotubes ( $\text{TiO}_2$ ) [15], nested inorganic fullerenes ( $\text{Ti}_2\text{O}$ ) [16], and spheres were among the shapes of the sonochemical products.

In addition to the catalytic applications mentioned above, the sonochemical products will be applied to two other fields. The first is their use as electrode building materials in rechargeable Li batteries, and the second is the fabrication of rare-earth doped optical fibers, which involves the sonochemical deposition of nanosized rare-earth oxide on the surface of submicron silica spheres.

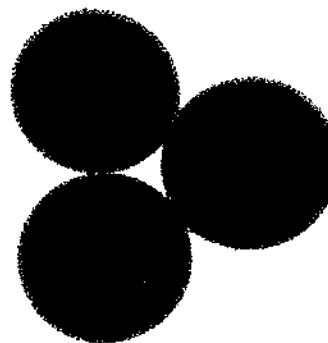


Figure 1. TEM image of silver nanoparticles deposited on silica spheres.

## References

- [1] T.J.Mason, Chemistry with Ultrasound, Elsevier, Oxford, (1990)
- [2] K.S. Suslick, (editor), Ultrasound: its Chemical, Physical and Biological Effects, VCH, Weinheim, (1988).
- [3] G.J. Price, "Current Trends in Sonochemistry" Royal society of Chemistry, Cambridge, (1992).
- [4] K.S. Suslick KS, G. J. Price  
Ann. Rev. Mater. Sci. 29, 295, (1999).
- [5] K.S. Suslick, S-B. Choe, A.A. Cichowlas, M.W. Grinstaff, Nature 353, 414 (1991).
- [6] a) R. Hiller, S. J. Putterman, B.P. Barber,  
Phys. Rev. Lett. 69, 1182 (1992).  
b) B.P. Barber, S. J. Putterman,  
Nature, 352, 414 (1991).
- [7] K.S. Suslick, D. A. Hammerton and R. E. Cline,  
J. Am. Chem. Soc., 108, 5641 (1986).
- [8] X. Tang, S. Liu, Y. Wang, W. Huang, Yu. Koltypin,  
A. Gedanken, Chem. Comm., 2119 (2000).
- [9] Y. Wang, X. Tang, L. Yin, W. Huang, A. Gedanken,  
Advanced Mater., 12, 1137 (2000).
- [10] M. V. Landau, L. Vradman, and M. Herskowitz,  
Y. Koltypin, A. Gedanken, J. of Catalysis, 201, 22  
(2001).
- [11] N. Perkas, Y. Wang, Yu. Koltypin, A. Gedanken,  
S. Chandrasekaran, Chem. Comm., 988 (2001).
- [12] S. Nikitenko, Yu. Koltypin, I. Felner, A.  
Gedanken, Angew. Chem. Inter. Ed. (December 2001).
- [13] K. V. P. M. Shafi, I. Felner and A. Gedanken  
J. Phys. Chem B 103, 3358 (1999).
- [14] S. Avivi, Y. Mastai, G. Hodes and A. Gedanken,  
J. Amer. Chem. Soc. 121, 4196 (1999).
- [15] Yingchun Zhu, Hongliang Li, Yuri Koltypin,  
Yaron Rosenfeld Hacohen, Aharon Gedanken  
Chem. Comm. (In Press).
- [16] S. Avivi, Y. Mastai, and A. Gedanken.  
J. Amer. Chem. Soc. 122, 4331 (2000).



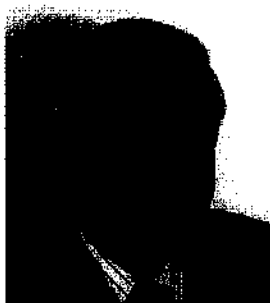
### Aharon Gedanken

Aharon Gedanken studied for his B.Sc. and M.Sc. degrees at Bar-Ilan University. His Ph.D. Thesis on "The spectroscopy of impurity states in solid rare gases", he completed at Tel-Aviv University, under the supervision of Prof. J. Jortner. He spent two years at USC with Prof. O. Schnepp, as a postdoctoral fellow, and returned to Israel to take a lecturer position at Bar-Ilan University. He spent two sabbatical years, 1980-1981, and 1987-1988, at AT&T Bell Labs, with Dr. M. B. Robin. In 1992 he switched his interests from spectroscopy to nanotechnology.

Gedanken served as the Chairman of the Department of Chemistry and Dean of the Faculty of Sciences at Bar-Ilan University, and until recently he was the Chairman of the National committee for Advanced Materials and Chemical Technologies.

# PROF. ALFRED HASSNER

Formerly the President of the Israel Chemical Society



Alfred Hassner was born in 1930 in Czernowitz, Romania (formerly Austria, now part of the Ukraine), where he was only able to complete the third grade before WWII changed his life and that of about 100,000 Jewish residents of the city. He lost his father at age 13 but survived the holocaust. Fred enrolled directly into the Technische Hochschule in Vienna (1949-1951), skipping most of grades 4-12 and then immigrated to the USA where he received a scholarship at the University of Nebraska and completed his B.Sc. in 1952. Continuing his graduate studies at Nebraska under the direction of Norman Cromwell, he finished his Ph. D. studies in 1956. He continued post-doctoral training under Louis Fieser at Harvard during 1956-7, joining the faculty at the University of Colorado as an Assistant Professor in 1957. There he rose through the ranks and became a Professor in 1966, a position he held until 1975 when he moved to the State University of New York at Binghamton being awarded the prestigious rank of Leading Professor. He spent sabbatical years at the Weizmann Institute in 1972-73 as a National Cancer Institute Special Fellow, and then again in 1981 as a Meyerhof Fellow. In 1983 he moved to Israel as a Professor in the Chemistry Department of Bar-Ilan University. He is now Professor Emeritus and still actively directing a research group. About a year ago, a special symposium was held at Bar-Ilan University in Hassner's honor entitled "Recent Advances in Organic-Bioorganic Chemistry" which featured many of his former students, colleagues and friends.

As a scholar, Hasner has held visiting professorships and appointments in many universities throughout the years. These include Harvard (1966), ETH (NIH Special Fellow, 1967), Wurzburg (1971), Weizmann Institute (1972-73, 1981-2), Hebrew University (1979), Universite Claude Bernard, Lyon, (1980), Kyushu Institute of Technology (1985), Stanford (1987),

University of California, Berkeley (1989), University of Nijmegen (1995), University of California, San Diego (1998).

Throughout the chemical community in Israel and abroad, Hasner has played an important role in both the organization and content of many National and International Meetings. He has chaired several symposia including the Gordon Research Conference on Heterocycles and has given over 250 invited seminars at universities and industrial laboratories. In addition, he has presented over 35 plenary or invited symposia lectures over his career. He has authored or been the Editor of books and monographs: such as "Organic Syntheses Based on Name Reactions and Unnamed Reactions" (Pergamon); three volumes of "Small Ring Heterocycles" (Wiley); three volumes of "Advances in Asymmetric Synthesis", (JAI).

With more than 300 research articles in print, Prof. Hassner has had a major impact on chemical science, particularly in the area of new reagents in organic synthesis, and small ring heterocyclic chemistry. Some of his major contributions include the stereoselective and regioselective introduction of nitrogen functionality into organic molecules, important in the synthesis of bioactive molecules and natural products. In the steroid field, he developed the synthesis of steroido-heterocycles and was one of the first to recognize the application of NMR half-widths to stereochemical structure assignments, before high resolution NMR became available. The broad scope of Prof. Hassner's research includes synthesis of alkaloids, pheromones and glycosidase inhibitors, as well as molecular mechanics correlations that led to evaluation of strain energies during nitrogen inversion in cyclic and polycyclic amines. While studying condition-dependent free radical or ionic mechanisms in additions reactions to multiple bonds, Hassner first proposed the concept of regiochemistry and regioselectivity, now a universally used terminology in organic chemistry. He was one of the early developers of the use of 4-dialkylaminopyridines (e.g. DMAP) as super-acylation catalysts in enhancing direct

esterification of hindered alcohols. Among the many synthetically useful methodologies that Hassner and his group developed are stereo- and regio-selective [2+2] ketene - olefin cycloadditions and stereoselective intramolecular [3+2] dipolar cycloadditions, reactions of great utility in bio-organic and pharmaceutical research.

Throughout his career he has enjoyed constant inspiration and encouragement from his wife Cyd, who unfortunately passed away recently.

Prof. Hassner has been the recipient of numerous distinctions and awards for his contributions to chemistry. He was a Monsanto Fellow, a National

Cancer Institute Special Fellow, a von Humboldt Visiting Professor, ACS National Awards Committee member, Lady Davis Foundation Fellow, NSF US-India Exchange Lecturer (1979), France-US Lecturer, Nominee SUNY Chancellor's Award for Excellence in Teaching, Meyerhoff Fellow, Fulbright Senior Award, NIH Medicinal Chemistry Study Session member, Japan Society for Promotion of Science Lecturer, U.S. National Research Council Award, A.W. Killam Award, Canada.

Prof. Hassner served as President of the Israel Chemical Society from 1991 to 1994.

# המכון לכימיה באוניברסיטה העברית בירושלים

## מיכה אשר, ראש המכון

כתבה שניה (חלק ראשון הופיע בגליון מס' 8, דצמבר 2001)

### תעודת זהות לשנת 2001:

מס' תלמידי תואר ראשון - 200

מס' תלמידים לתארים מתקדמים - 150

מס' חברי סגל - 40

תכניות דו-חוגיות עם ביולוגיה, מדעי הסביבה, מחשבים וכן

תכנית מורחבת למדעים מדויקים פיסיקה-כימיה.

המכון לכימיה באוניברסיטה העברית בירושלים נוסד כראשון מסוגו בארץ עם ייסודה של האוניברסיטה ב-1925. היוזם והרוח החיה בהקמתו של המכון לכימיה היה ד"ר חיים ויצמן, נשיאה הראשון של מדינת ישראל.

המכון לכימיה היה הראשון שהוקם באוניברסיטה מבין המדעים ונוסד, להדגשת חשיבות המדע בכלל והכימיה בפרט, ביחד עם המכון ליהדות. לאחר דינאים רבים על אופיו וצורת עבודתו של המכון בתחילת דרכו, הוחלט להדגיש את המחקר ברמתו הגבוהה ביותר ורק על בסיס זה לפתח בהמשך את תחום ההוראה. המקום בפועל של המכון לכימיה היה פרופסור אנדור פדור עזר בשנת 1924, כשנה לפני הקמתה הרשמית של האוניברסיטה העברית. בהמשך הוקמו בהדרגה מסגרות ספציפיות כגון המחלקה לכימיה אורגנית, ע"י פרופ' משה ויצמן ב-1927 ובאותה שנה הוקמה גם המחלקה לכימיה אי-אורגנית ע"י פרופ' מרדכי מכס בובטלסקי. ב-1935, עם הצטרפותו לאוניברסיטה של המדען הנודע לזיסלאב פרקש, נוסדה המחלקה לכימיה פיסיקלית.

בין מייסדי כיווני המחקר השונים שהתפתחו בשנות העשרים והשלושים של המאה הקודמת, על בסיס מחלקות המחקר שהוקמו, היו שמות מפורסמים בכימיה של ארץ ישראל ומדינת ישראל עם הקמתה והכרזת עצמאותה ב-1948. ביניהם ניתן למנות את פרופ' פרנקל ופרופ' א.ד. כרגמן בכימיה אורגנית, פרופ' גאבור שטיין בכימיה פיסיקלית, פרופ' קירזון ופרופ' גלזר בכימיה אי-אורגנית. תלמידיהם, נכדיהם וניניהם המדעיים ייסדו בעבר ומהווים גם כיום את עמוד השדרה של הכימיה לסוגיה באקדמיה ובתעשייה של מדינת ישראל.

המכון לכימיה כולל היום 40 חברי סגל אקדמי מתחת גיל פרישה, תוך מגמה ברורה של החלפת משמרות בין דור הותיקים לצעירים, התופסים את מקומם במרץ בעמדות ההוראה והמחקר.

כבית הספר הראשון והעיקרי להכשרת כימאים לתואר בוגר בארץ, מריץ המכון לכימיה כ-200 תלמידים לתואר ראשון, במהלך 3 שנות הבוגר, בממוצע כ-65 סטודנטים למחזור (המספר גדול יותר בשנה הראשונה, וקטן לקראת סיום השנה השלישית). למספר זה מצטרפים כ-150 סטודנטים לתואר שני (60) ושלישי (90). תלמידים אלה מהווים את שלד המחקר המתקדם במעבדות החוקרים וכן את עמוד התווך בהוראה, בתרגול פרונטאלי וכן

במעבדות לתלמידי הכימיה ובהוראת הכימיה למשניים (תלמידי ביולוגיה, רפואה, רפואת שיניים, רוקחות וכו').

המחקר במכון לכימיה מגוון ומקיף את רוב תחומי הכימיה המודרנית. באופן כללי ניתן לחלק את המאמץ המחקרי בין כיוונים סינתטיים אורגניים ואי-אורגניים ולאחרונה יותר ויותר בממשק שבין שתי דיסציפלינות אלה, וכן מחקר תכונותיו הפיסיקליות והפוטופיסיקליות של החומר.

לכיווני המחקר הכלליים הנ"ל מצטרפת קבוצת חוקרים בולטת בעלת יוקרה בינלאומית העוסקת בפן התיאורטי של תופעות ותכונות החומר.

ניתן להבחין בנטייה הדרגתית וברורה לעבר מזעור החומר המעובה לתחום הנומטרי וחקר תכונות הנובעות ממימדיו ומשתנות עמו. מאידך, מחקר שהתמקד בעבר במולקולות קטנות משתנה לכיוון מולקולות מרובות אטומים, כגון פולימרים, שכבות מונומולקולריות ואף מערכות מולקולריות גדולות מאד הקשורות למדיום הביולוגי, כגון DNA, חלבונים ועוד.

בנוסף למחלקות הקלאסיות, מתבצע מחקר תחת מסגרות נוספות המאגדות בתוכן קבוצות ממחלקות שונות, בהתאם לתחומי המחקר. מרכזי מחקר אלה, ממומנים באופן שווה ע"י קרן מינרבה בגרמניה וע"י האוניברסיטה העברית.

שלשה מרכזי מינרבה הוקמו במכון לכימיה:

הראשון שבהם הוקם בשנת 1978 כראשון מסוגו באוניברסיטה העברית למחקר תיאורטי בדינמיקה מולקולרית ונקרא ע"י פרופ' פריץ הבר בראשו עומד כיום פרופ' אבינועם בן-שואל.

המרכז השני הוקם ב-1991 ומשלב חוקרים ממחלקות שונות העוסקים בתחום הניסיוני של הפוטוכימיה, ונקרא ע"י פרופ' לאדיסלב פרקש כמרכז לתהליכים מושרי אור. מנהלו כיום פרופ' סנדי רוכמן.

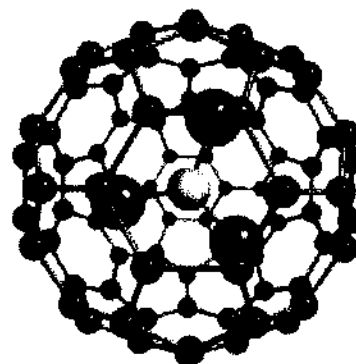
השלישי הוקם ב-1996 ע"י ליוה מייטנר למחקר בתחום הכימיה הקואנטית החישובית, ואותו מנהל פרופ' שרון צחייה. מרכז זה משותף לאוניברסיטה העברית ולטכניון.

ההקדמה והרקע על המכון לכימיה הם העתק של הקטע שנכתב בגליון הקודם "כימיה בישראל", מס' 8, דצמבר 2001.

המשך סיכום קצר, חלקי בלבד, של כיווני המחקר המתבצעים כיום במכון לכימיה, יוצג כאן ע"י תאור פעילות המדעית של מספר קבוצות מחקר.

במעבדתה של חוה ליפשיץ מתבצע מחקר הקשור לכימיה של יונים בפאזה הגזית, תוך שימוש נרחב ומקיף בטכנולוגיה מס-ספקטרומטרית. חוה ליפשיץ היא ללא ספק המובילה וברת הסמכא בארץ בתחום זה, אשר בו נחקרו במשך השנים תכונותיהם והריאקציות של משפחות יונים שונות. בין הבולטים

בנושאים שנחקרו בשנים האחרונות ניתן למצוא את הכימיה של צברי פחמן יוניים, המעניינים שבהם הם ממשפחת הפולרנים (ציור מס' 1). נמצאו יוני  $C_{60}^{+}$  ו- $C_{70}^{+}$  הכוללים בתוכם אטומים של גזאים אצילים, בודדים (He, Ne) ואף בזוגות ( $Ne_2$ ,  $He_2$ ). נחקרו אנרגיית הפירוק ומנגנון הפרגמנטציה של צברים יציבים אלה תוך נסיון לכמת את האנרגיה לאבדן קבוצות  $C_2$ . במקביל נחקרים היציבות והמבנה של יונים אורגאניים שונים כמו נפתלן/אזולן, ולאחרונה גם חומצות אמיניות במטרה להבין את אבני היסוד במערכות ביולוגיות. מחקרים אלה משולבים בשנים האחרונות באופן הדוק עם חישובים קוואנטים אשר מטרתם פיענוח שלבי ביניים ומבנה שלב המעבר בריאקציות השונות.



$Sc_3N@C_{80}$

ציור מס' 1: פולרן אנדוהדראלי -  $C_{80}$  הכולל "מולקולה" 4 אטומים,  $Sc_3N$ .

נעם אגמון חוקר עם קבוצתו את המוביליות של פרוטון מזה מספר שנים והציג לאחרונה מודל חדש המבוסס על ניתוק קשרי מימן בשכבת המים השניה. באופן דומה נחקרה המוביליות של יון הידרוכסיד, גם מנגנון התנועה של יון זה נובע מניתוק קשר מימני בשכבת השניה. מהמודל שהוצע ניתן להבין מדוע אנרגיית האקטיבציה לתנועה של הידרוכסיד גבוהה ב-0.5 Kcal/mol מזו של הפרוטון. העברת פרוטון שמקורו במצב מעורר מולקולרי נחקר גם כן, בשיתוף עם קבוצתו הניסיונית של דני הופרט מאוניברסיטת תל-אביב. כפונקציה של ריכוז המגיבים, ניתן היה לפענח את הקינטיקה מסוג חומצה-בסיס, על סמך מודל Smoluchowski לריאקציות נשלטות דיפוזיה בנזרות אינטראקציה רב-גופית. תלות הקינטיקה בצמיגות הממס נצפתה היטב ע"י מודל זה, לראשונה במסגרת ריאקציה כימית בימולקולרית. המחקר בקבוצתו של צבי רפפורט מתמקד בהבנת מהלכים

סינתטיים סביב קשר כפול בין פחמנים. לאורך השנים נחקרו התמרות נוקליאוטיליות בקשרים כפולים, מבנה ופעילות של אנולים יציבים וקטיונים ויניליים. נחקרו חומרי ביניים הקשורים בריאקציות אלה ופוענחו מנגנוני ריאקציה מורכבים. תוך שימוש בכלי מחקר קינטיים, מתחום הכימיה האורגנית הפיסיקלית, תחום שהוקם ונבנה בארץ ע"י פרופ' רפפורט ומשמש את תלמידיו באקדמיה ובתעשייה עד היום, ניתן לחלץ אינפורמציה מדויקת על שלבי ביניים שקיומם לא ניתן לתצפית ישירה, אך נובעים בהכרח מהתפלגות תוצרים. תוך שיתוף פעולה הדוק עם פרופ' אפוליו מהטכניון, משולבים מחקרים אלה בחישובים קוואנטיים להערכת מסלולי האנרגיה והמבנה של מצבי המעבר.

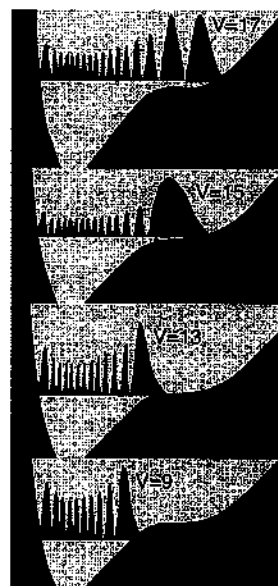
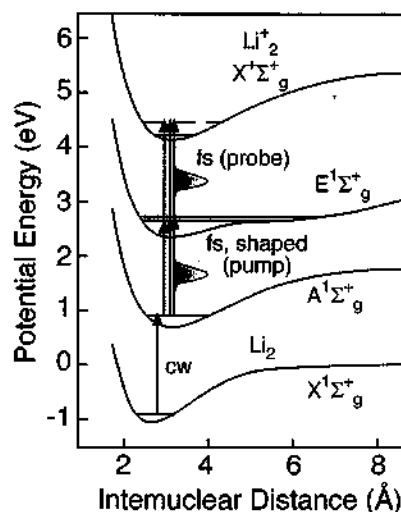
בנוסף יש לציין את עבודת החיים הייחודית של פרופ' רפפורט בשני תחומים: הראשון קשור באוסף הכרכים "Functional groups in Chemistry", אותו הפעיל ביחד עם יוזם המפעל פרופ' שאול פטאי ז"ל, ומאז פטירתו מנהל אותו בעצמו. התחום השני ייחודי לחלוטין לפרופ' רפפורט וקשור לאיסוף המקיף והמחקר הקשור בבולים העוסקים בכימיה. עבודה זאת זכתה לאחרונה להכרה במסגרת פוסטר נפלא שיצא ע"י החברה הישראלית לכימיה והופץ בין חבריה.

במחקריו התיאורטיים של רוני קוזלוב בולט היישום של מכניקת הקוואנטים לאיפיון והבנת הדינמיקה של תהליכים כימיים. שליטה על פאזה (Coherent Control) הודגמה ככלי יעיל להכוונה של ריאקציות פשוטות במצבים מעוררים של מולקולות. תוך שליטה ובקרה על אורכו ובמיוחד צורתו של פולס לייזר מעורר בתחום הפמטושניות, הודגמה יכולת לנתב את המהלכים המולקולריים במצבים מעוררים, כך שתוצרי הערוך, המרכיבים הוירציוניים והאלקטרוניים וכן תוצרי הפירוק המולקולרי יהיו ברי שליטה. הדגמה לכך ניתנה, במחקר משותף עם סנדי רוכמן, במערכת מודל של  $I_3^-$  בתמיסות עם ממסים בעלי תכונות פיסיקליות שונות.

באופן דומה נחקר תהליך אובדן הגדרת הפאזה (Dephasing) גם במערכות מולקולריות גאזיות, כגון  $Li_2$ , ולאחר ערוך מבוקר בפולסים קצרים. השליטה בקצב אובדן הפאזה, נעשה תוך תכנון ושינוי צורת פולס הלייזר בזמן, בעצמה ובמרחב הפאזה. תהליכי הרלקסציה נגרמים כתוצאה מהתנגשויות בפאזה הגאזית, כמודל דעיכה (Poisson) השונה מזה האופייני בתמיסות (Gaussian). במחקר זה נעשה שימוש בחישובים קוואנטיים לאפיון משטחי הפוטנציאל המולקולריים ולאפיון דינמיקת תהליכי פוטיוניציצה שנחקרו (ציור מס' 2).

תהליכי אולטרא-קירור של אטומים באמצעות קרינת לייזר כמדיום חדש להבנת אינטראקציות חלשות וארוכות טווח בין אטומים/מולקולות הוא תחום עיסוק מרכזי בקבוצתו של רוני

## The excitation scheme and a few vibrational levels



ציור מס' 2: רמות אנרגיה אלקטרוניות של  $\text{Li}_2$  המשמשות כבסיס לחישוב קואנטי.

לגבש מולקולות ענק ממשפחת הפרוטאזות-אבץ ודומיהן ולאפיין את המבנה התלת ממדי שלהן, לאחר פיענוח דיפרקצית קרני X. בין השאר בוצעו ניסיונות גיבוש בתנאים ללא כח כבידה, על פני מעברת חלל, בשיתוף עם NASA. מדידות דיפרקצית קרני X נעשות במרכזי סינכרוטרון ברחבי העולם, כמו זה ב - Brookhaven או ב - Grenoble, כשהאנאליזה



ציור מס' 3: מבנה תלת ממדי של האנזים SGAP (אמינו-פפטידאז שמקורו בבקטריה *S. griseus*). האתר הפעיל כולל שני אטומי אבץ המקושרים לחמש חומצות אמיניות של האנזים.

קוזלוב בשנים האחרונות. תכנון מבנה הפולס בתחום הפמטושניות ושליטה בפאזה, נחקרים בכל הקשור בשליטה על קירור ויברציוני ורוטציוני במולקולות דואטומיות, כאמצעי להשגת קירור מולקולרי אפקטיבי בדומה להישגים באטומים. קירור מולקולרי בתהליך פוטו-אסוציאציה הודגם ב- $\text{Cs}_2$ . במסגרת זאת נחקרו תכונות הפיזור של שדה קרינה ממולקולות ה- $\text{Cs}_2$  במצבן הטריפלטי, כמקור אפשרי לקירור המולקולות וליצירתם של מערכים מסוג Bose Einstein Condensates. אינטריאקציות ספציפיות בין צמדים של מצבים אלקטרוניים מעוררים וצימודים בעזרת קרינה אלקטרומגנטית נחקרו למטרה זאת.

נושאים נוספים נחקרים בקבוצתו של רוני קוזלוב, כגון: דינמיקת פירוק לא-אדיאבאטית ופוטודיסוציאציה על משטחים ותרמודינמיקה בזמן סופי. יש לציין במיוחד העיסוק בפיתוח טכניקות הוראה מתקדמות בעיקר במסגרות סביב מכניקת הקוואנטים וקשר כימי, תוך שימוש מרכזי בגראפיקה ממוחשבת. מחקר זה נעשה בשיתוף עם גיא אשכנזי.

גיל שוהם מייצג במחקרו את הממשק כימיה-ביולוגיה. תוך פיתוח שיטות מעבדתיות מגוונות, מופנה עיקר המאמץ בקבוצתו של גיל שוהם לפענוח מבנה של חלבונים ככלל ואנזימים בעלי מרכז יוני-מתכתי בעיקר. במחקר מסוג זה, האמנות מתמקדת ביכולת

נעשית בירושלים. לאחר פיענוח מבנה האתר הפעיל באנזים, נחקרת הקורלציה בין מבנה לפעילות ביולוגית, למשל, במערכות מסוג אמינו-פפטידאז עם שני אטומי אבץ (ציור מסי 3). ברבות השנים נבחנו ההשפעות של תנאים קיצוניים של pH, וטמפרטורה על יציבות מחד ושינויי מבנה באנזימים ואח"כ נבדקה הקורלציה עם אבדן או שינוי הפעילות הביולוגית.

מחקר תיאורטי המיישם שיטות מעולם הכימיה הקואנטית, מתבצע בקבוצתו של ששון צחיק בהיקף נרחב ותוך שיתופי פעולה חבקי עולם. הפעילות בקבוצה מתחלקת לפיתוח שיטות חישוב והרחבת יישומים במסגרת חשבונות DFT. במסגרת זאת פותחה שיטה המוגדרת כ-

"Restricted open shell ensemble-referenced Kohn-Sham method"

או בקיצור REKS. שיטה זאת מאפשרת חישוב מצבי אנרגיה ומבנה של רדיקלים, די-רדיקלים ואף טרי-רדיקלים והוכח דיוקא עד כדי 0.1eV ביחס לשיטות DFT המקובלות עד כה.

בנוסף, הורחבה ושופרה שיטה המשלבת Valence Bond עם DFT (VBDF). עיקרי החידוש בשיטה בכך שמתאפשר חישוב מבנה ואנרגיה של מצבים מולקולריים מעוררים.

בין היישומים השונים לשיטות הקואנטיות ניתן לציין השימוש בשיטות VB על מנת להגדיר ולאפיין מצבי קשר כימי ייחודיים. כך הודגם לראשונה המושג "הסטת מטען" כמרכיב חשוב בקשר כימי, תוך מהלכה של ריאקציה כימית. כמו-כן הודגם קיומו וחשיבותו של קשר כימי ללא צימוד אלקטרוניים "no-pair bonding", בצברים מתכתיים מסוג  $Li_{12}$  ודומיהם. גם כאן חושבו האנרגיה והמבנה של הצברים בדיוק רב. במסגרת המחקרים העוסקים במצבי מעבר והקשר שלהם לראקטיביות כימית נעשה שימוש בטכניקות DFT ואורביטאלות מולקולריות (MO). כאן מוקד המחקר בפעילות של ציטוכרום P450 בהידרוכסילציה ואפוקסידציה. החשיבות של המתכת המרכזית ואנאלוגים שלה נחקרו. תהליכים נוספים שנחקרו, כללו הבנת האינטריות היחסית של חמצן מולקולרי ביחס לתרכובות אורגאניות, ניתוח ריאקציות העברת פרוטון, ריאקציות "ניתוק" של מימן ועוד.

בקבוצתו הצעירה של רועי בר, נעשה מאמץ תיאורטי בכיוון של שיפור שיטות החישוב ופיתוח אלגוריתמים במסגרת הכימיה הקואנטית. בכיוון אחד פותחו כלים לחישובי DFT תלויים בזמן ובזמן אמת כדי לטפל במצבים אלקטרוניים שאינם מצב יסוד. מאחר והשיטה איננה מוגבלת ל"הפרעות" קטנות, ניתן לחשב בעיקרון ערויים של 2 אלקטרוניים בו-זמנית. השיטה הודגמה

ל- $N_2$  ו- $Al_2$ . חישובים חדשים ממשפחת "מונטה-קארלו הקואנטי", גם הם מאפשרים טיפול במצבים מעוררים ונעשים על גבי צבר של 104 מחשבי PC. הכלים החדשים שפותחו מאפשרים טיפול במערכות בהן הצימוד האלקטרוני חזק, כפי שצפוי במערכים דו-ממדיים מסוג Hubbard Lattice, השונים מהותית ממערכות מולקולריות פשוטות בהן הצימוד האלקטרוני חלש. השיטות אפשרו הגדלה ניכרת של יכולת החישוב על למערכים בממדים של  $16 \times 16$  יחידות תא עם מעל 200 אלקטרונים. מחקר זה נעשה בשיתוף עם דני ניהאוזר מ-UCLA, ומפותחים בו כלים חדשים להשגת התכנסות החישוב תחת "Linear scaling", אמצעי הכרחי לאפשר טיפול במערכות גדולות. בין שאר היישומים, נעשה מאמץ לטפל במערכות המצויות בחזית המחקר הנסיוני וקשורות ל"צינורות פחמן" ממשפחת הפולרנים. כאן נבדקת השפעתן של מולקולות מעטפת דיאלקטריות על התכונות האלקטרוניות של צינורות הפחמן. הכלים שפותחו משמשים גם להבנה בסיסית של הולכה במערכות מאקרו-מולקולריות.



**מיכה אשר**

ראש המכון לכימיה באוניברסיטה העברית. נולד ב-1949 בקיבוץ שדה נחמיה שבגליל העליון. את הדוקטוראט בכימיה פיסיקלית קיבל מהאוניברסיטה העברית בהדרכתו של פרופ' יהודה האז. השתלם באוניברסיטת קליפורניה בברקלי אצל פרופ' סומורגאי ולמד שם את יסודות מדע פני השטח. הצטרף ב-1984 לסגל המרצים במכון לכימיה, וב-1997 קיבל דרגת פרופסור מן המניין. החל מ-2001 משמש כראש המכון לכימיה.

בעבודותיו מיישם שיטות פוטו-אלקטרוניות ואופטיות לא ליניאריות למעקב אחר תופעות שטח שונות על פני משטחים מוגדרים היטב, להבנת דינמיקת התנגשויות עם משטחים ותהליכים ראשוניים בקטליזה הטרוגנית.



## The 67th Annual Meeting of the Israel Chemical Society

January 29-30, 2002  
Renaissance Hotel, Jerusalem

### Organizing Committee:

**Haim Levanon**, Chairman, Noam Agmon, David Avnir, Alexander Berg, Avi Bino, Yoel Sasson, Hebrew University, Aharon Gedanken, Bar-Ilan University, Daniel Huppert, Tel-Aviv University, Ehud Keinan, Technion.

### Opening Session

Haim Levanon, Chairman  
Ehud Olmert, Mayor of Jerusalem  
Arnon Shani, President, Israel Chemical Society  
Hillel Berkovier, Vice President, R&D, Hebrew University of Jerusalem

### Plenary Lectures

Fifty Years of Dynamic NMR  
**Zeev Luz**, Weizmann Institute of Science

Elementary Steps of Metal-Mediated Hydrocarbon Activation as Studied by Mass Spectrometry and Computational Chemistry

**Helmut Schwarz**  
Technical University Berlin, Germany

Impulsive Coherent Control  
**Ronnie Kosloff**, The Hebrew University of Jerusalem

Fast Aerosol Analysis by Lasers and Spectroscopy  
**Israel Schechter**, Technion

Achieving an Independent Economy in Israel  
**Stef Wertheimer**, ISCAR, Ltd.

## Parallel Sessions and Keynote Lectures

### Session I - Chemical Education

**Session II - Chemistry in Hi-Tech**  
The Chemical Challenges in the Semiconductor Industry  
**Oren Reiss**, Intel

**Session III - Nanochemistry**  
Photoinduced Charge Separation in Molecular-Metal Nanoassemblies  
**Prashant V. Kamat**, University of Notre Dame, USA

**Session IV - Novel Synthetic Methods**  
Stereoselective Synthesis of 5- and 6-Membered Carbocycles and Heterocycles via Reactions of Sulfonyl Carbanions  
**Alfred Hassner**, Bar-Ilan University

**Session V - Analytical Approaches in Biomedicine**  
The Statistical Chemistry of Biological Stereospecific Recognition  
**Doron Lancet**, Weizmann Institute of Science

**Session VI - Interfaces and Friction**  
Dynamics Near an Interface in the Strong Absorption Limit  
**Pierre Levitz**  
PMC-CNRS, Ecole Polytechnique, France

**Session VII - Industrial Start-Ups**  
The Interface between the Biotechnology Industry and the Pharmaceutical Industry in the Genomic Era  
**Yigal Koltin**, Millenium Pharmaceuticals

**Session VIII - Molecular Opto-Electronics**  
Injection at Molecular Interfaces: Some Mechanistic Aspects  
**Mark A. Ratner**, Northwestern University, USA

**Session IX - Stereochemistry and Asymmetric Synthesis**

Stereochemistry at the Interface between Crystals and Biology

**Lia Addadi**, Weizmann Institute of Science

**Session X - Enzymes and Proteins**

*This session is dedicated to the memory of Prof. Shmaryahu Blumberg from Tel Aviv University*  
Elucidation of the Catalytic Mechanism of Glycoside Hydrolases through Functional Studies and High Resolution Structures

**Yuval Shoham**, Technion

**Session XI - Quantum Chemistry**

From Electronic Structure to Electron Dynamics:  
A Unified Approach for Studying Molecular Devices  
**Daniel Neuhauser**, UCLA, USA

**Session XII - Colloid Chemistry**

Direct Imaging of DNA-Lipid Complexes  
**Yeshayahu Talmon**, Technion

**Session XIII - Electron and Proton Transfer**

Directly Mapping the Relationship between Molecular Structure and Electronic Coupling in Artificial Photosynthetic Systems  
**Michael R. Wasielewski**  
Northwestern University, USA

**Session XIV - Gas-Phase Reactions**

Some Recent Aspects of Unimolecular Gas Phase Ion Chemistry  
**Chava Lifshitz**, The Hebrew University of Jerusalem

**Session XV - Analytical Chemistry**

A Novel Fluorogenic Reagent for Amino Acids:  
Indanedione Detects More Fingerprints on Documents  
**Joseph Almog**, The Hebrew University of Jerusalem

**Session XVI - Medicinal Chemistry**

The Importance of Being an Endocannabinoid  
**Raphael Mechoulam**  
The Hebrew University of Jerusalem

**Session XVII - Molecular Dynamics**

Recent Interpretation of Cold Atom Experiments: Is Chaos Assisting Tunneling?  
**Nimrod Moiseyev**, Technion

**Session XVIII - Environmental Chemistry**

**Session XIX - Magnetic Resonance**

Quantum Beats as Probes of the Primary Events of Photosynthesis  
**Gerd Kothe**, University of Freiburg, Germany

**Session XX - Biophysics of Single Molecules**

Single Molecule Nanoscale Rulers  
**Shimon Weiss**, UCLA, USA

**Session XXI - Bioinorganic Chemistry**

Functional Cofactor States in Photosystem I of Photosynthesis. Comparison of Different Protein-Cofactor Environments  
**Dietmar Stehlik**, Freie Universitat Berlin, Germany

For the full program and abstracts link to:  
<http://www.weizmann.ac.il/ICS/chemistry67>

# הענקת פרסי החברה בכינוס השנתי

## פרס החברה הישראלית לכימיה לשנת תשס"א לפרופ' עוזי אבן



**פרופ' עוזי אבן** הנו אחד מהמדענים המובילים בבית הספר לכימיה של אוניברסיטת תל-אביב, בשטח הפיזיקה הכימית הניסיונית. הוא השלים את עבודת הדוקטור שלו בהדרכתו של פרופ' יהושע יורטר מאוניברסיטת תל-אביב. עוזי אבן הנו מנהיג בשטחי

הספקטרוסקופיה והדינמיקה של אלומות מולקולריות. הוא פיתח מבשור ניסיוני חשוב ביותר בשטחים אלה, והישגו הבולט במיוחד בפיתוח זה היה שסתום פועם אשר בעזרתו הוא קירר מולקולות גדולות כגון אנתרצן, טטרצן ואף טורה-בנופירין המכיל אבץ. לראשונה ניתן היה לחקור את הספקטרוסקופיה של מולקולות מבודדות, מקוררות יתר. אחת התוצאות החשובות של עבודה זו היתה הקטנת משרעת התנודות המולקולריות וגילוי עלית זמן החיים של הפלואורסצנציה של פחמימנים ארומטיים פונקציונליים אשר באה בעקבות הקטנה זו. מאוחר יותר עוזי אבן מדד את זמני החיים של מצבי רידברג. מדידות אלה היו

## פרס החברה הישראלית לכימיה לשנת תשס"א לפרופ' איתמר וילנר



**פרופ' איתמר וילנר** הוא פרופסור לכימיה אורגנית באוניברסיטה העברית בירושלים, אשר פרץ לתחומי מחקר חדשניים. את עבודת הדוקטור שלו בצע בהדרכת פרופ' מרדכי רבינוביץ מאוניברסיטה העברית. את השתלמותו הבתר-

דוקטוריאלי עשה במחיצת חתן פרס נובל, פרופ' מליון קלווין, מאוניברסיטת ברקלי בקליפורניה, ארצות הברית. עם הצטרפותו למחלקה לכימיה אורגנית של האוניברסיטה העברית הוא החל בפיתוח רעיונות חדשים בכימיה הסופרא-מולקולרית, שהובילו אותו לפיתוח תחום מדעי מודרני הידוע כיום כ"מדע המשטחים האורגניים" (Organic Surface Science).

בעלות חשיבות מכרעת להבנת התיאוריה של דעיכת מצבים אלה וזכו לעניין והוקרה רבים בקרב הקהילה המדעית. היישומים החכמים של ספקטרוסקופית אלומות מולקולריות למחקר צברים והתנגשויותיהם עם משטחים, המהווים חלק נכבד מעבודותיו של עוזי אבן, הם דוגמה נוספת של מחקר ניסיוני מעולה של בעיות יסוד בכימיה בעזרת הכלים החדשים שהוא יצר.

המצאת תהליכים והתקנים חדשים ניכרת בכל שלבי עבודתו המדעית. נזכיר כאן רק שתיים מהמצאותיו: (א) - מקור סילון על-קולי המאפשר קירור מולקולות גדולות לטמפרטורות נמוכות ממעלה אחת, בקנה מידה אבסולוטי, (וב) - תכנון חדשני של ספקטרומטר מסות הפועל על עיקרון זמן מעוף, המצטיין ברגישות גבוהה. המצאות אלה תומכות כמובן בנושאי עבודתו העיקריים של עוזי אבן אולם הן חשובות ביותר בזכות עצמן.

עוזי אבן, פיזיקאי לפי השכלתו, מעמיד את כישוריו המעולים כניסיונאי לשרות הכימיה, הוא מפיך במחקריו מידע כימי חשוב וראוי לציון, ומביא כבוד רב לעצמו ולבית הספר לכימיה, בתכנון וביצוע של ניסיונותיו המתוחכמים המצטיינים גם במשמעות כימית עמוקה.

לאור האמור לעיל, נמצא פרופ' עוזי אבן ראוי לקבלת הפרס של החברה הישראלית לכימיה לשנת תשס"א.

סיפור "מדע המשטחים האורגניים" הוא אחד מסיפורי ההצלחה המרשימים ביותר של המדעים המולקולריים ב-15 השנים האחרונות. בתקופה שקדמה לה, הדגש במחקר במדעי השטחים היה מוטה כלפי הפיזיקה הכימית, ונושאי המחקר שלה הוו גבישי מתכת מבודדים. דגש זה עבר מהפך בזמן האחרון הודות לתגליות בתחום ההתקשרות העצמית של משטחים חד מולקולריים (Self-assembled monolayers), וכמו כן במערך התבניתי לקידום הביוטכנולוגיה (Patterned arrays for biotechnology) ובשטח הפנים של התא. החי. בחוכמה רבה הצליח פרופ' וילנר לשלב את מדע המשטחים עם נושאים כימיים-אורגניים מסוימים, עם הכרה מולקולרית, ועם אנזימולוגיה וביואלקטרוכימיה.

בשלב די מוקדם הצליח פרופ' וילנר לזהות את הפוטנציאל הגדול הגלום במשטחים האורגניים החדשים כחיישנים למטרות הכרה ביולוגית, ביואלקטרוניקה וביואנליטיקה, שהם מחוזות פיתוח חדשים ומרתקים.

לאור האמור לעיל, נמצא פרופ' איתמר וילנר ראוי לקבלת הפרס של החברה הישראלית לכימיה לשנת תשס"א.

Laser Induced Thin Metal Plates Acceleration  
Yehuda Haas and **Semion Cogan**  
Dept. of Physical Chemistry, The Hebrew University.

### פרסים לתלמידי מחקר מצטיינים באוניברסיטאות

#### האוניברסיטה העברית בירושלים

פרס לוי-יורטנר מוענק למר **פרננדו פטולסקי** על עבודתו בנושא: "שידור אלקטרוני של אינטראקציות הכרה ביולוגית והבנת ננו-מעגלים כבסיס להכנת התקנים ביולקטרוניים", בהנחיית פרופ' איתמר וילנר.

#### אוניברסיטת תל-אביב

פרס לוי-יורטנר מוענק לגב' **יעל דיסקין-פוזנר** על עבודתה בנושא: "קריסטלוגרפיה וכימיה של מערכות סופרה-מולקולריות", בהנחיית פרופ' ישראל גולדברג.

#### אוניברסיטת בר-אילן

הפרס מוענק למר **ישי דיאמנט** על עבודתו בנושא: "ייצור ואפיון אלקטרוכימי של מוליכים למחצה אורגניים לצורך תאים סולריים", בהנחיית ד"ר אריה צבן.

#### אוניברסיטת בן-גוריון בנגב

פרס אורצין מוענק למר **ויאן מה** על עבודתו בנושא: "מדדת הסינכרוניזציה של תנועות הציליות (cilia), מהירות העברתן ותנועתן", בהנחיית פרופ' צבי פריאל.

#### מכון ויצמן למדע

הפרס מוענק לגב' **דפנה פרנקל-קריספין** על עבודתה בנושא: "חקר קומפלקסים של חומצות גרעין וחלבונים באמצעות שיטות מיקרוסקופיה אלקטרונית מתקדמות", בהנחיית פרופ' אבי מינסקי.

#### The Lise-Meitner prize

was awarded to **Dr. Shahar Keinan** for her paper with Prof. David Avnir from the Hebrew University, entitled, "Continuous Symmetry Analysis of Tetrahedral/Planar Distortion. Copper Chloride and other A4B Species". Dr Keinan has applied successfully the novel concepts of continuous symmetry and continuous chirality practically all across chemistry: in optics, biochemistry, photochemistry, crystallography and in structural aspects of inorganic complexes.

### פרס המדען הצעיר המצטיין של החברה הישראלית לכימיה לשנת תשס"א לפרופ' אורי בנן מהאוניברסיטה העברית, ולד"ר אריה צבן מאוניברסיטת בר-אילן.

השניים זוכים בפרס על תרומתם המרשימה בתחום הננו-טכנולוגיה המצוי כיום בחזית המדע וזוכה לתנופה ותשומת לב יוצאי דופן.

**פרופ' אורי בנן** מתמחה בפיתוח טכניקות סינתיות ואפיון התכונות האופטיות של חומרים בעלי גדלים מבוקרים בתחום הננו-מטר. עבודתו המשלבת יצירת חלקיקים קוואנטיים וחקר התכונות האופטיות שלהם בטכניקת ספקטרוסקופית המינהור, מהווה פריצת דרך בתחום זה.

**ד"ר צבי צבן** פיתח ננו-חלקיקים של מוליכים למחצה המשולבים בחומרי צבע אורגניים הבולעים בתחום הנראה. במחקריו מצא שאלקטרודות המורכבות מחומרים אלה מסוגלות להפוך אנרגיית אור לאנרגיה חשמלית בתא פוטו-וולטאי ביעילות גבוהה.

על הישגיהם המרשימים ותרומתם למחקר הכימי במדינת ישראל זוכים השניים בפרס המדען הצעיר לשנת תשס"א.

#### Poster Prizes

The identification of the acid-base catalytic residue of family 51 glycosidases: kinetic studies of alpha-arabinofuranosidase from *geobacillus stearothermophilus* t-6

**D. Shallom<sup>a</sup>**, V. Belakhov<sup>b</sup>, D. Solomon<sup>b</sup>, S. Gilead-Gropper<sup>a</sup>, T. Baasov<sup>b,c</sup>, G. Shoham<sup>d</sup> and Y. Shoham<sup>a,c</sup>

<sup>a</sup>Dept. of Food Engineering, <sup>b</sup>Dept. of Chemistry, and <sup>c</sup>Institute of Catalysis, Technion, <sup>d</sup>Dept. of Inorganic Chemistry, The Hebrew University.

Quinonostilbenes: a novel type of donor-acceptor systems

**Y. Sutovsky**, G. I. Likhtenshtein, and S. Bittner

Department of Chemistry, Ben-Gurion University.

Multiple emulsions stabilized with biopolymer hybrids for encapsulation and sustained release of food additives

**Axel Benichou**, Abraham Aserin and Nissim Garti  
Casali Institute, The Hebrew University.

### **The Paul J. Flory Award to Moshe Narkis from the Technion.**

The Paul J. Flory Polymer Research Prize sponsored by the Dow Chemical Company was divided ex aequo between two winners Ronald Koningsveld of Sittard, the Netherlands, and Moshe Narkis of the Technion - Israel.

The prize was awarded at the POLYCHAR-10 World Forum on Polymer Applications and Theory on January, 2002, at the University of North Texas.

**Prof. Moshe Narkis** of the Technion, received the prize for his seminal work leading to several kinds of new materials (crosslinked polyethylene pipes, polymeric marble). These include materials with electric conductivity, but low concentration of the conductive component, as reported in his lecture entitled "Encapsulation of Filler Particles by Metal or Organic Electrically Conductive Shells".

### **HTC Award to Aviv Amirav from Tel-Aviv University.**

**Aviv Amirav**, a Professor of Chemistry at Tel Aviv University, received on February 8, 2002, in Brugge Belgium, the HTC Award. This award was given to Prof. Amirav at the closing ceremony of the HTC-7 meeting on Hyphenated Techniques in Chromatography for "The Most Outstanding and Innovative Work in the Field of Hyphenated Chromatographic Techniques". Hyphenated techniques in chromatography such as gas chromatography and liquid chromatography are widely used in highly diversified number of areas such as chemistry, environmental analysis, industrial, food, biochemistry, drug design, medical diagnostics and other areas.

### **פרסי החברה הישראלית לכימיה לתמידי תיכון:**

**ברוריה רובין** מאולפנת בהרצין על עבודתה בנושא: "הפקה והשוואה של חומרים פוטודינמיים חדשים לטיפול בגידולים סרטניים". העבודה נעשתה במכון ויצמן בהנחייתו של פרופ' א. שרץ.

פרס על שם איטן פלד, שנתרם ע"י משפחת פלד לזכר בנם שנהרג ב-1995, בגיל 16 באסון פסטיבל ערד, מוענק **לדנה רונן** מהגמנסיה העברית "הרצליה" בתל-אביב, על עבודתה בנושא: "כיושר הדבקה בחומרים פולימריים: תכונה מהותית או לא?" העבודה נעשתה בהנחיית גבי מרים כרמי.

## **ארועים אחרים**

### **הכינוס השנתי ה-30 של האגודה הישראלית לפולימרים וכלסטיקה**

הכינוס נערך בדצמבר 2001, במלון דוד-אינטרקונטיננטל בתל-אביב. יו"ר הכינוס היה **משה גורן**.

הרצאת הפתיחה ניתנה ע"י **פרופ' זאב תדמור**, מהטכניון, מייסד האגודה, בנושא:

עיבוד פולימרים מדיסציפלינה הנדסית לפעילות רב תחומית.

אחריו ניתנו שלש הרצאות מליאה:

**Polymer bicontinuous microemulsions under shear**

**Timothy Lodge**, University of Minnesota, USA

**Factors affecting mechanisms and kinetics of agglomerate dispersions**

**Ica Manas-Zloczower**, Case Western Reserve University, USA

תעשיית הפלסטיקה - מצב נוכחי והתפתחויות לעתיד

**שמואל קניג**, שנקר - ביה"ס הגבוה להנדסה ועיצוב ומרכז הפלסטיקה והגומי לישראל.

אחר הצהרים התקיימו שלשה מושבים מקבילים בנושאים מגוונים.

אחד המושבים הוקדש לזכרו של משה שטראוסמן.

# THE HABER LIBRARY

## A Collection of the History and Philosophy of Science

Taken from an article by Miriam Gordon, formerly Reference Librarian at the Wix Central Library, The Weizmann Institute of Science, Rehovot.

The nucleus of the libraries of the Weizmann Institute was the private collection of Prof. Fritz Haber. The history of Fritz Haber is a symbol of the tragedy of the Jewish scientist, suffering from the conflict between his Jewishness and his German patriotism. Haber was the son of a prosperous chemical merchant. He entered his father's business but soon decided to turn to an academic career. His intensive early studies were in electrochemistry and thermodynamics and soon gained him the position of Professor of Physical Chemistry at the Technische Hochschule, Karlsruhe (1898). His most important work, which began in 1904, was the synthesis of ammonia from hydrogen and nitrogen. His laboratory demonstration interested Bosch, Bergius and the Badische Aniline and Sodafabrik companies, and they eventually developed the process into commercial production. Haber and Bosch were awarded the Nobel Prize in chemistry in 1918 "for the synthesis of ammonia from its elements". This work of Haber was, and still is, invaluable for the chemical industry worldwide. In 1911, at the age of 42, Haber was appointed Director of the Kaiser Wilhelm Institute for Physical Chemistry in Berlin. With the outbreak of World War I in 1914, motivated by his strong patriotism, he placed himself and his laboratory at the service of the government and played a major role in the development of poison gas as a weapon.

After the war Haber's Institute became the world's leading center of research in physical chemistry. Throughout his life he had been an advocate of close relations between science and industry. He was active in promoting the national organization of research and in fostering friendly relations with foreign scientists. The breakup of Haber's institute began in 1933 when, with the rise of the Nazi regime and its anti-Semitic policy, this great German chemist became "Haber the Jew". He was ordered to dismiss all the Jews from the staff of his Institute. He refused and resigned.

It was at that time that Haber met Chaim Weizmann, then already a distinguished scientist, and the President of the World Zionist Organization, who later became the first President of the State of Israel. Weizmann

devoted himself to the scientific, economic and industrial development of the Jewish community of Palestine. He believed that science could provide for the livelihood of as many Jewish immigrants as might decide to settle in Palestine. When in the 1930s fascism prevailed, Weizmann devoted himself to rescuing talented scientists from Nazi Germany and bringing them to Palestine. In the early 1930s he laid the foundations of the Daniel Sieff Research Institute in Rehovot, which later became the Weizmann Institute of Science. Prof. Haber and Prof. Willstatter advised and assisted Weizmann in designing and forming a plan of operation of the Institute. Weizmann invited Prof. Haber to Rehovot and offered him a position as Head of the Physical Chemistry Department of the new Institute. Haber accepted the invitation but unfortunately, on his way to the Institute he suffered a heart attack and died in Basle in January, 1934. After his death his family presented his private library to the Daniel Sieff Institute.

The importance of the collection is shown in Weizmann's letters from that time. He himself supervised and closely followed the transfer of the endowment from Germany to Rehovot and the building of a new Library. "Professor Fritz Haber has left us his library, and it is now installed at Rehovot. We had to erect a special small building for it, but we are now in possession of a unique collection of books, appropriately housed". The inauguration took place in January 1936. Today this unique collection is the core of the Collection of the History and Philosophy of Science in the Wix Library of the Weizmann Institute. The books from the bequest of Prof. Haber either have his signature, or are dedicated to him. According to the "Union List of Monographs in Israel" most of them are the only copies to be found in the country.

### Review of the collection:

In the following section, some representative examples of books in the History and Philosophy of Science collection of the Wix Library are listed. They comprise

only a small part of the collection's holdings, which contains approximately fourteen hundred titles. The range of subjects represented in the collection extends from general philosophy, philosophy of science, history of science, mathematics, physics, chemistry, earth sciences, to life sciences. All the examples cited are either the only copies or are the only copies of that particular early edition in Israel. The full list of publications of the History and Philosophy of Science collection is available at the Wix Library.

### **Some representative books from the Haber collection:**

#### **Arrhenius, Svante August**

Immunochemistry : the application of the principles of physical chemistry to the study of the biological antibodies. New York, Macmillan, 1907.

#### **Bunsen, Robert**

Gasometrische Methoden. Umgearb. verm. Aufl. Braunschweig, Vieweg, 1877.

*"Gasometric methods" became a classic, full of chemical, physical and mechanical instructions that elevated gas analysis to equal rank with gravimetric and titrimetric methods.*

#### **Haber, Fritz**

Grundriss der technischen Elektrochemie auf theoretischer Grundlage. Munchen, Oldenburg, 1898. *A pioneering work that had considerable influence on teaching and research. We have a review copy with blank pages, with Haber's handwritten corrections and remarks. Not only do we have the only copy in Israel, but also even in Germany only a few copies might exist, since most were probably burned together with the books of other Jewish authors.*

#### **Helmholz, Herman Ludwig Ferdinand von**

Wissenschaftliche Abhandlungen von Hermann Helmholtz. -- 3 volumes, Leipzig, Barth, 1882. *Helmholtz' collected scientific papers.*

#### **Le Chatelier, Henri**

Vom Kohlenstoff. Vorlesungen über die Grundlagen der reinen und angewandten Chemie. Aus dem französischen übersetzt von H. Barschall ; Vorwort von F. Haber. Halle, Knapp, 1913.

*The introduction of the German edition is written by Haber. There he emphasizes the role of education in turning the young generation's attention towards the industrial application of scientific results.*

#### **Lorentz, Hendrik Antoon**

Lehrbuch der Physik zum Gebrauche bei akademischen Vorlesungen. Bd. 1-2. Nach den vierten Aufl. aus dem holländischen übersetzt von G. Siebert. Leipzig : Barth, 1906. *Dedicated to Prof. Haber by the author.*

#### **Maxwell, James**

Theory of heat. London, Longmans, 1894.

*New edition with corrections and additions by Lord Rayleigh.*

#### **Musschenbroek, Petrus van**

Introductio ad philosophiam naturalem. 2 volumes. Lugdani Batavorum, S. et J. Luchtman, 1762. *Posthumous lecture notes. Widely used and translated into Dutch, English, French and German.*

#### **Nernst, Walther Hermann**

Theoretische Chemie vom Standpunkte der Avogadro'schen Regel und der Thermodynamik. Stuttgart, Enke 1913.

*Originally written as an introduction to O. Dammer's Handbuch der anorganischen Chemie, Stuttgart, 1892, which by 1926 has gone through 15 editions, including translation into English.*

#### **Ostwald, Wilhelm**

Elektrochemie, ihre Geschichte und Lehre. Leipzig, Veit, 1896

*His most important single work devoted to the history of science, a book of more than 1100 pages that exhibits Ostwald's complete command of the scientific literature*

*on electrochemistry and allied areas. It was, however, the only one of Ostwald's major books that was not published in a second edition, neither was it translated.*

**Planck, Max**

Grundriss der allgemeinen Thermochemie.

Breslau Trewendt, 1893.

*With a thirty-one-page historical introduction.*

**Poincare, Henri**

Die Maxwellsche Theorie und die Hertz'schen Schwingungen: Telegraphie ohne Draht. Aus dem französischen übersetzt von M. Ikle.

Leipzig, Barth, 1909.

**Schlenk, Wilhelm und Bergmann Ernst**

Ausführliches Lehrbuch der organischen Chemie.

Bd 1. Leipzig, Deuticke, 1932.

*This book contains a remarkable dedication expressing Schlenck's admiration for Haber not only as a colleague but also as a close friend.*

**Thomson, Sir Joseph John**

Conduction of electricity through gases. 2nd ed.

Cambridge University Press, 1906. *Described by Lord*

*Rayleigh as a summary of "the work of Thomson's great days at the Cavendish Laboratory".*

**Van't Hoff, Jacobus Henricus**

Zur Bildung der ozeanischen Salzbelagerung.

Braunschweig, Vieweg, 1905.

**Willstatter, Richard, und Arthur Stoll**

Untersuchungen über Chlorophyll.

Berlin, Springer, 1913.



**Bob Weintraub, Director of the Library, The Negev Academic College of Engineering, Beersheva.**  
e-mail: bob@nace.ac.il

Tin disease or tin pest is the name of the beta to alpha transition, Sn (beta, white metallic solid) = Sn (alpha, gray non-metallic solid)  $T = 13.2^{\circ}\text{C}$ .

Above  $13.2^{\circ}\text{C}$ , the ordinary white metallic form is stable. Below  $13.2^{\circ}\text{C}$ , powdery gray tin is the stable form. As the temperature is lowered through the transition temperature the white form generally remains in a metastable state. The existence of the metastable phase and the slow transition time allows tin to maintain its usefulness for many purposes. The chemistry of tin disease was worked out by Prof. Ernst Julius Cohen and his coworkers.

### Tin Disease

The transformation can be initiated or accelerated by seeding of white tin with the stable gray form. It can also be accelerated by the presence of certain solvents and traces of impurities, and by deformation or strain in the solid. In fact, in carrying out laboratory analyses and experiments, care must be taken to avoid contamination of the metastable phase by stable phase particles floating in the laboratory atmosphere. Because of its contagious nature, the transformation has come to be called *disease*. Because the transformation makes the metal useless, Cohen called it *pest*.

The transition temperature can be lowered and the velocity of the transformation slowed down by alloying tin with other metals or by the addition of impurities. As the specific volume of gray tin is about 25 per cent higher than that of white tin, a partial transition can be seen as the formation of *warts* on the white tin.

When white tin is dissolved in concentrated HCl, Sn(II) is formed. Under similar conditions, gray tin yields Sn (IV).

*Tin disease* is well known to the metal finishing industry. The Atotech catalog lists Tin Sol B, which is the same as Tin Sol A (water soluble concentrate of Stannic Oxide), except that it "contains Bismuth for the control of *Tin Pest*".

The disease is also well known in cold climates. One

illustration of this knowledge is that of the Sami Peoples of northern Scandinavia who traditionally embroider decoratively with tin thread to which silver has been added, enabling the thread to withstand the cold.

### Examples of Tin Disease

There are many reports of the transition from the white to the gray allotrope having taken place, some unexpectedly. Some of these are questioned by museum conservationists as to whether they are cases of real *tin disease* or rather due to ordinary corrosion of metallic tin or due to other causes. A few examples are given here.

Captain Robert Scott and his entire expedition to the South Pole perished in 1912. This tragedy has been attributed to an attack of *tin disease*. The kerosene for the return journey was stored in cans soldered with tin. The fuel escaped out of the cans resulting in the loss of all the lives to the Antarctic cold.

The tin buttons on the clothes of Napoleon's soldiers were attacked by tin disease and crumbled in the harsh Russian winter of 1812. Napoleon was unprepared for the Russian winter right down to the buttons.

Organ pipes made of tin in the old castle church at Reitz crumbled into gray powder during the winter of 1850, one of many such occurrences in cold northern European Cathedrals. Before the chemical explanation was available, this was sometimes attributed to the work of the devil.

Probable tin ingots from the oldest known shipwreck in the world at Ulu Burun, near Kas, Turkey, dating from the 14th century BC, were found completely transformed to tin oxide. Further analyses of other tin ingots from the Ulu Burun shipwreck are presently being carried out.

Recently, environmental and health concerns about lead have prompted renewed interest and investigations relating to lead free solders for use in the electronics industry. New data confirm existing knowledge that *tin pest* is a major hazard.

### Prof. Ernst Julius Cohen

Cohen was born in Amsterdam and studied chemistry under Svante Arrhenius at Stockholm, Henri Moissan at Paris, and Jacobus van't Hoff at Amsterdam. He became assistant to van't Hoff in 1893, and in 1902 he became Professor of Physical Chemistry at the University of Utrecht, a position that he held until his retirement in 1939. During that time he built up one of the world's great centers of physical chemical research and teaching.

Throughout his life, Cohen studied the allotropy of tin. Cohen's areas of research included polymorphism of both elements and compounds, photographic chemistry, electrochemistry, pizeochemistry, and the history of science. He published more than 400 papers and numerous books. His impressions of the United States based on his stay at Cornell University in 1926 were published in a book called "Impressions of the Land of Benjamin Franklin " (in Dutch) in 1928. Cohen was the first President of the Dutch Chemical Society and was President of the IUPAC.

In 1944, because he was a Jew, Prof. Cohen was arrested and sent to Westerbork, the concentration camp

for Dutch Jews destined for Auschwitz. The Germans murdered him in a gas chamber on or about March 5, 1944.

C.A. Browne (J. Chem. Ed., 1948) wrote of Cohen:

"He was a firm believer in the brotherhood of scientific men of all nations and, after the first World War, did his utmost to reestablish friendly relations between scientists of the recently hostile nations. This was recognized in the dedication to him in 1927 of the Cohen "Festband" of Volume 130 of the Zeitschrift für Physikalische Chemie," which is translated as follows:

*Dedicated by friends and pupils to Ernst Cohen, successful investigator, and tireless champion for the reestablishment of friendly relations between scientists of the peoples that were separated by war, on the twenty-fifth anniversary of his appointment as Professor at the University of Utrecht.*

It was with cruel irony of fate that the journal which honored Cohen with so deserving a tribute, was published in the country whose later policy of inhuman persecution was responsible for the death of this peace-loving man of science".

## פרופ' אברהם ורשבסקי

(1938-2001)

אברהם ורשבסקי נפטר ב- 12 בנובמבר, 2001. למשפחתו, חבריו הקרובים, תלמידיו ומספר רב של עמיתים למחקר בארץ ובח"ל היה מותו הבלתי-צפוי אירוע טראומטי. הוא נפטר במהלך שיא חדש של עבודה מדעית, בעיצומו של מימוש רעיונות מקוריים וחדשניים.

אברהם קיבל את התארים B.Sc., M.Sc. ו-D.Sc. בפקולטה לכימיה בטכניון בחיפה. את הקריירה המדעית העצמאית החל ב- 1969, בטכניון. שנה לאחר מכן עבר למכון הלאומי למטלורגיה (NIM) ביוהנסבורג, דרום-אפריקה. במהלך השנים 1970-1973, עבד שם בחזית הטכנולוגית של מחליפי יונים, ובמיוחד בהקשר למיצוי, הפרדה, וניקוי של אורניום ומתכות מקבוצת ה-Pt. למחלקה לכימיה אורגנית במכון ויצמן הצטרף אברהם ב- 1973 לאחר שפרופ' אברהם פצורניק, ראש המחלקה דאז, התרשם עמוקות מכישרויו ויכולתו הפוטנציאלית לתרום לפעילות בתחום הפולימרים הריאגנטים. ניסיונו הרב של אברהם ככימאי אורגני מוכשר, בצרף המוטיבציה הגבוהה והמקוריות הרבה בהן ניחן הביאוהו להישגים ניכרים, ולאז דווקא בתחום המטלורגיה, בו

המשיך לעסוק. הוא פיתח שיטות חדשניות ויעילות לאימפרגנציה של פולימרים ולמעשה לפריצת דרך בהכנת נשאים פולימריים חדשים ששמשו בריאקציות אצילציה והכנת פפטידים. עבודתו של אברהם הייתה מכוונת תמיד לעבר המדע היישומי. הוא חתר תמיד לשלב את המחקר הבסיסי במשמעויותיו המעשיות. הוא חש שעל המדען לחרוג מעבר למגדל השן האקדמי ולתרום למדינה ולחברה בה הוא חי ופועל. בהדרגה הוא סחף רבים מעמיתיו לחשוב ולפעול בדומה.

במקביל לפעילותו המדעית היה אברהם חיוס, הדוחף והמוציא לפועל של כנסים בינלאומיים חשובים בתחום הפולימרים הפעילים (Reactive Polymers) וביניהם הכנסים ה-3 וה-8 בנושא, שהתקיימו בישראל. לאחרונה היה הרוח החיה בהקמת החברה הישראלית לכימיה קומבינטורית ונבחר להיות נשיאה הראשון. אברהם ורשבסקי היה "אבא" לתלמידיו ולעמיתי בתר-דוקטורט שעבדו איתו. תמיד היה נכון לשמוע, מתוך רגישות בלתי-רגילה, ולעזור בכל יכולתו, ולא רק בהקשר לעבודה המדעית. כזה היה יחסו גם לחבריו. יהי זכרו ברוך.

## **Prof. Alfred Hassner**

### **Formerly the President of the Israel Chemical Society**

Alfred Hassner was born in 1930 in Czernowitz, Romania. He lost his father at age 13 but survived the holocaust in WWII. He immigrated to the USA where he received his B.Sc. and Ph.D. degrees at the University of Nebraska and was a postdoctoral fellow at Harvard University. He joined the faculty of the University of Colorado in 1957 and in 1975 he moved to the State University of New York at Binghamton with the rank of Leading Professor. In 1983 he moved to Israel as a Professor in the Chemistry Department of Bar-Ilan University.

With more than 300 research articles in print, Professor Hassner has had a major impact on chemical science. While studying condition-dependent free radical or ionic mechanisms in additions reactions to multiple bonds, Hassner first proposed the concept of regiochemistry and regioselectivity, now a universally used terminology in organic chemistry.

Prof. Hassner has been the recipient of numerous distinctions and awards for his contributions to chemistry and served as President of the Israel Chemical Society from 1991 to 1994.

## **Abraham Warshawsky**

### **A Tribute to a Scientist, Colleague and Friend**

Abraham Warshawsky passed away on November 12, 2001. It was in the midst of a most exciting soar of his scientific work, just when he was in the process of realizing many of his original and innovative ideas.

He was a graduate of the Technion, and joined the Department of Organic Chemistry of the Weizmann Institute, in 1973, following his postdoctoral studies in South Africa. Being an expert in the field of hydrometallurgy, he advocated and urged the development of novel polymeric-assisted technologies for metal ion extraction. His experience led to his marked achievements in the development of most efficient methodologies of polymer impregnations and to a breakthrough in the preparation of polymeric reagents and especially in acylation reactions and peptide synthesis.

His work was always oriented in the direction of applied science. Along with his direct scientific activities, Abraham was the promoter and motivator of various most important international meetings in the field of Reactive Polymers. Recently, he was the driving force behind the establishment of the Israel Society for Combinatorial Technologies, and was elected to be its first President.

Abraham Warshawsky was a father to his students and post-doctoral fellows. Always open, friendly and with remarkable sensitivity, he listened and helped, and not necessarily in relation to scientific work. This was true with regard to his friends as well.

## **The Ribosome: A molecular machine with brains**

**Ada Yonath**, Dept. of Structural Biology, Weizmann Institute of Science, Rehovot, Israel and Max-Planck-Research Unit for Ribosomal Structure, Hamburg, Germany.

Structural analysis of the recently determined high resolution structures of the small and the large ribosomal subunits from three bacterial sources, assisted by the medium resolution structure of a complex of the entire ribosome with three tRNAs, led to a quantum jump in our understanding of the process of the translation of the genetic code into proteins. Results of these studies highlighted dynamic aspects of protein biosynthesis; illuminated the modes of action of several antibiotics; indicated strategies adopted by ribosomes for maximizing their functional activity and revealed a wealth of architectural elements, including long tails of proteins penetrating the particle's cores and stabilize the intricate folds of the RNA chains. Binding of substrate analogues showed that the decoding and the peptide-bond formation are accomplished mainly by RNA and support the suggestion that the ribosome provides the frame for accurate orientation of the tRNA molecules involved

in peptide bond formation, rather than enzymatic activity. Proteins may be functionally relevant in directing the mRNA and in mediating the proper orientation of the tRNA molecules within the ribosomal rRNA frame. Elements involved in intersubunit contacts or in substrate binding are inherently flexible, but maintain well-ordered characteristic conformations in unbound particles. The ribosomes utilize this conformational variability for optimizing their efficiency and minimizing non-productive interactions, hence disorder of functionally relevant features may be linked to less active conformations or to far from physiological conditions. Clinically relevant antibiotics bind almost exclusively to rRNA. In the small subunit they affect the decoding accuracy or limit conformational mobility and in the large subunit they either interfere with substrate binding, by interacting with components of the peptidyl transferase cavity, or hinder the progression of the growing peptide chain.

## **Sonochemistry and its Application in Materials Science**

**Aharon Gedanken**, Bar-Ilan University, Ramat-Gan

The aim of this article is to introduce the field of sonochemistry. It presents the principles of the effect of ultrasound radiation on liquids and solutions. In particular, it discusses the applications of

sonochemistry to the chemistry of materials. The article concentrates mainly on the activity of Gedanken's group in the field.

## TABLE OF CONTENTS

**From the Editorial Board.....2**

**Call for candidates for the  
ICS 2002 Prize.....3**

**Invited Scientific Contributions:**

- The Ribosome: A molecular machine with brains  
Ada Yonath  
Weizmann Institute, (Israel Prize 2002).....4  
Sonochemistry and its Application in Materials Science  
Aharon Gedanken, Bar-Ilan University.....13

**Prominent Figures in the Israel Chemical  
Society:**

- Alfred Hassner, Bar-Ilan University.....17

**Universities and Industries**

- The Institute of Chemistry at the Hebrew University  
in Jerusalem  
Micha Asscher.....19

**News and reports:**

- The 67<sup>th</sup> Annual Meeting of the Israel Chemical  
Society, January 2002, Jerusalem.....23  
Presentation of the ICS 2001 Awards at the Annual  
Meeting.....25  
The 30<sup>th</sup> Annual Meeting of the Israel Polymer and  
Plastics Society, December 2001, Tel-Aviv.....27  
The Polychar Flory Award to Prof. Moshe Narkis.....27  
The HTC Award to Prof. Aviv Amirav.....27

**From the Archives**

- The Haber Library in the Weizmann Institute -  
A Rare Collection of the History and Philosophy  
of Science.....28  
The "Tin Disease" and Ernst Julius Cohen.....31

**Obituaries:**

- Prof. Avraham Warshawsky, Weizmann Institute.....33

**Abstracts in English.....35**

**Editorial Board:**

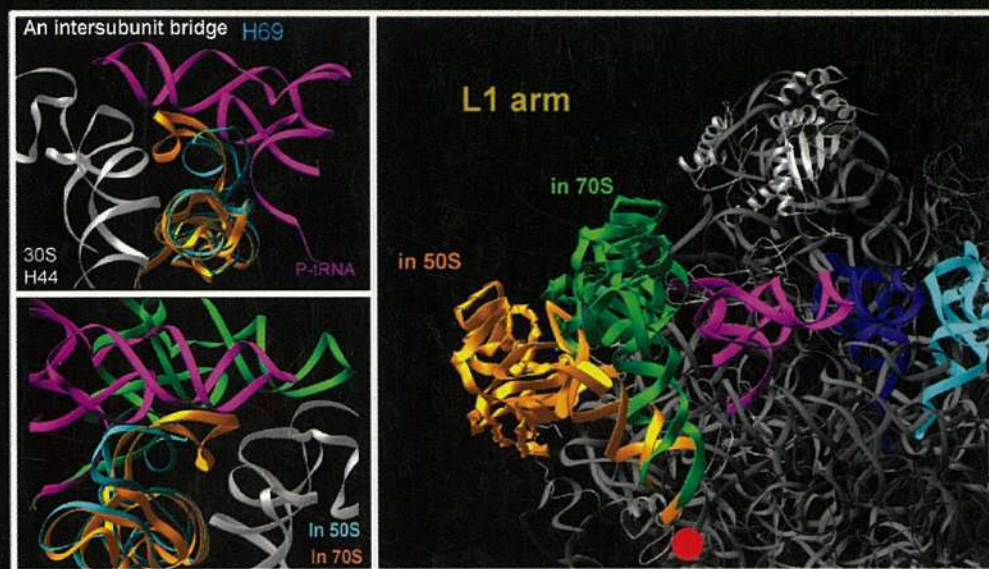
- Moshe Levy, Chairman, Weizmann Institute,  
Tel. 08-9342120, [moshe.levy@weizmann.ac.il](mailto:moshe.levy@weizmann.ac.il)  
Moris Eisen, Technion,  
Tel. 04-8292680, [chmoris@technion.ac.il](mailto:chmoris@technion.ac.il)  
Yossi Dancona, Ministry of Industry,  
Tel. 02-6220220, [dancona@moit.gov.il](mailto:dancona@moit.gov.il)  
Miri Kesner, Weizmann Institute,  
Tel. 08-9343795, [ntkesner@wis.weizmann.ac.il](mailto:ntkesner@wis.weizmann.ac.il)  
Arnon Shani, Ben-Gurion University,  
Tel. 08-6461196, [ashani@bgumail.bgu.ac.il](mailto:ashani@bgumail.bgu.ac.il)

**Graphic Design:**

- Graphic Department, Weizmann Institute of Science, Rehovot  
[www.weizmann.ac.il/graphics](http://www.weizmann.ac.il/graphics)



Functionally relevant flexible region in the  
large ribosomal subunit from *Deinococcus radiodurans*



(See article by Ada Yonath)