

2014.04.09.

**A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
KUTATÓHELYEINEK
2013. ÉVI TUDOMÁNYOS EREDMÉNYEI**

I.

Matematika és természettudományok

**Budapest
2014**

A Magyar Tudományos Akadémia matematikai és természettudományi kutatóhelyeinek
beszámolóí alapján – az intézmények vezetőinek aktív közreműködésével –
szerkesztették az MTA Titkársága
Kutatóintézeti Főosztályának munkatársai, valamint a
Támogatott Kutatócsoportok Irodájának igazgatója

Szarka László főosztályvezető

Aros Emese
Bodnár Andrea
Herczeg György
Redler László
Sugár Éva

Idei Miklós

Tartalomjegyzék

Előszó	6
A táblázatokkal kapcsolatos megjegyzések	8
Matematikai és természettudományi kutatóközpontok és kutatóintézetek	10
MTA Atommagkutató Intézet	11
Az MTA Atommagkutató Intézet főbb mutatói és pénzügyi adatai 2013-ban	25
MTA Csillagászati és Földtudományi Kutatóközpont	27
Földrajztudományi Intézet.....	29
Földtani és Geokémiai Intézet.....	39
Geodéziai és Geofizikai Intézet.....	47
Konkoly Thege Miklós Csillagászati Intézet	57
Az MTA Csillagászati és Földtudományi Kutatóközpont főbb mutatói és pénzügyi adatai 2013-ban.....	68
MTA Energiatudományi Kutatóközpont.....	75
Atomenergia-kutató Intézet.....	76
Energia és Környezetbiztonsági Intézet	87
Az MTA Energiatudományi Kutatóközpont főbb mutatói és pénzügyi adatai 2013-ban.....	97
MTA Rényi Alfréd Matematikai Kutatóintézet	102
Az MTA Rényi Alfréd Matematikai Kutatóintézet főbb mutatói és pénzügyi adatai 2013-ban	117
MTA Számítástechnikai és Automatizálási Kutatóintézet.....	119
Az MTA Számítástechnikai és Automatizálási Kutatóintézet főbb mutatói és pénzügyi adatai 2013-ban.....	134
MTA Természettudományi Kutatóközpont	136
Anyag- és Környezetkémiai Intézet	141
Enzimológiai Intézet.....	156
Kognitív Idegtudományi és Pszichológiai Intézet.....	171
Molekuláris Farmakológiai Intézet	181
Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Intézet	193
Szerves Kémiai Intézet.....	206
Az MTA Természettudományi Kutatóközpont főbb mutatói és pénzügyi adatai 2013-ban..	217
MTA Wigner Fizikai Kutatóközpont	226
Részecske- és Magfizikai Intézet	231
Szilárdtest-fizikai és Optikai Intézet	244
Az MTA Wigner Fizikai Kutatóközpont főbb mutatói és pénzügyi adatai 2013-ban	257

A kötetben szereplő kutatóközpontok, kutatóintézetek 2012-re vonatkozó pótlólagos publikációs adatai	262
Matematikai és természettudományi támogatott kutatócsoportok	264
MTA–BME Gépek és Járművek Dinamikája Kutatócsoport.....	265
MTA–BME Informatikai Rendszerek Kutatócsoport	268
MTA–BME Irányítástechnikai Kutatócsoport	271
MTA–BME Kompozittechnológiai Kutatócsoport	274
MTA–BME Kondenzált Anyagok Fizikája Kutatócsoport.....	278
MTA–BME Műszaki Analitikai Kémiai Kutatócsoport	281
MTA–BME Szerves Kémiai Technológia Kutatócsoport	285
MTA–BME Sztochasztika Kutatócsoport.....	288
MTA–BME Vízgazdálkodási Kutatócsoport	291
MTA–DE Egyenletek, Függvények, Görbék Kutatócsoport	294
MTA–DE Homogén Katalízis és Reakciómechanizmusok Kutatócsoport.....	297
MTA–DE Részecskefizikai Kutatócsoport	300
MTA–ELTE Egerváry Jenő Kombinatorikus Optimalizálási Kutatócsoport	303
MTA–ELTE Elméleti Fizikai Kutatócsoport	306
MTA–ELTE Fehérjemodellező Kutatócsoport.....	309
MTA–ELTE Geológiai, Geofizikai és Űrtudományi Kutatócsoport	312
MTA–ELTE Geometriai és Algebrai Kombinatorika Kutatócsoport	315
MTA–ELTE Komplex Kémiai Rendszerek Kutatócsoport	316
MTA–ELTE Numerikus Analízis és Nagy Hálózatok Kutatócsoport.....	318
MTA–ELTE Peptidkémiai Kutatócsoport	321
MTA–ELTE Statisztikus és Biológiai Fizika Kutatócsoport.....	324
MTA–ELTE Vulkanológiai Kutatócsoport.....	327
MTA–ME Anyagtudományi Kutatócsoport.....	328
MTA–ME Műszaki Földtudományi Kutatócsoport	331
MTA–MTM–ELTE Paleontológiai Kutatócsoport.....	334
MTA–PE Levegőkémiai Kutatócsoport.....	337
MTA–PTE Molekuláris Kölcsönhatások az Elválasztás-tudományban Kutatócsoport.....	340
MTA–PTE Nagyintenzitású Terahertzes Kutatócsoport.....	341
MTA–PTE Szelektív Kémiai Szintézisek Kutatócsoport	343
MTA–SZTE Analízis és Sztochasztika Kutatócsoport	346
MTA–SZTE Bioszervetlen Kémiai Kutatócsoport	350
MTA–SZTE Fotoakusztikus Kutatócsoport.....	354

MTA–SZTE Mesterséges Intelligencia Kutatócsoport	356
MTA–SZTE Reakciókinetikai és Felületkémiai Kutatócsoport	359
MTA–SZTE Sztereokémiai Kutatócsoport	362
MTA–SZTE Szupramolekuláris és Nanoszerkezetű Anyagok Kutatócsoport	365
A matematikai és természettudományi támogatott kutatócsoportok főbb mutatói és pénzügyi adatai 2013-ban	369
Matematikai és természettudományi egyetemi Lendület-kutatócsoportok	406
MTA–BME Lendület Egzotikus Kvantum Fázis Kutatócsoport	407
MTA–BME Lendület Jövő Internet Kutatócsoport	410
MTA–BME Lendület Kémiai Nanoérzékelők Kutatócsoport	413
MTA–BME Lendület Kvantumkémiai Kutatócsoport.....	414
MTA–BME Lendület Statisztikus Térelméleti Kutatócsoport.....	416
MTA–DE Lendület Funkcionálanalízis Kutatócsoport.....	418
MTA–ELTE Lendület Biofizikai Kutatócsoport	421
MTA–ELTE Lendület Dinoszaurusz Kutatócsoport.....	423
MTA–ELTE EIRSA Lendület Asztrofizikai Kutatócsoport	427
MTA–ELTE Lendület Katalízis és Szerves Szintézisek Kutatócsoport	430
MTA–ELTE Lendület Rácstérelméleti Kutatócsoport	433
MTA–PE Lendület Transzlációs Glikomika Kutatócsoport	435
MTA–SZTE Lendület Foldamer Kutatócsoport	438
MTA–SZTE Lendület Pórusos Nanokompozitok Kutatócsoport	441
A matematikai és természettudományi Lendület-kutatócsoportok főbb mutatói és pénzügyi adatai 2013-ban	444

ELŐSZÓ

Az MTA kutatóintézet-hálózatát 2013-ban 10 kutatóközpont (amelyek közül kilenc 2012-ben, egy pedig – az SZBK – négy évtizede jött létre) és 5 kutatóintézet alkotta. A hazai egyetemeken a Lendület-kutatócsoportok száma 2013-ban 32-re (a kutatóintézet-hálózat kilenc újonnan alakult kutatóközpontjában és öt kutatóintézetében 42-re), az akadémiai támogatású kutatócsoportok száma pedig 89-re nőtt.

A kilenc új kutatóközpont első (2012-es) évét a működés keretrendszerének kialakítása, a korábban önállóan tevékenykedő intézetek közös munkájának megalapozása határozta meg, 2013-ban pedig már látszottak az új struktúra előnyei s az elérendő, távlati célok. A kutatóközpontokat 2013-tól pályázati eljárás alapján kinevezett főigazgatók vezetik, akik gondoskodtak az intézetek szervezeti megújításáról: az új főigazgatók döntése alapján több kutatóközpont intézeteit új igazgatók vezetik, és megújult az intézetek belső struktúrája. Jellemzővé vált az intézeteken átívelő, erősebb interdiszciplináris együttműködés.

A szerkezeti megújításhoz igazodó szervezeti változások a kutatóintézet-hálózat egészében a kiválósági szempontok érvényesítése, valamint a költséghatékonyság és a szakmai együttműködések körének bővítése jegyében zajlottak. A kutatóközpontok és kutatóintézetek szervezetét egyre inkább a kutatócsoport-alapú működési modell jellemzi. A kutatóintézet-hálózatban 2013-ban a legnagyobb fejlesztést a Természettudományi Kutatóközpont és a Wigner@CERN Adatközpont épületének elkészülte jelentette, de az akadémiai infrastruktúra-fejlesztési alap segítségével a kutatóintézet-hálózatban jelentősen gyarapodott a műszerpark is.

A kutatóintézet-hálózatban új teljesítmény-követelményrendszer lett bevezetve, és kialakult a szellemi tulajdon-kezelés új eljárási rendje. 2013-ban az akadémiai kutatóhelyeken elkezdődött a nyílt publikálás (Open Access) elveinek alkalmazása és támogatása. Mindemellett az Akadémiai Kiadóval kötött keretszerződés alapján 2013-ban megkezdődött a tudományos folyóiratok szerkesztőségeinek megújítása.

A kutatói pályázati rendszer – a fiatal kutatói- és a Lendület-pályázatok mellett első ízben meghirdetett MTA Posztdoktori Kutatói Programmal – immár teljessé vált. A kutatói korfa kedvezőbbé alakításához a „Kutató Professor Emeritus” rendszer is hozzájárult. A legkiválóbb külföldi kutatók meghívásának akadémiai támogatása pedig új távlatokat nyitott a kiváló kutatók minden generációja számára. 2012-ben az új kutatóközpontok, 2013-ban pedig a többi intézmény külső tanácsadó testülete is megújult.

A jövőben (a finomhangolás befejeztével) igazi lehetőség nyílik a kutatómunka hosszú távú stratégiai céljainak és kereteinek együtt gondolkodás útján való kialakítására, és ennek alapjait a 2012-es kezdetek után a tárgyévben sikerült lefektetni.

Az MTA kutatóhálózatának 2013. évi beszámolóját három kötetben tesszük közzé, amelyek – a gazdag tudományos eredménylista mellett – számot adnak a kutatóhelyek 2013. évi tudomány szervezési, eredményhasznosítási, oktatási és pályázati tevékenységéről is.

Az I. kötet az Atommagkutató Intézet, a Csillagászati és Földtudományi Kutatóközpont, az Energiatudományi Kutatóközpont, a Rényi Alfréd Matematikai Kutatóintézet, a Számítástechnikai és Automatizálási Kutatóintézet, a Természettudományi Kutatóközpont, a

Wigner Fizikai Kutatóközpont, valamint 36 támogatott kutatócsoport és 14 Lendület-kutatócsoport 2013. évi eredményeit tartalmazza.

A kötet tartalmából kiemelendő:

- az Atomkiban egy olyan készüléket fejlesztettek ki, amely lehetővé teszi kisállatokban a PET- és az MRI (Magnetic Resonance Imaging)-technika ötvözését, megkönnyítve a központi idegrendszeri betegségek (például az epilepszia, a Parkinson-kór vagy az Alzheimer-kór) diagnosztizálását;
- a Csillagászati és Földtudományi Kutatóközpontban új kutatási projekteket megalapozó eredmények születtek két akadémiai vendégprofesszor közreműködésével;
- az atomenergia biztonságosabbá tételéhez járulhat hozzá annak a közös, magyar–koreai csúcstechnológiás laboratóriumnak a tevékenysége, amelyet az MTA Energiatudományi Kutatóközpontban avattak fel;
- a Rényi Alfréd Matematikai Kutatóintézet 2013-ban a felfedező kutatás mellett a bioinformatika, a kriptográfia és a pénzügyi matematika témájára is figyelmet fordított;
- a Számítástechnikai és Automatizálási Kutatóintézet bekapcsolódott a kiber-fizikai rendszerek világméretű kutatásába;
- a Természettudományi Kutatóközpont új épületének 2013. évi átadásával maradéktalanul megvalósult egy világszínvonalú, integrált, multidiszciplináris szemléletű új intézmény létrehozásának minden előfeltétele;
- a Wigner Fizikai Kutatóközpont munkatársai két évtizedes tevékenységükkel hozzájárultak a Nagy Hadronütköztetőnek a Higgs-bozon kimutatására kiépült két nagy észlelőrendszere, az ATLAS és a CMS eredményeihez, azaz sikerült kimutatniuk annak a bozonnak a létezését, amelynek leírásáért Peter W. Higgs brit és François Englert belga fizikus idén megkapta a fizikai Nobel-díjat.

Budapest, 2014. április 2.

Németh Tamás
főtitkár

A TÁBLÁZATOKKAL KAPCSOLATOS MEGJEGYZÉSEK

A táblázatban szereplő adatok egy részét a központok, az intézetek vagy a csoportok adták meg. A központok és az intézetek pénzügyi és létszámadatait a Gazdasági Igazgatóság, a csoportokét pedig a Támogatott Kutatócsoportok Irodája (TKI) szolgáltatta a pénzügyi beszámolók alapján. A publikációs és idézettségi adatokat a Magyar Tudományos Művek Tára (MTMT) adatbázisából való lekérdezés (és nem önbevallás) alapján közöljük. Az idézettségi adatok – a nemzetközi gyakorlatra áttérve – a beszámolási évet megelőző évre (most 2012-re) vonatkoznak. Többéves pályázatoknál mindig az adott évre eső összeg került feltüntetésre.

A beszámolók táblázataiban indexszel megjelölt számok jelentései:

¹ Az éves gazdasági beszámolóban szereplő átlagos statisztikai állományi létszám.

² A kutatói besorolásban lévő közalkalmazottak 2013. évi tényleges átlagléttszáma. Az átlagléttszámba beletartoznak a részmunkaidőben foglalkoztatottak is. Ezekben az esetekben a részmunkaidősök létszáma a ledolgozott órák alapján lett teljes munkaidős létszámra átszámítva. Az átlagléttszám a havi átlagos létszámadatok egyszerű számtani átlaga, vagyis éves átlagszámítás esetén 12-vel kell elosztani a havi átlagos létszámadatok összegét.

³ Itt tájékoztatásul külön megadjuk azoknak az akadémikusoknak a tényleges számát, akik a kutatóhellyel munkaviszonyban nem állnak ugyan, de tudományos munkájuk kapcsolódik a kutatóhely tevékenységéhez.

⁴ Akadémiai fiatal kutatói álláshelyen és egyéb álláshelyen foglalkoztatott 35 év alattiak együtt.

⁵ A publikációk közé sorolhatók mindazon tudományos, oktatási és tudományos ismeretterjesztő művek, amelyeket a kutatóhely statisztikai állományi létszámába besorolt munkatársai jelentettek meg a beszámolási évben, és a publikáción szerepel a kutatóhely neve. Az egyes publikációtípusok meghatározásánál az MTMT definícióit vettük alapul (típus_jelleg_besorolás_v3.0).

⁶ A teljes publikációnak tekinthető közleményfajták felsorolása az MTA elnökség doktori határozata (MTA_doktori_határozat-kivonat) alapján:

1. Folyóiratban megjelentek: szakcikk/tanulmány, összefoglaló cikk, rövid közlemény, sokszerzős vagy csoportos szerzőségű közlemény, forráskiadás, recenzió/kritika, műkritika, esszé.
2. Könyvek: szakkönyv, monográfia, kézikönyv, forráskiadás, kritikai kiadás, atlasz.
3. Könyvben megjelent: szaktanulmány, esszé, forráskiadás, recenzió/kritika, műkritika, műtárgyleírás, térkép.
4. Konferenciaközlemény: folyóiratban, könyvben, egyéb konferenciakötetben (általában több mint két oldal).

⁷ A 2013-as összesített impaktfaktorhoz a folyóiratok legutóbbi (2013-ban közzétett, de a 2012-es évre vonatkozó) impaktfaktorát használjuk.

⁸ A kutatóhelyhez rendelt összes eddigi publikációra 2012-ben kapott (a megjelenési év: 2012) hivatkozások száma.

⁹ A tárgyévben kiállított oklevelek alapján.

¹⁰ Nemzeti úton megadott oltalmak: szabadalom, formatervezési minta, használati minta, védjegy, földrajzi árujelző, növényfajta-oltalom, kiegészítő oltalmi tanúsítvány.

¹¹ Megadott külföldi oltalmak: hatályosított európai szabadalom, közösségi védjegy, nemzetközi, Madridi Megállapodás szerinti védjegy, közösségi növényfajta-oltalom.

¹² Azokat az előadásokat és poszttereket is ideszámítottuk, amelyek nem jelentek meg konferencia-kiadványban, de dokumentálhatók.

¹³ Itt csak a kormány szintű vagy ezzel ekvivalens országos és nemzetközi, nem megbízási díjért végzett szakpolitikai tanácsadó tevékenységet, bizottsági részvételt soroltuk fel.

¹⁴ Mindazon személyek száma, akik hazai felsőoktatási intézményben rendszeresen (nem feltétlen heti rendszerességgel), tantervi keretek között oktatnak. A külföldi egyetem számára végzett oktatási tevékenységet, a felkérésre tartott előadásokat és a szakdolgozat, diplomamunka, PhD-téma vezetését a beszámoló III., illetve IV. pontjában találjuk. Az adatok a 2012/2013-as tanév második és a 2013/2014-es tanév elő szemeszterére vonatkoznak.

¹⁵ A 2013. évben a kutatóhely részére a Magyar Államkincstár által kiutalt összes költségvetési támogatás.

¹⁶ 2013. december 31-én az MTA-keretből a kutatóhely rendelkezésére álló fiatal kutatói álláshelyeken foglalkoztatottak száma.

¹⁷ Az ÚMFT-re, az egyéb hazai pályázatokra (ÚSZT, Széll Kálmán terv stb.) és az EU-s pályázatokra kapott bevétel összege.

¹⁸ A tárgyévre vonatkozó kutatási- és egyéb vállalkozásoktól származó bevétel, valamint minden egyéb, eddig nem szerepelt kutatási és nem kutatási bevétel összege.

**MATEMATIKAI ÉS TERMÉSZETTUDOMÁNYI KUTATÓKÖZPONTOK ÉS
KUTATÓINTÉZETEK**

MTA TERMÉSZETTUDOMÁNYI KUTATÓKÖZPONT

1025 Budapest, Pusztaszeri út 59-67.; 1525 Budapest, Pf. 17

telefon: (1) 438 1130; fax: (1) 438 1147

e-mail: keseru.gyorgy@ttk.mta.hu; honlap: www.ttk.mta.hu

főigazgató: Keserű György

I. A kutatóközpont egészét érintő kutatási és tudományos szervezési eredmények 2013-ban*MTA TTK AKI*

Az intézet kapcsolatrendszerének a korábbi években is fontos részét képezték a különböző akadémiai intézetek. Az MTA TTK két évvel ezelőtti megalakulásával éppen azokkal az intézetekkel vált egyszerűbbé az együttes kutatómunka, amelyekkel a kutatás tárgyában egyébként is közös az érdeklődés. A rendelkezésükre álló ismereteikkel, módszereikkel, eszközeikkel jól kiegészítik egymást, és így a megoldandó problémákat több oldalról, komplexen, esetenként multidiszciplinárisan tudják megközelíteni.

Az intézet több témában dolgozik együtt a Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Intézettel (MFA). A Kerámiák és Nanokompozitok Osztállyal közös OTKA pályázatban növelt szilárdságú hidroxapatitokat állítanak elő. Alumínium mátrixú kompozitok szintereléssel történő előállítására és azok vizsgálata téma művelésével az intézet munkatársai az MFA egyik TÉT együttműködéséhez járulnak hozzá. A grafén-adalékolt szilícium-nitridek vizsgálata közös projektnek az az alapja, hogy a két intézet infrastrukturális feltételei jól kiegészítik egymást.

A Kognitív Idegtudományi és Pszichológiai Intézet (KPI) Összehasonlító Pszichofiziológiai Csoportjával és az MFA Mikrotechnológia Osztályával közös projektben in-vivo agyi elektródák impedanciájának csökkentése céljából nagy valódi felületű, megfelelő mechanikai stabilitású platinabevonatokat állítanak elő. A bevonatokkal készült elektródákat tesztelik az intézetben.

Az MFA Mikrotechnológia Osztály munkatársai az intézet „Biomimetikus nanoszenzorok alkalmazása proteolitikus folyamatok követésére” című OTKA-projektjében optimalizált mikroelektród struktúrákat állítanak elő.

Biológiai rendszerekben található fotonikus kristályokat vizsgáltak különböző és változó koncentrációjú oldószergőz atmoszférában az MFA munkatársaival közösen. Ugyancsak az MFA kutatóival együttműködésben fejlesztettek ki elektrokémiai cellát összegfrekvencia-keltési spektrométerhez. Új felületmódosítási módszerek segítségével kidolgozták a mikrofluidikai cella kialakításának technológiáját.

A Molekuláris Farmakológiai Intézet (MFI) Kémiai Farmakológiai Laboratóriuma az intézet MILKSENS szlovák–magyar tudományos együttműködésben végzett projekthez kapcsolódóan különböző tejfehérjék és fehérje fragmentumok azonosításával járult hozzá.

A Szerves Kémiai Intézettel (SZKI) közösen sűrűségfunkcionál-elmélet és az azon alapuló metadinamikai számítások segítségével meghatározták az NO₂- és NO₃- ionok disszociatív adszorpciójához tartozó főbb reakcióutakat és gátmagasságokat normál és hibahelyes pirit (FeS₂) felszínen. Az SZKI munkatársai újszerű szintézissel állítottak elő 4 CF₃- csoportot tartalmazó benzofenon származékot. Az intézet kutatói a szubsztituált benzofenon molekulák fotoredukciójának kinetikáját tanulmányozták impulzuslézer-fotolízissel és elmélettel.

Az intézet havi rendszerességgel megtartott szemináriumai nyitottak, azokon szívesen látják más intézetek munkatársait is. Tehetséggondozás és kutatói utánpótlás-nevelés céljából az

intézet minden évben megszervezi középiskolás diákok részére a nyári kutatótáborát, melyen témavezetőként részt vesznek az MFI és az SZKI kutatói is.

MTA TTK EI

Az Enzimológiai Intézet *Genomstabilitás Munkacsoportja* részt vett abban az intézetek közötti konzorciumban, mely az MTA TTK Szerves Kémiai Intézet LCMS laboratóriumának vezetésével sikerrel járt az MTA műszerpályázatán. Az elnyert új tömegspektrométer jelentősen pontosabbá és hatékonyabbá teszi a genomiális DNS metilációs mintázatát vizsgáló méréseiket. Ezen projekt első eredményeit 2012-ben közölték, és 2013-ban folytatták a közös kutatást az *Aktív Transzportfehérjék Munkacsoport* (MTA Enzimológiai Intézet) részvételével.

A *Szerkezeti Biofizika Munkacsoport* a VKSZ_12 pályázat keretében alakított ki szoros kapcsolatot az MTA TTK Szerves Kémiai Intézetével, elsősorban a Tömegspektrometriai Laboratóriummal. Az együttműködés bioszimiláris monoklonális antitestek szerkezetvizsgálatának és analitikájának témakörében valósul meg.

Rendezetlen Fehérje Munkacsoportnak a Molekuláris Farmakológiai Intézet (MFI) Biomembrán laboratóriummal, míg a *Fehérjeszerkezet Munkacsoportnak* az MFI Lendület Fehérje Kutatócsoportjával van együttműködése.

A *Membrán Fehérje Munkacsoport* szintén számos kutatóintézetben belüli együttműködést alakított ki. A Szerves Kémiai Intézet az MDR-szelektív vegyületek szintézisével, a Molekuláris Farmakológiai Intézet az *in vitro* metabolizmus vizsgálatokkal, míg a Tömegspektrometriai Laboratórium az ABCB6 partnereinek proteomikai módszerekkel történő azonosításával járul hozzá az együttműködéshez.

Mindenképpen meg kell még említeni, hogy számos munkacsoport az TTK Enzimológiai Intézetéből és a TTK Molekuláris Farmakológiai Intézetéből felajánlottak bizonyos összeget, hogy közösen tudjanak megvenni egy FACS Sorter készüléket, mely nélkülözhetetlen a sejtes munkákhoz az új épületben. Ugyancsak közösen adtak be műszerpályázatot egy új lézer konfokális mikroszkóp megvásárlására.

MTA TTK KPI

A KPI Összehasonlító Pszichofiziológiai csoportja, valamint a Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Intézet (MFA) és az Anyag- és Környezetkémiai Intézet (AKI) együttműködésében megszületett az első elfogadott tudományos folyóirat cikk, mely az agyi potenciál szenzorok speciális nagy felületű bevonatának kidolgozását és ennek agykutatási felhasználását ismerteti. További kettő folyóirat cikk jelent meg a KPI és az MFA együttműködésében, mely a mikrofluidikai és az extrém hosszú agyi potenciál szenzorok kidolgozását és felhasználását taglalja.

A Magyar Tudomány Ünnepe keretén belül a TTK által szervezett szimpóziumban, az emberi agykérgi elektromos tevékenység vizsgálatáról szóló előadással vettek részt.

A KPI a stratégiai munkacsoport tevékenységének keretein belül részt vett a TTK stratégiájának, jövőbeli terveinek kialakításában. A kutatócsoporti átalakítás keretében az Összehasonlító Viselkedéskutatási Csoport és a Fejlődéslélektani Csoport, illetve a Kulturális Összehasonlító Csoport és a Társadalomlélektani Csoport összevonására került sor, a Kísérleti Pszichológiai Osztályból pedig két csoportot alakítottak ki. Megtörtént az összes kutatócsoport munkájának értékelése, és ezek alapján kerültek kinevezésre a csoportvezetők.

Az év során a KPI munkatársai a lehetőségeiknek megfelelően részt vettek a TTK új telephelyének megtervezésében és 2013. decemberben beköltöztek a TTK új épületébe.

MTA TTK MFA

Az MTA TTK MFA 2013-ban még a korábbi, hat osztályos szerkezetben, intézet-szintű anyagi és szakmai irányítási felelősséggel működött egyre szűkülő anyagi keretek közt. Az év eleji 60-20-20%-os teljesítményalapú felosztás eredményeként a 200 M Ft-tal (főigazgatói keret) csökkentett TTK MTA támogatásból az MFA mindössze 393 M Ft-ot kapott. A kísérletes anyagtudomány nagy ráfordítással művelt kutatási terület, tevékenysége az öt kiemelt európai kulcstechnológia (*nanotechnológia, a mikro/nanoelektronika, a fejlett anyagok, a fotonika, a fejlett gyártástechnológia és az ipari biotechnológia*) területére esik, gazdaságilag is fontos. Erre 600 M Ft-os támogatás mellett sem volt az MFA-ban elegendő fedezetük. A forrásbevonás érdekében egy éven belül 75 szerződést kötöttek és 48 pályázatot adtak be OTKA-n felül. A 2012-ben beadott és 2013-ban elnyert új projektek száma 6, 2013-ban beadott és elnyert: 16. A pályázati bevételek java részét EU FP7, ENIAC és KMR projektek adják, a 10+1 db OTKA összesen 47 M Ft-ot jelent. Az intézetben működő ipari kapcsolatok száma 2013-ban 22, ebből 4 nagyvállalat (GE, Bosch, Mahle, Richter). Főleg a rezort-orientált irodák bevezetése miatt lett az engedélyeztetés, jóváhagyás, aláírások begyűjtése a rövid határidejű hiánypótlások, elszámolások, korrekciók esetében állandó stressz forrása a több telephelyes működtetésben.

A gazdasági kényszer miatt drasztikus szakmai változtatásokra kényszerültek az MFA-ban. Az előző évben a CERN-Wigner adatközpont építése kapcsán elkezdett költözködésekkel párhuzamosan 2013-ban felszámolták a napelem-kutatás eszközparkját és laborjait. A selejtezett berendezések helyén új funkcióval, laboreszközökkel új laborokat rendeztek be. A 29-es technológiai épületben kialakították a nanotechnológiai és mikrofluidikai preparatív és analitikai rendszert, *zárt láncú hűtést, klímafelújítást és új elektromos betáplálást alakítottak ki*. Az épület tetején kiépült az a *napelem-erőmű*, ami az osztályon a GE-vel KMR pályázati támogatással fejlesztett intelligens telephelyi világítási rendszer céljait szolgálja. A 26. épületben a TEM laborok befejezése, a zártkörű hűtés kialakítása (beleértve az informatikai gépterem hűtését is), a tanácsterem és dolgozószobák felújítása fejeződött be. Erre az átszervezésre kapott 26 MFt céltámogatással és cég-szponzorációval (GE, Samsung) volt lehetőség. Az átszervezéssel a fentiek nyomán 2013-ban 20%-nyi területfoglalás-megtakarítást értek el.

2013-ban PhD-fokozatot szerzett 4 fő. MTA doktora címet szerzett szintén 4 fő. 2 megadott szabadalom (1 nemzetközi, 1 hazai), 2 benyújtott (1 nemzetközi, 1 hazai) valamint 1 szabadalom-, illetve licenz-értékesítés az év eredménye. A TTK kutatócsoporti értékelés eredménye alapján áttekinthető az intézetet:

Kiváló kutatócsoport minősítést kapott a Mikrotechnológiai Osztály. 2013-ban csatlakozott az osztályhoz a nanoszenzorikai csoport, hiszen a nanotechnológia nem létezhet mikrotechnológia nélkül a nanoobjektumok módosításában, illetve a nano- és a makrovilág közötti kapcsolatteremtésben játszott szerepe miatt. Fontos *küldetésük, hogy az egyedülálló mikrotechnológiai eszközparkhoz és minősítő eljárásokhoz hozzáférést biztosítsanak* egyetemi hallgatóknak, valamint a kis- és középvállalkozások számára is, beleértve a külföldi ipari partnerek K+F megbízásait. E legnagyobb kutatóegységnek az infrastrukturális terhei azonban meghaladják saját bevételtermelő képességüket, intézeti szinten kezelendők.

Kiváló minősítést kapott a Nanoszerkezetek Osztály. A terület óriási elismerése, hogy e kutatási irány meghonosítóját az MTA levelező taggá választotta. Immár tanítványa irányításával hosszabbították meg a koreai–magyar közös labor finanszírozását, és a kiváló saját nevelésű gárda számos tudományos sikert is elkönnyvelhet.

Ugyancsak kiváló kutatócsoportként működik a fotonikai területből kivált Bioszenzorika Lendület kutatócsoport, amely kutatói és hallgatói állományát tekintve örvendetesen gyarapodott. Svájci együttműködése – beleértve az IPR kérdéseket, licence átadás – új szerződéses alapokra került, együttműködései biztatón fejlődnek.

Miután a csoport vezetője elhagyta az intézetet, a *kerámia-kutatás beintegrálása* a törzs kutatócsoport besorolást elért Vékonyrétegfizikai Osztályba júliusban szervezeti átalakulást tett szükségessé. Új feladataik elsősorban a határfelületi jelenségek (fém-kerámia, biokompatibilitás) vizsgálatára fókuszálnak. A terület új osztályvezető irányításával működik.

A törzs kutatócsoport minősítésű Fotonikai Osztályon új témák indításának kísérleti körülményeit teremtették meg, például egy használható optikai mérőlabor-kialakításával. Nagy sikerrel kecsegtet az immár USA szabadalommal is védett *széles-szögű in-line ellipszométer*, ami hazai és EU projekt támogatást és a legnagyobb gyártó komoly érdeklődését is kivívta amellet, hogy számos csúcskonferencián meghívott előadásokat eredményezett a gárdának. Egy korlátozott liszensz-értékesítésre is sor került.

Fejlesztendő kutatócsoport kategóriába sorolták a nagyszerű nemzetközi publikációkkal és pályázati forrásbevonással büszkélkedő Komplex rendszerek Osztályát, az elméleti csapat az intézet hivatkozásait méretét jóval meghaladó arányban javítja.

MTA TTK MFI

A 2013. esztendőben folytatódott a kutatások fókuszált területekre történő összpontosítása. Ezt segítette elő az új technológiai platformok – optofiziológia, transzgenikus modell organizmusok, nanoanyagok toxicitása – fejlesztése pályázati és MTA forrásból. Ennek keretében sikeresen befejezték a kissszögű röntgenszórás, illetve kétfoton laboratóriumok felépítését. 2013 júliusában megalakult a Fehérje kutatócsoport, miután a laboratórium vezetője az Akadémia elnöke által létrehozott Lendület pályázatot nyert. Az MFI-ben 2 Lendület kutatócsoport, 2 kiváló, 2 törzs és 1 fejlesztendő kutatócsoport működik. Az MTA TTK szintű integráció eddigi eredményeként számos közös publikáció (KPI, EI, SZKI) jelent meg, közös infrastrukturális pályázat (KPI, MFA, AKI, SZKI) került benyújtásra.

A 2013. esztendőben folytatódott a graduális és posztgraduális kutató-képzés kiválósági központ fejlesztése az MFI gyakorlati képzésében résztvevő nagyszámú diplomamunkással és PhD-hallgatóval. Az MFI kutatók hozzájárultak az ELTE, BME, SOTE graduális és posztgraduális oktatásához is. Az MFI kutatók aktívan vettek részt a „Molekuláris Farmakológiai Szemináriumok”, a „Journal Club”; az „Immunkávé”, a „Doki Suli”, a Kutatóközponti Szakmai Napok, a Gárdos Symposium, a Kutatók Éjszakája és az MTÜ rendezvényeken, valamint hazai és külföldi konferenciákon.

MTA TTK SZKI

Az SZKI általános kutatási profilja, a szerves kémia, centrális kutatási terület, így a tudományág jellegéből kifolyólag az intézet eleve alkalmas széleskörű tudományos kooperációkra. A szintetikus kémiai laboratóriumok új modell vegyületeket állítanak elő anyagtudományi és biológiai tesztelesek és mérések céljára, valamint az együttműködő intézet által javasolt szintéziseket végzik el, a műszeres szerkezetkutató egységek speciális szerkezet-meghatározási lehetőséget kínálnak az együttműködő partnerek számára. Az Elméleti Kémiai Csoport a TTK-ban egyedülálló módon foglalkozik kvantumkémiaiával és egyéb elméleti számításokkal, melyek szervesen egészítik ki a teljes központ kutatásait.

A tárgyévben a következő élő kooperációkról kell beszámolni:

Molekuláris Farmakológiai Intézet

Az ESR Laboratórium az SZKI Organokatalízis Laboratóriumával együtt vizsgálják a frusztrált Lewis párok egy különleges, nemrégiben általuk felismert reaktivitását, az egy elektron átmenetet követő gyökionpárok képződését.

Az LCMS csoport az általuk művelt műszeres analitika alapján számos metabolizmus vizsgálatban (Metabolikus Gyógyszerkölcsonhatások Laboratórium) és neurotranszmitterek mennyiségi meghatározásában (Molekuláris Idegtudományi Laboratórium) vett részt együttműködő partnerként. Az együttműködés volumenére jellemző, hogy több mint 6000 mérés valósult meg.

Enzimológiai Intézet

Élő, napi kapcsolat fejlődött ki 2012-től a Lendület programos membránfehérjékkel foglalkozó laboratórium és az SZKI Organokatalízis Laboratórium között. Az SZKI kutató egységében szintetizált vegyületeket a membránfehérje laboratórium állatkísérleteinél használja fel.

Anyag- és Környezetkémiai Intézet

Az SZKI Organokatalízis Laboratóriuma és a Környezetkémiai és Katalízis Osztály között kialakított munkakapcsolat fluorozott benzofenon származékok különleges fotokémiai tulajdonságának a feltárására irányult. A közös kutatások eredményként egy közlemény jelent meg.

A rendszeresen megrendezésre kerülő Szerves Kémiai Szemináriumok, melyekre a teljes kutatóközpont megkapja a meghívást, kitűnő fórumot biztosítanak arra, hogy az SZKI-ben folyó kutatási irányokat a társintézetek megismerjék, és ezzel tovább szélesedő, központon belüli együttműködés valósuljon meg.

MTA TERMÉSZETTUDOMÁNYI KUTATÓKÖZPONT

ANYAG- ÉS KÖRNYEZETKÉMIAI INTÉZET

1025 Budapest, Pusztaszeri út 59-67.; 1525 Budapest, Pf. 17

telefon: (1) 438 1130; fax: (1) 438 1147

e-mail: tompos.andras@ttk.mta.hu; honlap: www.ttk.mta.hu

igazgató: Szépvölgyi János; 2014. január 1-jétől Tompos András

I. A kutatóhely fő feladatai 2013-ban

Az intézet fő feladata 2013-ban magas színvonalú kémiai és interdiszciplináris kutatások végzése volt az anyagtudomány, az anyagtechnológia és a környezeti kémia kiemelt területein. Kutatómunkájukban a felmerülő tudományos kérdésekre komplex módon, többféle kísérleti és elméleti vizsgálati módszer együttes alkalmazásával keresték a válaszokat.

A kutatási témák kiválasztásakor kiemelt figyelmet fordítottak a tudományos újszerűség mellett a gyakorlati vonatkozásokra is. Több témájukban az anyagtudományi és a környezetkémiai vonatkozások együttesen jelennek meg.

Anyagtudományi kutatásaikban különleges funkcionális anyagok előállításának módszereinek és alkalmazási lehetőségeinek kutatásával, azok kémiai és szerkezeti jellemzőinek meghatározásával foglalkoztak. Az előállítási és vizsgálati módszerek kiválasztásakor fontos szempont volt, hogy azok minél kevésbé károsítsák a környezetet.

Környezetkémiai kutatásaikban a megújuló energiaforrások alkalmazási lehetőségeivel és újszerű energiatárolási és hasznosítási eljárásokkal, valamint környezeti károk megelőzésére, illetve felszámolására alkalmas eljárások kifejlesztésével foglalkoztak, összekapcsolva ezt a melléktermékek és hulladékok értékes termékekké történő átalakításával.

II. A 2013-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

A kiemelkedő kutatási eredmények tárgyalásakor az elsősorban anyagtudományi témáktól haladnak az anyagtudományi és környezeti kémiai szempontból egyaránt fontos témákon keresztül az elsősorban környezeti kémiai témákig.

Különleges nanoszerkezetű amfifil kotérhálók

Jelentős új eredményeket értek el a nanofázisszeparált szerkezetű, hidrofil és hidrofób polimer láncok összekapcsolódásával felépülő amfifil kotérhálók előállításával, jellemzésével és potenciális alkalmazási lehetőségeik felderítésével kapcsolatos kutatásaik során. Egyik ezzel kapcsolatos közleményüket 2013-ban a *Science Letter* „hot topics”-ként ismertette.

Szisztematikus kísérletsorozattal az irodalomban eddig le nem írt, poliizobutilénnel keresztkötött poliakrilsav láncokból felépülő kotérhálókat állítottak elő. A poli(N-vinilimidazol)-tartalmú kotérhálókkal kapcsolatos kutatásaik során többféle új kotérháló-sorozatot állítottak elő különböző kémiai minőségű, tulajdonságú és molekulatömegű keresztkötő felhasználásával. Részletesen vizsgálták a kotérhálók és a poli(N-vinilimidazol) homopolimer termikus viselkedését. Kutatásokat folytattak ezen amfifil kotérhálók nanoméretű fém- és félvezető-részecskék előállításának templátjaként történő felhasználási lehetőségeinek felderítése céljából. Ennek során létrehoztak különböző, ezüst, réz, palládium, magnetit és maghemit, valamint kadmium-szulfid nanorészecskéket tartalmazó teljesen

újszerű nanohibrid anyagokat, és vizsgálták ezek katalitikus aktivitását különböző modellreakciókban. Korábbi vizsgálataikat kiegészítve tanulmányozták poliizobutilénnel keresztkötött poli(poli(etilén-glikol)-metakrilát) láncokból felépülő kotérhálók és poli(poli(etilén-glikol)-metakrilát) homopolimer térhálók duzzadási viselkedését. Sikeresen állítottak elő poliizobutilénből és termikusan rezponzív („intelligens”) polimer láncokból álló kotérhálókat, és felderítették ezek alapvető tulajdonságait.

Jól definiált szerkezetű multifunkciós polimerek

Többféle újszerű multifunkciós polimer előállítását dolgozták ki. Hiperelágazásos polimereket állítottak elő 3-oxetanometanol és glicidol gyűrűfelfnyílásos polimerizációjával. Ezekből az anyagokból teljesen új, az irodalomban eddig le nem írt multifunkciós makromolekuláris stabilizátorokat hoztak létre. Atomátadásos gyökös polimerizációval (ATRP) olyan multifunkciós csillag kopolimereket szintetizáltak, melyek funkciós csoportjaik révén iniciátorként és monomerként is részt vehetnek kis zsugorodással járó polimerizációs és térháló-előállítási reakciókban. Módszert dolgoztak ki allil-, hidroxil-, valamint karboxil-telekelikus polisztirol előállítására ATRP, karbokationos módosítás, valamint click-reakciók kombinálásával. Különböző poli(terc-butyl-akrilát-ko-poli(etilén-glikol)-metakrilát) kopolimereket állítottak elő. Elsőként végezték el a mircén, egy a természetben nagy mennyiségben előforduló terpén, élő gyökös polimerizációját reverzibilis addíciós-fragmentációs láncátadásos eljárással, amely továbbalakítható funkciós polimereként alkalmazható. Hőmérséklet-érzékeny tulajdonságokkal rendelkező poli((poli(etilén-glikol)-metakrilát-ko-N-vinilimidazol) kopolimereket és terminálisan funkcionális poli(N-izopropilakrilamid) (PNIPAAm) polimereket szintetizáltak, és vizsgálták ezek vizes oldatainak hőmérséklet-érzékeny viselkedését. Megállapították, hogy a PNIPAAm alifás végcsoporttal történő funkcionálása jelentősen befolyásolja a képződött anyag hőmérséklet-érzékeny viselkedését. Jelentős eredménynek mondható, hogy olyan, különböző összetételű NIPAAm és N,N-dietilakrilamid kopolimereket hoztak létre, melyeket szol-gél módszerrel különleges hibrid térhálókka alakítottak, majd vizsgálták ezek tulajdonságait.

Poliolefinek szerkezet-tulajdonság összefüggéseinek feltárása és tulajdonságainak módosítása

Új stabilizátor rendszereket fejlesztettek ki, amelyek eleget tesznek a polietilén csomagolóanyagokkal szemben támasztott egészségügyi követelményeknek, valamint a gazdaságossági elvárásoknak. Kutatást indítottak polietilén-alapú funkcionális csomagolóanyagok kifejlesztésére. Többféle természetes szál segítségével módosították PP kompozitok ütésállóságát és összefüggést mutattak ki a mátrix polimerek szerkezete, deformációs folyamatai és a kompozitok ütésállósága között. A témát két nagyvállalattal (TVK, Magyarország; Borealis, Ausztria) együttműködésben folytatták, ami biztosította az eredmények gyakorlati hasznosulását.

Természetes és szintetikus polimerek és társított rendszereik

A természetes erősítőanyagot, töltőanyagot tartalmazó biológiailag lebontható polimerek kutatása során ebben az évben befejezték a politejsav(PLA)/fa kompozitok deformációs és törnkremeneteli mechanizmusának vizsgálatát. Megállapították, hogy a PLA/lignocellulóz határfelületi kölcsönhatás és a lignocellulóz szilárdsága mellett szerkezeti tényezők is befolyásolják a kompozitok tulajdonságait. Nagy alaki tényezővel rendelkező természetes erősítőanyagok alkalmazása esetén, speciális hálós szerkezet alakulhat ki, ami kis belső szilárdsága miatt a kompozit tulajdonságainak romlásához vezet. Intenzív kutatásokat folytattak biopolimer keverékekkel is. Reaktív feldolgozással politejsav/poliuretán

keverékeket állítottak elő. Megállapították, hogy a reaktív feldolgozással kiváló tulajdonságokkal rendelkező környezetbarát polimer keveréket lehet olcsón előállítani. A hagyományos, kőolaj alapú polimerekből előállított kompozitok közül poliamid rétegszilikát kompozitok deformációs folyamatainak jellemzésével foglalkoztak. Megállapították, hogy többféle, a makroszkopikus tulajdonságokat befolyásoló, mikromechanikai folyamat is lejátszódik a külső igénybevétel hatására, és ezek a rétegszilikátok felületkezelésével módosíthatók. Folytatták a gyógyszeripari csomagolóanyagként alkalmazható polimer/deszikkáns kompozitok fejlesztését. Megállapították, hogy a kompozitok vízfelvételi sebességét nagymértékben befolyásolja a polimerek szabadterfoga és a töltőanyag eloszlása a polimerben. A polimer típusának és a deszikkáns mennyiségének megfelelő kiválasztásával célorientált funkcionális polimer kompozitok állíthatók elő. A kutatások egy jelentős része hazai vagy nemzetközi együttműködéshez, illetve pályázathoz kapcsolódik.

Műszaki műanyagok részecskeugaras felületmódosítása

Politetrafluoretilén (PTFE) és polietiléntereftalát (PET) felületét módosították plazmaimmerziós ionimplantációval (PIII). A módosított polimerfelület a kiváltott felületi kémiai változások következtében általában hidrofílebb lett. Találtak azonban olyan kezelési paraméter-együttest, amelynél a felületi kémiai összetétel csak kismértékben változott, viszont a víztaszító (hidrofób) jelleg nőtt meg lényegesen. Ez utóbbi változás a fellépő porlasztás következtében nagymértékben megnövekedett felületi érdességgel („lótusz-hatás”) magyarázható. A felületi elektromos ellenállás több nagyságrenddel csökkent. A felületmódosított PTFE kopási térfoga megnőtt, egyenes összefüggésben az érdesség és a felületi O/C arány növekedésével.

Hélium PIII-kezelt PET-rendszerben XPS-vizsgálatok az észter-csoport bomlásáról és fokozatos szenesedésről tanúskodtak. A Raman-vizsgálatok amorf hidrogénezett szénréteg kialakulására utaltak. Összefüggéseket tártak fel a kezelési paraméterek és a felületi kémiai összetétel, valamint a kémiai szerkezet között, amelyek lehetőséget nyújtanak a felületi C-tartalom és a kémiai szerkezet célirányos kialakítására. Meghatározták a kezeléseket által kiváltott kolorimetriai, felületi energetikai és felületi elektromos vezetőképességbeli változásokat. A nedvesedés, a felületi energia és annak diszperzív komponense csökken az aromás széngyűrűk koncentrációjának növelésével. A felület vezetőképessége nőtt az XPS-sel meghatározott felületi széntartalom növekedésével, továbbá a konjugált kettős kötések koncentrációjának növekedésével.

Proteáz szenzorok

A „Biomimetikus nanoszenzorok alkalmazása proteolitikus folyamatok követésére” c. OTKA projekt keretén belül patológias vérrögök feloldásában használatos proteázok jellemzésére alkalmas elektrokémiai szenzort alakítottak ki. A specifikus szenzorfelületek kialakításában fontos szerephez jutottak a fehérjebontó enzimek szubsztrátjaként alkalmazható fehérjék és peptidek önszerveződő, komplex struktúraképző tulajdonságai. Különböző amfifil fehérjék és peptidek fémtartalmú nanorészecskék kialakulását inicializáló, valamint nanorészecskék méretét stabilizáló hatása révén olyan anyagtudományi szempontból is érdekes komplex hibrid struktúrákat alakítottak ki, amelyek egyszerre az enzimek specifikus kötőhelyeként és a szenzor elektromos válaszának meghatározójaként is szerepelhetnek.

Szén nanocső alapú szuperkondenzátorok

Alumínium hordozóra CVD-eljárással növesztett szén nanocső (CNT) erdők előállítását és elektrokémiai jellegzetességeit tanulmányozták. Vizsgálták továbbá az így kialakított elektródok szuperkondenzátorként történő alkalmazhatóságát. Elektrokémiai módszerekkel bizonyították, hogy az elektródok specifikus kapacitása szabályozhatóan változtatható és tervezhető a katalizátor oldat koncentrációjával. Az alumínium hordozóra közvetlenül leválasztott szén nanocső réteg specifikus kapacitása $25\text{--}60\text{ F g}^{-1}$ között változik. A CNT elektródoknak rendkívül kicsi az effektív soros ellenállása, melynek következtében kiválóan építhetők be nagy teljesítménysűrűségű szuperkondenzátorok elektródjaként. A CNT/Al elektródok kiváló ciklusstabilitással rendelkeznek, több mint 300 000 töltés/kisütési ciklust kibírnak.

Réteges szerkezetű katalizátorok előállítása és alkalmazása

Réteges szerkezetű oxidok felhasználásával új, rendezett pórus szerkezetű nagy fajlagos felületű oxidhordozós katalizátorokat készítettek. A katalitikusan aktív komponenseket a réteges szerkezet rétegei közé építették be, illetve az oxid kationjainak izomorf szubsztitúciójával a hordozó rétegeiben alakították ki. A katalizátorokat olefinek szelektív oxidációs reakciójában (Wacker-oxidációban), karbonsavak szelektív alkohollá redukálásában, N-organikus vegyületek hidrogenitrogénezésében és diolok dehidratálásában vizsgálták.

A heterogén fázisú Wacker-oxidáció katalizátora a hordozós Pd/VO_x redoxi rendszer.

A réteges szerkezetek felületkémiájának ismeretében kémiai eljárásokat dolgoztak ki a vanádium komponens irányított beépítésére a rétegek közé. A szmektitek rétegek közötti kationjait ioncsere reakcióba vitték, vanadil-kationokra (VO²⁺) cserélték. A kettős hidroxid anionjait dekavanadát-ionokra (V₁₀O₅₆⁶⁻) cserélték. Az ioncseret követő hőkezeléssel a rétegek között V₂O₅ pilléreket kaptak. A kapott anyag palládiumos impregnálásával hatékony Wacker-katalizátorokat nyertek. Összefüggéseket tártak fel a rétegek közötti VO_x-szerkezetek és a katalitikus aktivitás között. Megállapították, hogy a VO_x polimerizációs fokának növelésével az olefin oxidációban növekszik az aldehid hozama.

Etanol reformálása

Különböző heterogén katalitikus technológiák kifejlesztése hozzájárulhat a hidrogéngazdaság alapjainak lerakásához, azaz a hidrogén energiahordozóként történő alkalmazásához. Nemesfémmentes Mg₂AlO₄ hordozós többkomponensű katalizátorok tervezése bioetanol reformálására kombinatorikus eszközökkel történt, és a katalitikus tulajdonságokat nagyátersztő kísérleti berendezésben vizsgálták. A legjobb katalizátor a Ni-t, Co-t és Ce-t tartalmazó háromkomponensű kompozíció lett, amelyen 73% hidrogén hozamot mértek 500°C-on. A katalizátorok hatásmechanizmusát vizsgálva felületi modellt fejlesztettek ki, amely szerint az oxigén hibahelyeknek kiemelt szerepe van. Ezek mind az aktív fémmentes hordozón, mind a hordozós katalizátorokon megtalálhatók. A hibahelyek (F-centrumok) a hordozó pozitív töltésű specieszeiből és az oxigén vakanciákban csapdázott elektronokból állnak. A többkomponensű katalizátorokban az oxigén hibahelyek szoros atomi közelségben vannak a fém klaszterekkel. A fém Ni szemcséktől az oxigén hibahelyek felé irányuló töltésátvitel megnöveli a protonok redukációjához szükséges elektronok mennyiségét. A hibahelyek mind a víz mind az etanol számára kedvező adszorpciós helyet jelentenek.

Metanol fotokatalitikus reformálás

A metanol fotokatalitikus reformálásához különböző fémekkel (Ni, Mn, Fe, Cu, Sn) módosított TiO₂ alapú fotokatalizátorokat készítettek szol-gél módszerrel, egyszerű, a gyakorlatba is könnyen átültethető technikával. A kalcinálás hőmérsékletének optimalizálásával sikerült az előnyösnek tartott anatóz fázisokat előállítani. A módosító fém nem épült be a TiO₂ kristályrácsába, a megnövekedett hidrogéntermelést felületi fémoxidok együtthatásának tulajdonították. A részletesen vizsgált Pt/SnO_x-TiO₂ rendszerben a katalitikus aktivitás - Sn/Ti arány függvénye kettős maximumot adott, ami az összetevők különböző működési mechanizmusaira utal.

Biopolimer anyagok katalitikus átalakítása

A megújuló szénforrások, lignocellulóz és állati melléktermékek hasznosításának folyamatában elsődleges fontosságú a biopolimer anyagok lebontása és heteroatom, elsődlegesen oxigén vagy nitrogén tartalmának csökkentése. A heteroatom tartalom csökkentésének lehetséges eljárása az anyag katalitikus hidrokonzverziója. Laponit hordozós nikkel-indium és nikkel-foszfor katalizátorokat állítottak elő. Kimutatták, hogy a hordozón kialakuló aktív fázis Ni₂In, illetve Ni₂P. A Ni₂In/laponit katalizátort a karbonsavak, a Ni₂P/laponit katalizátort pedig inkább az alkilaminok konverziójára találták kedvezőbbnek. A Ni₂In/laponit katalizátor alkalmazásával el tudták érni, hogy a karbonsavak hidrokonzverziójában főleg alkohol keletkezzen, és kevésbé értékes, gáznemű termék ne vagy alig képződjön. Az alkilamin konverzió Ni₂P/laponit katalizátoron dialkilamin köztiterméken keresztül alkánt és ammóniát eredményezett.

2-metil-tetrahidrofurán előállítása rétegszilikát katalizátorok segítségével

A levulinsav a lignocellulóz savas hidrolízisével előállítható platform molekula. Levulinsavból konszekutív katalitikus hidrogénezési és dehidratálódási lépésekben γ -valerolakton és 1,4-pentándiol közti termékeken keresztül oxigénben szegényebb, ezért akár motorhajtó anyagként is hasznosítható 2-metil-tetrahidrofurán állítható elő. Vizsgálták az 1,4-pentándiol dehidratálását magadiit rétegszilikáton. A rétegszilikát hidrotermális szintézisekor Al₂O₃ klasztereket építettek a szerkezetbe. Kimutatták, hogy ezek a klaszterek katalitikusan aktív alakulatok, melyeken a diolból gyűrűs éter, 2-metil-tetrahidrofurán képződik.

Benzofenonszármazékok fotoredukciója mechanizmusának felderítése

Folyadékfázisban végzett kísérleteikben tripllett állapotú szubsztituált benzofenon molekulák γ -valerolaktonnal (GVL) és 2-propanollal (IPA) végbemenő hidrogénlehasítási reakcióit tanulmányozták. A tripllett molekulákat impulzus-lézergerjesztéssel állították elő és időfelbontásos módszerrel detektálták. A két eltérő tulajdonságú hidrogén-donor molekula (GVL és IPA) kinetikai viselkedése alapján megállapították, hogy a másodlagos fotoredukciós lépés csak akkor játszódik le, ha a képződő szabadgyök képes hidrogén-hidas komplexet képezni. A javasolt fotoredukciós mechanizmust kvantumkémiai számításokkal támasztották alá. Legfontosabb eredményeiket a 3,3',5,5'-tetra-(trifluormetil)-benzofenon származékkal érték el.

A légkörkémiail jelentőségű acetonilgyök képződési entalpiájának meghatározása

Lézer-indukált fluoreszcenciás detektálás (LIF) alkalmazásával meghatározták az acetonilgyök (CH₃C(O)CH₂) és Br₂ molekula gázfázisban végbemenő elemi reakciójának

sebességi együtthatóját a hőmérséklet függvényében. A meghatározott negatív aktiválási energia alapján azt a következtetést vonták le, hogy ennek a fontos léggöri szabadgyöknek a szakirodalomban közölt új képződési entalpia értéke helytálló.

Kémiai reakciók szabályzására alkalmas eljárások kidolgozása

Korszerű lézeres fényforrások fejlődése lehetővé teszi, hogy az atomok mozgását befolyásolni tudjuk kémiai reakcióba résztvevő molekulákban. A rendszerint nagyon rövid fényimpulzusok modulálásával el lehet érni, hogy a reakció több lehetséges út közül az általunk kívánt irányba menjen végbe. Ilyen folyamatok elméleti szimulációja céljából hatékony közelítő eljárást dolgoztak ki intenzív ultrarövid lézerimpulzusokkal történő, rezonánsan erősített multi-fotonos ionizáció szimulációjára. A módszerrel sikeresen értelmezték a CH_2BrI és CH_2BrCl molekulák fotoelektron spektrumát.

A H-atom és elektrongerjesztett O_2 molekula közti reakció szubmikroszkopikus mechanizmusának meghatározása

Szingulett molekuláris oxigén jelenlétében az égési folyamatok felgyorsulhatnak. Az égéskémia legfontosabb láncelégazási lépése az O_2 és H-atom reakciója. Ha a dioxi- gen szingulett elektronállapotban van, e reakció potenciálfelületén (szemben az alapállapotú O_2 reakciójával) egy alacsony potenciálgáton át juthat a rendszer a HO_2 potenciálgödörbe. A reakció kinetikáját és dinamikáját elméleti úton, kváziklasszikus trajektóriaszámításokban vizsgálták. Megállapították, hogy az O_2 gerjesztése a reakció sebességi állandóját két nagyságrenddel megnöveli, azaz ha az O_2 molekulák 1%-a gerjesztett állapotban van jelen, a láncelégazás sebessége megduplázódik. A dinamikai vizsgálatok rámutattak, hogy a reakcióban nem teljesülnek az átmeneti-állapot elmélet alapfeltevései: a reaktánsok jelentős része a potenciálgáton való átjutás után nem alakul terméké, hanem a gáton ismét (ellenkező irányban) áthaladva reaktáns formájában távozik. A mikroszkopikus mechanizmus lényeges eleme, hogy a reaktív találkozások többségében a H atom először az egyik O atomot támadja meg, majd arról átlép a másikhoz, és azzal együtt távozik.

Biomassza anyagok hasznosítását megalapozó vizsgálatok

Kezeletlen, mosott és gőzrobbantott fa és lágyszárú biomassza mintákat vizsgáltak Py-GC/MS (pirolízis-gázkromatográfia-tömegspektrometria) és TG/MS (termogravimetria-tömegspektrometria) segítségével, azzal a céllal, hogy meghatározzák a gőzrobbantás során a minta komponenseinek a kémiai összetételében bekövetkezett változásait. Megállapították, hogy az előkezelés hatására a hemicellulóz egy része eltávozott a mintákból, emiatt a cellulóz és a lignin koncentrációja megnövekedett. A TG/MS és a Py-GC/MS kísérletek rávilágítottak arra a tényre, hogy a gőzrobbantás során a cellulóz és a lignin frakció szerkezeti változáson ment keresztül. Az előbbi kristályossági és polimerizációs foka csökkent, az utóbbi metoxi- csoportjainak egy része demetileződött és alkil-oldalláncai lerövidültek. A lignin funkció- csoportjainak változását statisztikai módszerrel, a pirolízis során keletkező monomerek mennyiségének a főkomponens analízisével is igazolták. Kimutatták, hogy az előkezelés során kioldódott alkáli ionok hiányában a depolimerizáció háttérbe szorította a nagyobb mennyiségű szén maradvány keletkezésével járó fragmentációs bomlási mechanizmust.

Termomérleggel (TGA) felvett nagyobb mérésorozatok reakciókinetikai kiértékelését és modellezését végezték norvég kooperáció keretében. Vizsgálták a részlegesen elszenesített fa (torrefied wood) képződésének és égésének folyamatait. Ez az energiahordozó fa és egyéb biomassza anyagok 220-280°C-os hőkezelésével készül, és igen kedvező tulajdonságokkal

bír. Ezen kívül erdészeti maradékok (hulladékok) hasznosítási lehetőségét vizsgálták. Az erdészeti maradékok (leginkább az erdőben lehullott korhadó ágak) elszenesítésével, és a képződő faszén elgázosításával foglalkoztak. A munka során a tanulmányozott folyamatok lefolyásáról az eddigieknél mélyebb és pontosabban ismereteket szereztek és publikáltak.

Polimer hulladékok termikus újrahasznosítását vizsgáló kutatások

Poliamid és poliuretán minták termikus és termokatalitikus összehasonlító vizsgálataival (TG-MS és Pirolízis-GC/MS) megállapították, hogy a katalizátorként alkalmazott Y zeolitok jelentős mértékben befolyásolják a polimerek hőbomlási folyamatait és a termékösszetételt; segítségükkel a poliamidok pirolízisoldójának N-tartalma jelentősen csökkenthető. A zeolitok krakkoló és aromatizáló hatása 500°C-on jobban érvényesül, mint 400°C-on. A kutatások arra is rávilágítottak, hogy Y zeolit katalizátorok alkalmazása révén polimer hulladékokból értékes vegyipari alapanyagok szelektív kinyerésére is lehetőség nyílhat. Az NH₄Y zeolit közreműködésével a poláris csoportot tartalmazó polimerek könnyen azonosítható vegyületekre bomlanak az észter, illetve éter kötések szelektív és hatékony felhasadásával. Ez megkönnyíti a poliészterek, poliéterek és poliuretánok egyszerű és gyors analitikai meghatározását.

Természetes és mesterséges polimerkeverékek termoanalitikai vizsgálatai során megfigyelték, hogy lignin tartalmú keverékek PVC-vel történő együttes pirolízise során jelentős mennyiségű metil-klorid gáz keletkezik mind lassú, mind gyors felfűtés során. Megállapították, hogy a metil-halogenid komponensek metil-forrása valószínűleg a lignin fenoljához kötődő metoxi-csoport.

A PVC környezetileg előnyös oxidatív átalakítása

A poli(vinil-klorid) (PVC) már a feldolgozás során termooxidatív degradációt szenved. Mivel a PVC a világon a harmadik legnagyobb mennyiségben gyártott polimer, rendkívül nagy mennyiségű hulladék képződik, ugyanakkor a természetbe kikerülve nem bomlik le. Az újrafelhasználás során kiemelt fontosságú a termooxidáció hatásának vizsgálata a termikus stabilitásra, ugyanakkor a szisztematikus kutatások ebben a témában hiányoznak. Munkájuk során a dioktil-ftalát híg oldatában 200°C-on oxidált PVC termikus viselkedését vizsgálták. Azt a meglepő eredményt kapták, hogy már a PVC egészen kismértékű termooxidációja is igen jelentősen, 50-60°C-al lecsökkenti a bomlási hőmérsékletet a nem kezelt PVC-hez viszonyítva. Ennek az eredménynek igen nagy a gyakorlati jelentősége a PVC újrahasznosítása során alkalmazott feldolgozási technológiák szempontjából. Kutatásokat folytattak továbbá a termooxidatív degradációval előkezelt PVC újrafelhasználására is. A PVC vegyes hulladékban történő felhasználását ugyanis korlátozza, hogy nehezen elegyíthető más polimerekkel, polimer hulladékokkal. Ugyanakkor a termooxidatív degradáció hatására módosult polimer szerkezet (részben oxidálódott és lágyított) alkalmas lehet a biodegradábilis politejsavval való elegyítésre. Ezt sikeresen bizonyították, a két polimer elegyedett, ami azért is jelentős eredmény, mert így a politejsav törékenysége, ami korlátozza a felhasználását, javítható a polimer keverékekben (blendekben).

Klórbenzol lebontása rádiófrekvenciás termikus plazmában

A klórbenzolt, mint a halogénezett, aromás szerves vegyületek modelljét bontották rádiófrekvenciás termikus plazmában. Azonosították a plazmalángban megjelenő atomokat és kétatomos molekulákat, valamint meghatározták ezek gerjesztési és rotációs-vibrációs hőmérsékleteit. Minőségi meghatározást végeztek a lebontás közben képződött korom

felületén adszorbeálódott vegyületeken, amelyek policiklusos aromás szénhidrogéneknek, és azok metilezett és klórozott származékaiknak adódtak.

Szemétlerakók csurgalékvizeinek tisztítása elektrokoagulációval

Egy nagyon nehezen kezelhető szennyvíz-féleség, a kommunális szemétlerakók csurgalékvizeinek tisztítására alkalmas eljárás kidolgozásával foglalkoztak. Egy kutatási-fejlesztési konzorcium tagjaként olyan átáramlásos elektrokémiai cellát fejlesztettek ki, amelyben elektród-folyamatokkal Al^{3+} és/vagy Fe^{3+} ionokat képeznek olyan körülmények között, hogy a vizes oldat kémhatása közel semleges maradjon, és az elektródok hosszú ideig megtartsák üzemképességüket. E cél érdekében különböző cellákban szerves anyag tartalmú modell-oldatokban végeztek elektrolízis kísérleteket az elektromos és áramlási paraméterek függvényében. Megállapították, hogy adott tömegű szerves anyag eltávolításához mintegy tizedannyi tömegű fémet kell oldatba vinni.

Geológiai minták és elektronikai hulladékok analitikai vizsgálata

Magas fémtartalmú anyagok analitikai vizsgálatát végezték. A vizsgált minták elektronikai hulladékok (elemek, akkumulátorok nyomtatott áramköri lapok) feldolgozásából, égetőművi pernyéből valamint ásványi nyersanyagok kitermelésekor keletkező bányászati meddőhányókból származtak. Vizsgálták a fémkomponensek széles körét tartalmazó minták feltárási körülményeit és a feltárás módszereinek hatását az ICP-AES vizsgálatok eredményeire. A módszerrel nagyszámú, a hulladékfeldolgozás egyes fázisaihoz köthető minta elemtartalmát határozták meg, hogy ezzel hozzájáruljanak a hulladékfeldolgozás technológiájának, folyamatainak optimalizálásához.

b) Tudomány és társadalom

Az intézet és a társadalom kapcsolatrendszere sokrétű. Tudományos eredményeiket a társadalom széles rétegei számára ismeretterjesztő szinten teszik elérhetővé előadások, folyóiratcikkek, a kutatóközpontban és külső helyszíneken bemutatott kémiai kísérletek formájában. Gazdaságos, környezetbarát technológiák ismertetésével és elterjesztésével járulnak hozzá az életminőség javulásához. Középiszolások tehetséggondozását és pályaválasztását segítik.

„Hidrogéntermelés nap és bioenergiával” címmel jelentettek meg cikket a Világgazdaság online folyóirat energia mellékletében (<http://www.vg.hu/vallalatok/energia/mta-hidrogentermeles-nap-es-bioenergiaval-404700>) 2013. május 31-én. Egy futó OTKA és egy KTIA projekt eredményeit írták le röviden, amelyek egyrészt a fotokatalitikus hidrogéntermeléshez, másrészt a megújuló energiaforrások, elsősorban a biomassza innovatív energetikai alkalmazási módjaihoz köthetők, beleértve a korszerű energiátárolási eszközök és eljárások kidolgozását megalapozó kutatásokat is.

A katalízis kutatás-fejlesztés vegyipari-környezetvédelmi fontosságára hívta fel a figyelmet az az előadás, melyet „Heterogén katalízis – élhetőbb környezet” címmel 2013. május 30-án, Kolozsváron, a Babes-Bolyai Egyetem magyar hallgatói és oktatói számára tartottak.

Az intézet karöltve a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem kutatóival és négy hazai kft-vel pályázati támogatással olyan gazdaságos, környezetbarát, korszerű technológia kifejlesztésével foglalkozott, amely a magyarországi széttagolt településszerkezetnek megfelelő, kis lélekszámú falvak (<5000 fő), tanyák, üdülőkörzetek szennyvizének biológiai tisztítására alkalmas. Innovatív megoldások sorát tartalmazó kísérleti szennyvíztisztító telepet építettek fel a Balaton-felvidéki Rezi községben. Az eredményekről előadást tartottak a Magyar Tudományos Akadémián rendezett Multidisziplináris Vízkonferencián 2013. május

15-én. Az előadás összefoglalója szerepelt abban a gyűjteményben, amelyet a 2013. október 8–11. között megtartott Budapesti Víz Világkonferencia számára állított össze az MTA.

A polimerek (műanyagok és gumik) újrahasznosítása világszerte, így hazánkban is a szakmai és szélesebb körű társadalmi érdeklődés középpontjában állnak. Az intézet kutatói az egész magyar műanyagiparban terjesztett Műanyag- és Gumiipari Évkönyv 2013-as kiadványában „Új PVC reciklálási lehetőség enyhe oxidatív kezeléssel” címmel közöltek saját eredményeik alapján egy összefoglaló fejezetet.

2013. szeptember 27-én a „Kutatók Éjszakája 2013” rendezvénysorozat Pannon Egyetem Műszaki Informatikai Karán rendezett „Informatikusok éjszakája” program keretében „Kapszulázás a gasztronómiában” címmel tartott bemutatót számos érdeklődőnek.

A BME nyílt napján demonstrációval és laborlátogatással népszerűsítették a polimer kémiát és fizikát a BSc, illetve MSc képzésre jelentkező tanulók és hallgatók számára.

A Magyar Nemzeti Múzeum, Nemzeti Örökségvédelmi Központ által szervezett „Kulturális Örökség Napjai” c. rendezvényen kerámia leletek kémiai vizsgálatát mutatták be. Tudománynépszerűsítő kísérleteket tartottak a verőcei Gorka (kerámia) Múzeum által rendezett Tűzfesztiválon.

A Magyar Tudomány Ünnepe alkalmából archeometriai kutatásaik eredményeiről a Szépművészeti Múzeumban rendezett konferencián posztert állítottak ki, és az MTA CSFK Földtani és Geokémiai Intézet konferenciáján előadást tartottak. A kémia és régészet kapcsolatáról jelentettek meg cikket a Magyar Kémikusok Lapja 2013. áprilisi számában.

Egy szakmai program keretében 2013. október 18-án fogadták az MTA ATOMKI (Debrecen) fiatal kutatóit, melyen légkörkémiái témában két népszerűsítő tudományos előadás hangzott el, és laboratóriumi látogatásokra került sor. A debreceni fiatalok a „Földünk természetes védelmi rendszerei” témakörben „rendhagyó fizika órákat” tartanak hátrányos helyzetben lévő kistérségek középiskoláiban, amihez jól használhatónak tartják a budapesti tanulmányi kirándulás során szerzett új ismereteket.

A Nők a Tudományban Egyesület kezdeményezésére 2013. április 25-én 18 diáklány részvételével rendezték meg a Lányok Napját. Az intézet öt laboratóriumában kutatónők nyújtottak betekintést a kémiai kutatás olyan területeibe, mint a polimerek előállítása és analízise, a makromolekulák termikus viselkedésének vizsgálata, a nanopórusos katalizátorok természete, hogyan lehet láthatóvá tenni nanométer méretű anyagi rendszereket, továbbá, hogy milyen szerepet töltenek be az esszenciális fémionok a táplálékláncban. A kutatómunka műhelyitkai mellett a középiskolás lányok megtudhatták azt is, hogyan telnek a kutatónők mindennapjai és miképpen tudják összeegyeztetni a kutatói életformát a családi életükkel.

Az „Útravaló Ösztöndíjprogram Út a Tudományhoz Alprogram 2012/2013. tanév” pályázat keretében a Budapesti Ward Mária Gimnázium két diákját fogadták. A diákok az intézet munkájába bekapcsolódva „Farostlemez pirolitikus újrahasznosításának vizsgálata” témában végeztek kutatómunkát.

Az MFI munkatársaival közösen „Világlátó” kutatónapot tartottak a székesfehérvári Teleki Blanka Gimnázium diákjainak a nanotechnológia alapfogalmainak és eszközeinek megismerésén keresztül. Az elméleti bevezető előadásokat labormunka követte, egymáshoz kapcsolódó témában, amelyek a nanorészecskékkel történő felületmódosítás lépéseit mutatták be a nanorészecskék szintézisétől a bevonatképzésen át a film vizsgálatáig.

Az intézet ötödik alkalommal rendezte meg az „AKI Kíváncsi Kémikus” nyári kutatótábort a Természettudományi Kutatóközpont kémiai intézeteinek részvételével. Az egyhetes kutatótáborban az ország 17 pontjáról és 4 határon túli településről érkezett 25, a kémia iránt érdeklődő, tehetséges középiskolás diák 12 témával foglalkozhatott. Az intézet kutatói a következő hét témában irányították a diákok munkáját: A polimer gélek kémiája, Hulladék

bútor pirolízise újrahasznosítás céljából, Titanát nanocső alapú fotokatalizátorok, Elektronok az anyagtudományban, Gyógyászati célú kopolimerek, Mit rejt a gyümölcs? Hogyan befolyásolja a hidrogén-híd kötés a biantril származékok fotofizikáját?

A kutatóközpont munkatársainak óvodás és kisiskolás gyermekei és unokái részére Mikulás műsorral egybekötött játékos „KÉMIKULÁS” kémiaórát tartottak az intézet fiatal kutatói.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2013-ban

Hazai kapcsolatok

Az intézet hazai kapcsolatrendszeréhez egyetemek, akadémiai kutatóintézetek, egyéb intézmények és vállalatok tartoznak.

Az intézet intenzív kapcsolatokat tart fent a hazai oktatási intézményekkel, munkatársai mind az oktatásban mind közös kutatásokban részt vesznek. A közös kutatások szervezeti kereteit három egyetem esetében közös laboratóriumok adják: Az intézet Alkalmazott Polimer Fizikai Kémiai Osztálya a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem (BME) Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék közös szervezeti egysége, a Pannon Egyetem (PE) Műszaki Informatikai Karának Műszaki Kémiai Intézetével közös professzori laboratóriumot működtetnek, az Eötvös Loránd Tudományegyetem (ELTE) Kémiai Intézetével együtt pedig létrehozták a Környezeti Kémiai-fizikai Laboratóriumot.

A BME-vel három különböző témában állnak kapcsolatban. A γ -valerolakton bioüzemanyagként való használhatóságát tanulmányozták, az Energetikai Gépek és Rendszerek Tanszékével közösen motorikus vizsgálatokat végeztek. Az „Elektronsugár litográfia felbontásánál kisebb nanoáramkörök vizsgálata” c. közös OTKA-pályázat keretében az intézet munkatársai előerősítőt készítettek. Az Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszékkel közös OTKA-projektben bioetanol gyártáshoz előkezelt lignocellulózok összetételét vizsgálták.

Az ELTE-vel két témában dolgoznak együtt. A közösen üzemeltetett Lézerspektroszkópiai Laboratóriumban fontos műszerfejlesztések történtek: LIF detektálással kapcsolták össze az impulzus-lézerrel működtetett reakciókinetikai berendezést, elkészítették egy új szuperszonikus molekulásugár-berendezés terveit. A Kémiai Intézettel közösen ftalátok kioldódását vizsgálták ásványvizes palackokból.

A Pannon Egyetem kutatóival közösen tanulmányozták vízóldható metalloporfirinek fotokatalitikus alkalmazását. Elméleti kémiai vizsgálatokkal meghatározták a porfirinyűrű torzulásának hatását az elnyelési spektrum sávjainak helyzetére.

A Semmelweis Egyetemen (SE) kötött kutatási és oktatási együttműködés keretében orvosi biológiai szempontból is fontos gyógynövények kivonatainak elemtartalmait határozták meg. Eredményeik a speciál kollégiumi és a PhD-képzésen keresztül közvetlenül beépülnek az oktatási anyagba.

A Corvinus Egyetemen laboratóriumi gyakorlatot tartanak, és doktori képzésben vesznek részt. Semmelweis Egyetem Orvosi Biokémiai Intézet Hemosztázis Kutató Részlege az intézet „Biomimetikus nanoszenzorok alkalmazása proteolitikus folyamatok követésére” c. OTKA-pályázatához enzimikus folyamatok vizsgálatával és in-vitro kísérletek előkészítésével járul hozzá.

A Miskolci Egyetemen közös kutatásban ásványi nyersanyagok és elektronikai hulladékok elemösszetételét határozzák meg.

A Debreceni Egyetemmel közös OTKA-projekt keretében módosított szén nanorészecskéket állítanak elő és azok fizikai-kémiai tulajdonságait vizsgálják.

Az egyetemek mellett ugyancsak fontosak a kapcsolatok az MTA kutatóhálózatán belüli intézetekkel, különösen a Természettudományi Kutatóközpont intézeteivel.

Az intézet több témában dolgozik együtt a Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Intézettel (MFA). A Kerámiák és Nanokompozitok Osztállyal közös OTKA-pályázatban növelt szilárdságú hidroxipatitokat állítanak elő. Alumínium mátrixú kompozitok szintereléssel történő előállítására és azok vizsgálata téma művelésével az intézet munkatársai az MFA egyik TÉT-együttműködéséhez járulnak hozzá. A grafén-adalékolt szilícium-nitridek vizsgálata közös projektnek az az alapja, hogy a két intézet infrastrukturális feltételei jól kiegészítik egymást.

A Kognitív Idegtudományi és Pszichológiai Intézet (KPI) Összehasonlító Pszichofiziológiai Csoportjával és az MFA Mikrotechnológia Osztályával közös projektben in-vivo agyi elektródák impedanciájának csökkentése céljából nagy valódi felületű, megfelelő mechanikai stabilitású platinabevonatokat állítanak elő. A bevonatokkal készült elektródákat tesztelik az intézetben.

Az MFA Mikrotechnológia Osztály munkatársai az intézet „Biomimetikus nanoszenzorok alkalmazása proteolitikus folyamatok követésére” c. OTKA-projektjében optimalizált mikroelektród struktúrákat állítanak elő. Ugyanebben a projektben, valamint az intézet „Tejipari termékek újszerű minőségi vizsgálata” c. pályázatában (Magyarország–Szlovákia Határon Átnyúló Program) részt vesz az MTA–ELTE Peptidkémiai Kutatócsoportja, enzimek specifikus szubsztrát analógjait állítják elő.

Biológiai rendszerekben található fotonikus kristályokat vizsgáltak különböző és változó koncentrációjú oldószerzőz atmoszférában az MFA munkatársaival közösen. Ugyancsak az MFA kutatóival együttműködésben fejlesztettek ki elektrokémiai cellát összegfrekvencia-keltési spektrométerhez. Új felületmódosítási módszerek segítségével kidolgozták a mikrofluidikai cella kialakításának technológiáját.

A Molekuláris Farmakológiai Intézet (MFI) Kémiai Farmakológiai Laboratóriuma az intézet MILKSENS szlovák-magyar tudományos együttműködésben végzett projekthez kapcsolódóan különböző tejfehérjék és fehérje fragmentumok azonosításával járult hozzá.

A Szerves Kémiai Intézettel (SZKI) közösen sűrűségfüggő elmélet és az azon alapuló metadinamikai számítások segítségével meghatározták az NO_2^- és NO_3^- ionok disszociatív adszorpciójához tartozó főbb reakcióutakat és gátmagasságokat normál és hibahelyes pirit (FeS_2) felszínen. Az SZKI munkatársai újszerű szintézissel állítottak elő 4 CF_3^- csoportot tartalmazó benzofenon származékot. Az intézet kutatói a szubsztituált benzofenon molekulák fotoredukciójának kinetikáját tanulmányozták impulzuslézer-fotolízissel és elmélettel.

Az MTA kutatóközpontjai közül a Wigner Fizikai Kutatóközponttal közös OTKA-projekt keretében politetrafluoroetilén felületét kezelték hidegplazmában, polivinilpirrolidon- és csersavrétegeket rögzítettek rajta, majd többféle műszeres technika segítségével vizsgálták a felületi réteg összetételét.

Régészeti leletek, műkincsek roncsolásmentes anyagvizsgálatát végezték el a Szépművészeti Múzeum, az ELTE BTK Régészettudományi Intézet, a Magyar Képzőművészeti Egyetem és a Magyar Nemzeti Múzeum megbízásából.

A következő ipari partnerekkel dolgoztak együtt K+F projekteken: az Alpha-Vet Állatgyógyászati Kft.-vel állatgyógyászati készítményeket, a Polinvent Kft. megbízásából maleátok hidroaminálására katalizátorokat, az Inno-Comp Kft.-vel speciális gócképzőt tartalmazó nagy ütésállóságú random iPP kopolimer típust fejlesztettek ki.

Nemzetközi kapcsolatok

Kétoldalú akadémiai egyezmény keretében sok publikációban megmutatkozó gyümölcsöző együttműködést folytatnak a Poznani Műszaki Egyetem (Lengyelország) munkatársaival. Hibrid nanorendszereket, polimereket csoportosítottak, kimutatták hasonlóságait, ami újfajta extrakciós eljárás kifejlesztéséhez vezetett.

Visegrad Post-Masters Scholarship Program keretében új eljárást dolgoztak ki kalkogénid üvegek alkalmazására nanolitográfiai munkákban. Az együttműködő partnerintézmény az ukrain Uzhhorod National University.

Magyar–olasz TÉT pályázatban a Bolognai Egyetem kutatóival közösen fullerének előállításával foglalkoztak rádiófrekvenciás termikus plazmában. A téma azért fontos, mert a fullerének gazdaságos gyártása még nem megoldott.

A kolozsvári Babes-Bolyai Egyetem munkatársaival MTA Domus Pályázat keretében hidroxipatit alapú kerámiabevonatokat állítanak elő plazmaszórással, majd vizsgálták a bevonatok tapadását és kémiai szerkezetét.

MÖB–DAAD projekt keretében az Ulmi Egyetem munkatársaival együttműködésben fém-ionfolyadék határfelületeken kialakuló elektromos kettősréteg igen lassú átrendeződéseit tanulmányozták potenciosztatikus töltési görbék mérésével.

A prágai J. Heyrovsky Fizikai Kémiai Intézettel akadémiai közti kétoldalú megállapodás alapján kötött együttműködésük célja, hogy elektrokémiai közegre is kiterjessék az egyes molekulák vezetőképességének vizsgálatát mechanikusan szabályozott törőfelület módszerrel.

Együttműködésben a Berni Egyetem Kémiai és Biokémiai Tanszékével CP-AFM (vezetősondás atomerő mikroszkóp) műszerben alakítottak ki áram-távolság spektroszkópia elektrokémiai közegben történő kivitelezésére alkalmas mérés technikai összeállítást.

Már a második EU-projektben partnerük a drezdai Fraunhofer Institute for Material and Beam Technology, amelynek keretében a partner által előállított szuperkondenzátorokat vizsgálják az intézetben. Megállapították, hogy az ALD-bevonatos nanocsövek kiemelt stabilitást mutatnak.

Pozsonyi Comenius Egyetem Matematika, Fizika és Informatikai Kara az intézet fő partnere a Magyarország–Szlovákia Határon Átnyúló Program „Tejipari termékek újszerű minőségi vizsgálata; modern bioanalitikai eszközök használata” c. projekteknél.

A Svájci állam SciEx programja finanszírozza azt a kutatást, melyben jól definiált szerkezetű polimerek szintetizálnak környezetbarát enzim katalízissel. Az együttműködő partner az Adolphe Merkle Institute of the University of Fribourg.

A francia Clermont Université-vel együttműködésben polietilén fény- és termikus oxidációját tanulmányozták, és meghatározták a telítetlen csoportok szerepét ezekben a folyamatokban.

Rétegszilikát nanokompozitok közül a PA6/montmorillonite nanokompozitok deformációs mechanizmusát tanulmányozták a University of Liege (Belgium) kutatóival közösen.

Akadémiai együttműködés keretében a bolgár Institute of Organic Chemistry with Centre of Phytochemistry-vel közösen új típusú nanopórusos szilikátok alkalmazásának lehetőségét vizsgálták gyógyszer hatóanyag hordozó rendszerként és katalitikus célokra.

A franciaországi Caen University munkatársaival utóégető katalizátorok fejlesztésében vesznek részt. A katalizátorokban megnövelték a Pt diszperzítését, és tanulmányozták a katalizátorok aktivitását különböző szénhidrogén reakciókban.

Molekuladinamika és ionizáció szabályozása erős ultrarövid lézerpulzusokkal témában Bécsi Egyetem és a New York-beli Stony Brook University kutatóival működtek együtt.

A göttingeni MPI-BPC intézettel közösen tisztázták az elméletileg érdekes és a gyakorlatban is használt kristályviola-lacton néhány érdekes és meglepő fotofizikai tulajdonságát.

COST együttműködés keretében a Karlsruhe Institute of Technology kutatóival tanulmányozták az NCN molekula unimolekulás bomlásának kinetikáját, és megállapították a reakció mechanizmusát.

Cellulóz származékok levulinsavvá történő hidrolíziséhez szükséges savas típusú heterogén katalizátorokat fejlesztettek ki egy TÉT-projekt keretében a Bukaresti Egyetem kutatóival.

Egy magyar-román TÉT-együttműködésben a Craiovai Egyetemmel együtt megkezdték a munkát a könyvtári és levéltári örökségünkre ható környezeti tényezők értékelése és hatásuk enyhítése témában.

Több publikációban megmutatkozó eredményes együttműködést folytatnak a trondheimi Norwegian University of Science and Technology munkatársaival. Olyan ismeretek szereztek, melyek hozzájárulnak a biomasza anyagok hatékony energetikai hasznosításához.

Vizes kálium-bikarbonát/karbonát rendszer egyensúlyi reakcióját vizsgálták magas hőmérsékleten és nagy nyomáson a University of Hawaii kutatóival közösen.

Termokatalitikus úton keletkező nanopórusos szenek előállítására céljából működnek együtt a rigai Latvian State Institute of Wood Chemistry munkatársaival.

Három jelentős nemzetközi konferencia szervezésével járultak hozzá az intézet külkapcsolataihoz.

Balatonalmádiban 2013. augusztus 25–29. között rendezték meg az 5. Közép-európai Plazmakémiai Szimpóziumot (5th Central European Symposium of Plasma Chemistry), melyen 27 országból 157 fő vett részt.

Conferentia Chemometrica 2013 néven nemzetközi kemometriai konferenciát szerveztek Sopronban. A szervezési kereteket a Magyar Kémikusok Egyesülete és az MTA biztosította. A konferencia anyagából különszám készül a Journal of Chemometrics folyóiratban.

Az EU FP7 Marie Curie Initial Training Network „Integrating research training in particle & powder technology to deliver efficient products with high functionality (Powtech)” program 4 éves projektjének félidei összejevetelét tartották Budapesten. A programon előadást tartottak a résztvevő 15 európai kutatóhely témavezetői és PhD hallgatói, valamint ipari partnerek.

A következő külföldi szerződéses munkákat teljesítették:

Polietilén csövek viselkedését vizsgálták extraktív körülmények között, meghatározták az adalékcsoomag és a feldolgozás hatását. Együttműködő partnerek: Clariant Produkte (Svájc) és Tiszai Vegyi Kombinát.

Új generációs szálerősítésű PP kompozitok fejlesztésében vettek részt a Borealis Polyolefine GmbH-val együttműködésben.

A Clariant Produkte (Németország) céggel kötött kutatási szerződés keretében, etán oxidatív dehidrogénezése etiléné témában kiváló eredményeket értek el a nagyátersztő módszerekkel tervezett és előállított Mo-V alapú vegyesoxid katalizátorok alkalmazásával.

IV. A 2013-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Hazai pályázatok

Az intézet „A megújuló energiaforrások újszerű felhasználására és korszerű energiatárolási eszközök fejlesztésére alkalmas innovatív eljárások tudományos megalapozása” c. KTIA_AIK pályázatában végzett munkának a következők a főbb eredményei:

Biomassza energiasűrűségének növelése céljából meghatározták módszeresen kiválasztott hazai eredetű minták összetételét és TG/MS és pirolízis-GC/MS segítségével a hőbomlásuk jellemzőit. Biomassza plazma reaktorban történő átalakítására alkalmas készüléket építettek előzetes termodinamikai számítások és a reaktorban kialakuló hő- és anyagáramlások szimulációja alapján. Biomasszából nyerhető öt szénatomos, oxigént tartalmazó vegyületek továbbalakítására és felhasználhatóságának vizsgálata alapján: 1) eljárást fejlesztettek ki 1,4-pentándiol heterogén katalitikus 2-metil-tetrahidrofuránná vezető dehidratálására szilárdsv katalizátor alkalmazásával, és optimalizálták a reakciókörülményeket a reakció folyamatos, átáramlásos csőreaktorban történő kivitelezéséhez; 2) meghatározták a biomassza eredetű γ -valerolakton (GVL), mint üzemanyag, illetve üzemanyag-adalék teljesítőképességét dízel motorban, és megállapították, hogy a GVL-adagolás jelentősen csökkenti a dízelmotor koromkibocsátását; 3) kísérleti és elméleti módszerek együttes alkalmazásával meghatározták a GVL legfontosabb légköri reakcióinak, a fotokémiai bomlás és az OH-gyökkel történő reakció primer lépésének kinetikai paramétereit. Metanol fotokatalitikus reformálására alkalmas fotokatalizátorok fejlesztésével igen jelentős, 35 ml/h/g hidrogéntermelést értek el. Módszert dolgoztak ki wolfrámatomoknak rutil-rácsba történő tökéletes beépítésére és megállapították, hogy az új szerkezetű TiO_2 -ból előállított kompozit anód elektrokatalizátorok jelentősen megnövelik a tüzelőanyag-cellák CO toleranciáját. Eljárást dolgoztak ki polimer kotérhálók szintézisére és azt sikeresen alkalmazták különböző tulajdonságú, nanoszerkezetű kotérhálók előállítására, és az új anyagok fizikai-kémiai tulajdonságainak meghatározásával felmérték azok alkalmazási lehetőségeit. Energiatárolásra alkalmas szuperkondenzátorok előállítása céljából mérések alapján azonosították azokat a kereskedelemben kapható olcsó szénszöveteket, amelyek a kidolgozandó technológia alapjául szolgálhatnak.

A „Kommunális hulladéklerakók csurgalékvizének helyszíni kezelése, innovatív és újszerű megoldásokkal vegyszermentesen, egyetlen eljárással a keletkezés helyén” c. KMR-12-1-2012-0386 pályázatban kísérleteket végeztek kommunális szemétkerakók csurgalékvizeinek tisztítására alkalmas eljárás kidolgozására.

Egy átáramlásos elektrokémiai cella kifejlesztése: különböző cellákban végeztek szerves anyag tartalmú modell-oldatokban elektrolízis kísérleteket az elektromos és áramlási paraméterek függvényében.

A „Kompetitív kölcsönhatások funkcionális polimer rendszerekben” című, 2013. szeptemberben indult OTKA-pályázat keretében beszerezték a kutatáshoz szükséges alapanyagokat, és széleskörűen jellemezték azokat.

A „Komplexxképződéssel járó elemi reakciók kinetikájának leírására alkalmas elméleti módszerek fejlesztése” c. OTKA-pályázatban kváziklasszikus trajektóriaszámításokban kimutatták, hogy a metilgyök és HBr által képzett komplex élettartama nagyon kicsi, ennek ellenére létezése a két partner reakciójában dinamikai következményekkel jár. A metilgyök rezgési gerjesztése a kísérletezők feltételezéseivel szemben nem gyorsítja a reakciót.

Nemzetközi pályázatok

Európai Unió FP7 Pliant N309530 pályázatuk keretében szén nanocső alapú szuperkondenzátorok elektrokémiai jellegzetességeit tanulmányozták, és vizsgálták az így kialakított elektródok szuperkondenzátorként történő alkalmazhatóságát. Elektrokémiai módszerekkel bizonyították, hogy az elektródok specifikus kapacitása szabályozhatóan változtatható és tervezhető a katalizátor oldat koncentrációjával. A szén nanocső elektródoknak rendkívül kicsi az effektív soros ellenállása, melynek következtében kiválóan építhetők be nagy teljesítménysűrűségű szuperkondenzátorok elektródjaként. Azt találták, hogy ezek az elektródok kiváló ciklusstabilitással rendelkeznek.

V. A 2013-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Kollár-Hunek K, Héberger K: Method and Model Comparison by Sum of Ranking differences in Cases of Repeated Observations (Ties). *Chemometrics Intell. Lab. Syst.*, 127:139-146 (2013) <http://real.mtak.hu/6022/>
2. Fazekas P, Bódis E, Keszler AM, Czégény Zs, Klébert Sz, Károly Z et al. (7, Szépvolgyi J.): Decomposition of Chlorobenzene by Thermal Plasma Processing. *Plasma Chem Plasma Proc*, 33:(4) 765-778 (2013) <http://real.mtak.hu/5777/>
3. Dörfler S, Felhösi I, Marek T, Thieme S, Althues H, Nyikos L et al. (7): High power supercap electrodes based on vertical aligned carbon nanotubes on aluminum. *Journal of Power Sources*, 227: 218-228 (2013) <http://real.mtak.hu/4358/>
4. Csiszár E, Fekete E, Tóth A, Bandi É, Koczka B, Sajó I: Effect of particle size on the surface properties and morphology of ground flax. *Carbohydr. Polym.*, 94: 927-933 (2013) <http://real.mtak.hu/id/eprint/4971>
5. Lónyi F, Valyon J, Someus E, Hancsók J: Steam reforming of bio-oil from pyrolysis of MBM over particulate and monolith supported Ni/ γ -Al₂O₃ catalysts. *Fuel*, 112: 23-30 (2013) <http://real.mtak.hu/5933/>
6. Demeter A, Horváth K, Böör K, Molnár L, Soós T, Lendvay Gy: Substituent effect on the photoreduction kinetics of benzophenone. *J. Phys. Chem. A*, 117: 10196-10210 (2013) <http://real.mtak.hu/7660/>
7. Szijiártó GP, Pásztai Z, Sajó I, Erdőhelyi A, Radnóczy G, Tompos A: Nature of the active sites in Ni/MgAl₂O₄-based catalysts designed for steam reforming of ethanol. *J. Catal.*, 305: 290-306 (2013) <http://real.mtak.hu/5833/>
8. Blázsó M, Bozi J: Ammonium Y zeolite applied as a thermochemolysis reagent for identification of polyethers and polyesters. *Journal of Chromatography A*, 1271: 217-220 (2013) <http://real.mtak.hu/4796/>
9. Fodor Cs, Domján A, Iván B: Unprecedented Scissor Effect of Macromolecular Cross-linkers on the Glass Transition Temperature of Poly(N-vinylimidazole), Crystallinity Suppression of Poly(tetrahydrofuran) and Molecular Mobility by Solid State NMR in Poly(N-vinylimidazole)-I-poly(tetrahydrofuran) Conetworks. *Polymer Chemistry*, 4: 3714-3724 (2013) <http://real.mtak.hu/5795/>
10. Kali G, Vavra Sz, László K, Iván B: Thermally Responsive Amphiphilic Conetworks and Gels Based on Poly(N-isopropylacrylamide) and Polyisobutylene. *Macromolecules*, 46: 5337-5344 (2013) <http://real.mtak.hu/8420/>

MTA TERMÉSZETTUDOMÁNYI KUTATÓKÖZPONT ENZIMOLÓGIAI INTÉZET

1113 Budapest, Karolina út 29-31.

telefon:(1) 279 3115; fax: (1) 466 5465

e-mail: buday.laszlo@ttk.mta.hu; honlap: www.ttk.mta.hu

igazgató: Buday László

I. A kutatóhely fő feladatai 2013-ban

Az Enzimológiai Intézetben számos tudományterületet átfogó, interdiszciplináris kutatások folynak, melyek során mind a biológia, mind a fizika és a kémia tudománya által kínált lehetőségek alkalmazásra kerülnek. A kutatóhelyen részben szerkezeti biológiai alapkutatások folynak, melyek lehetővé teszik a fizioiógias és patofizioiógias folyamatok sejt és molekula szintű értelmezését, másrészt a szerkezeti biológia mellett folyamatosan bővül a kutatási tevékenység a komplex biológiai folyamatok megértését célzó rendszerbiológia irányába proteomika és bioinformatika lehetőségeinek kihasználásával. Így többek között vizsgálja a sejtekben zajló jelátviteli utakat, a rendezetlen fehérjék működését, a komplementrendszer aktiválódási mechanizmusait molekulaszerekezeti alapon, a daganatos és neurodegeneratív betegségek kialakulásához vezető egyes folyamatok, a transzmembrán fehérjék szerepét, valamint a DNS hibajavításban szerepet játszó enzimeket.

Az intézet fontos feladatának tekinti a nemzetközileg beágyazott alapkutatás mellett az oktatást. Munkatársaik négy egyetemen tartanak előadásokat, illetve gyakorlatokat mind az alapképzésben, mind posztgraduális oktatásban. Intézetük ezzel egy időben több, mint harminc doktorandusz-hallgató oktatását is ellátja, akik munkájukkal nagymértékben hozzájárulnak az intézet eredményeihez.

Az intézet alapkutatási eredményeinek hasznosítására együttműködések jöttek és jönnek létre, különböző kis- és nagyvállalatokkal. 2013-ban az intézet aktív módon közreműködött a Richter Gedeon Nyrt. terápiás szerek fejlesztési projektjeiben, valamint szoros kapcsolatot alakított ki számos kisvállalattal (Vichem Chemie Kutató Kft., Targetex Kft., Pharma-Trend Biotechnológia Kft., CellPharma Kft.). Fontos feladatuknak tekintik a magyar tudomány eredményeinek nemzetközi szinten történő képviselését, amit nemzetközi pályázatok résztvevőiként és nemzetközi szervezetekben viselt tisztségek útján valósítanak meg.

II. A 2013-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

A miosztatin az izomnövekedést gátló növekedési faktor, amely az inaktív prekursor fehérjéből, a promiosztatinból többszörös proteolitikus hasítás révén aktiválódik. A *Funkcionális Genomika Munkacsoport* kutatói vizsgálták az általuk korábban azonosított két multidomén fehérje, a WFIKKN1 és WFIKKN2 kölcsönhatását a miosztatin aktiválódási formáival. Kimutatták, hogy az aktiválódás során keletkező látens miosztatin - amely két prodomén és a dimer növekedési faktor nem-kovalens komplexe – jelentős miosztatin aktivitással rendelkezik: a komplex disszociál, a disszociáció során keletkező érett miosztatin és az egy prodoménből és egy dimer növekedési faktorból álló szemilátens miosztatin is képes aktiválni a miosztatin receptort. A szemilátens miosztatin aktivitását a WFIKKN1 fehérje hatékonyabban gátolja, mint a paralóg WFIKKN2, feltehetően azért, mert a WFIKKN1 fehérje az aktív növekedési faktoron kívül a miosztatin prodoménnel is kölcsönhat, míg a

WFIKKN2 csak az érett miosztatinhoz kötődik. A WFIKKN1 fehérje és a különböző miosztatin formák között kialakuló kölcsönhatás a miosztatin jelátvitel aktiválódásának szigorú szabályozását biztosítja.

A Funkcionális Genomika Munkacsoport kutatói korábbi munkájuk során definiálták a különböző, változatos doménarchitektúrájú extracelluláris multidomén fehérjékben előforduló LCCL modult, az LCCL domén molekuláris funkciója azonban ismeretlen volt. Az elmúlt időszakban a lipopoliszacharid kötő szérumból kivont fehérje, a humán CRISPLD2 LCCL doménjeit vizsgálva megállapították, hogy a fehérje mindkét LCCL doménje részt vesz az LPS kötésben. Az a megfigyelésük, hogy az LCCL domének nagyobb affinitással kötik az LPS toxicitásáért felelős Lipid A régiót, mint a teljes LPS-t, arra utal, hogy a CRISPLD2 fehérje az LCCL doménjei révén gátolja a Lipid A és az LPS receptor közötti kölcsönhatás kialakulását, ugyanakkor nem befolyásolja az LPS poliszacharid régiója elleni antibakteriális immunitás kialakulását.

Membránfehérje Bioinformatika Lendület Munkacsoport

2013 első felében a csoportépítésen volt a fő hangsúly. Januárban egy doktori védés előtt álló fiatal kutató, míg februárban 2 MSc-hallgató csatlakozott a csoporthoz. Ők a csoport által újonnan elindított kutatási területen dolgoznak, amely az újgenerációs szekvenálási eredmények feldolgozásával, értelmezésével kapcsolatos. Ebben a témakörben még nem született eredmény. A Lendület pályázatban végzett munka során átdolgozták és jelentősen bővítették a PDBTM adatbázist, amely munkáról a Nucleic Acids Research folyóiratban jelent meg publikációjuk. Emellett igen jelentős eredményeket értek el egy újfajta kísérleti technika kidolgozása területén, amelynek segítségével rövid, alig egy hetes kísérlet során több száz transzmembrán fehérjéről nyerhetünk értékes topológiai adatokat. Ez a munka még nem került publikálásra. Szintén jelentős eredmény, hogy sikerült kidolgozni egy, az eddigi módszereknél lényegesen pontosabb elméleti topológia becslő eljárást, amelyet egy emberi transzmembrán fehérje adathalmazon tesztelték, illetve segítségével azonosították az emberi proteomban levő transzmembrán fehérjéket és meghatározták azok topológiáját. Ez a munka szintén publikáció alatt van, de a csoport egyik fiatal MSc hallgatója első helyezést ért el a munkából készült TDK-dolgozatával. A transzmembrán fehérjék szerkezet felismerése területén is sikerült egy új, statisztikus potenciálon alapuló eljárást kidolgozni, amely 80% feletti pontossággal képes a helyes szerkezeti osztályba sorolni a transzmembrán fehérjéket, csupán azok aminosav szekvenciáinak ismeretében. Ez a munka szintén publikáció alatt van.

Genomstabilitás Lendület Munkacsoport

Egyik fő 2013-as eredménye az ultraibolya sugárzás hatásainak vizsgálata területén született. Az e célra kifejlesztett és 2012-be publikált kísérleti mérési módszerük jól kiegészítette egy bostoni fehérjekutató csoport projektjét, melynek keretében előállításra került egy potenciális diagnosztikus reagens a DNS-ben előforduló ultraibolya fény által okozott léziók detektálására. Megmérték, hogy a reagens milyen affinitással köti a különféle léziókat, és bebizonyították, hogy segítségével izolálhatók a DNS-javításért felelős fehérjekomplexek. Az eredmények ígéretes módszert kínálnak humán sejtek, szövetminták DNS-javító képességének mérésére – nem csak ultraibolya fény, hanem más környezeti hatások okozta károsodás esetében is. Mivel a daganatos sejteknek gyakran módosult a DNS-javító képessége, és ez a tulajdonságuk nagyban befolyásolja többféle kemoterapiás kezelés hatékonyságát, a kifejleszhető diagnosztikai módszer nagyban segítheti a megfelelő kezelés kiválasztását. A kutatás első fázisának eredményei 2013 végén közzé kerültek.

Genomstabilitás Lendület Munkacsoport több más területen is ért el új eredményeket. Ezek közül legfontosabb a DNS-károsodás és a DNS-hibajavító folyamatok hatásának vizsgálata az egész genom szintjén. Egyrészt megmutatták, hogy a transzlációs szintézis hiánya nagy léptékű genomiális átrendeződésekhez, kromoszómatorésekhez vezet. Másrészt meghatározták normál és DNS-javításban mutáns sejtklónok teljes genomjának a szekvenciáját, DNS-károsító kezelés előtt és után. Ezen adatok folyamatban lévő elemzésével jellemzik a kísérletekhez használt modell sejtvonaltulajdonságait, meghatározzák a daganatokban gyakran mutálódott gének hatását a genomstabilitásra, és feltárják a használt DNS-károsító alkiláló szer mutagenikus hatását. Mivel a rákdiagnosztika jövője egyértelműen a daganatok genomiális elemzésében rejlik, munkájukkal segítik egy ehhez szükséges tudásbázis kiépítését Magyarországon.

A natív ABCC6 fehérje pontos szubcelluláris lokalizációjának meghatározása elengedhetetlen ahhoz, hogy megfejtjük az ABCC6 fehérje szerepét az élettanban és betegségekben. Humán és egér ABCC6-ot felismerő ellenanyagokkal az *Aktív Transzport Fehérjék Munkacsoport* egyértelműen kimutatta, hogy az ABCC6 a hepatociták bazolaterális membránjában helyezkedik el. Eredményeik alátámasztják azt a modellt, miszerint az ABCC6 közrejátszik a metabolitok a hepatocitákból a szisztémás keringésbe történő szinuszoidális effluxában. Ezen eredményeik alapján érvényes modell alkotható az ABCC6 érfali meszesedésben játszó élettani szerepéről.

Tranziensen expresszáltak 10 missense mutánst in vivo egér májban, és azt az eredményt kapták, hogy ezek közül 4 esetben a plazmamembránba való irányítás jelentősen javult fenilbutirát (4-PBA) beadása után. A fenilbutirát az amerikai Gyógyszerbiztonsági Felügyelet (FDA) által jóváhagyott gyógyszer, melynek kémiai chaperon aktivitása van.

Az ABCC6 mutánsok „irányítása” a plazmamembránba farmakológiai a fenilbutirát gyógyszer használatával allélspecifikus beavatkozásként szolgálhat két, jelenleg gyógyíthatatlan ABCC6-tal kapcsolatos genetikai betegség, a pseudoxanthoma elasticum és a generalized arterial calcification of infancy esetében.

Az ABCG2 multidrog-transzporterrel kapcsolatos kutatásaik azt célozták, hogy megvizsgálják a lipid-környezet hatását a transzporter molekuláris szintű működésére. Kollaborációban tisztítási és rekonstrukció módszert fejlesztettek ki, amely a fenti cél elérést teszi lehetővé.

„ABCC6-Budapest Konferencia, 2013” névvel konferenciát szerveztek szeptember 27–28-án, Budapesten, melyre 41 résztvevő érkezett 9 országból. A konferencia az ABCC6 és a hozzá kapcsolódó betegségek alap- és klinikai kutatásáról szólt, 20 előadással és 7 poszter-előadással. A munkacsoport vezető részt vett a 2012-es PXE Nemzetközi Konferencia (Bethesda MD, USA) szervezésében.

A transzlációs típusú kutatásaik eredményeként egy preklinikai állatmodellt hoztak létre, amely alkalmas a betegséget okozó mutánsok farmakológiai korrekciójának nyomon követésére, és a kalcifikációs betegségek jövőben esetleges gyógyításához nyújt alapvető segítséget.

Lendület Jelátviteli Munkacsoport

2013-ban tovább folytatta a megkezdett sikeres kísérleteket. A munkacsoport alapvetően két ún. állványfehérje családot vizsgál, ezek a Caskin és a Tks fehérjecsaládok. 2013-ban publikálták, hogy a Tks5 fehérje szerepet játszik az EGF jelátvitelében, hasonlóan a 2012-ben általuk bemutatott Tks4 (HOFI) fehérjéhez. EGF hatására a Tks5 fehérje ugyanis tirozin oldalláncokon foszforilálódik, s a sejtmembránhoz transzlokálódik, melyben pleckstrin homológ (PH) doménje játszik fontos szerepet.

Az általuk létrehozott Tks4 génhányos egérből mesenchimális őssejteket izoláltak. Kimutatták, hogy a Tks4 génhányos egerek őssejtjei nem, illetve rosszul képesek csont- és zsírsejtek irányába differenciálódni (készül a kézirat).

A munkacsoport elsősorban felfedező kutatásokat végez, így 2013-ban nem jelentettek be szabadalmat.

Rendezetlen Fehérje Munkacsoport

A munkacsoport a 2013-as évben 14 db tudományos cikket jelentetett meg nemzetközi tudományos folyóiratban. A csoport témája a rendezetlen fehérjékre épül, és mivel a terület igen fiatal, elsősorban alapkutatás folyik a témában nem csak náluk, hanem a világ más laborjaiban is. Ebből következően kutatási témáik bár orvosbiológiai szempontból sokszor relevánsak, még nincsenek közvetlen kapcsolatban semmilyen gazdasági szférában szereplő partnerrel. A rendezetlen fehérjék területén csoportjuk világszínvonalú kutatást folytat, eredményeik egyértelműen a témakör legjelentősebb felfedezései közé tartoznak. A tavalyi évben megjelent saját eredményeik közül kiemelnénk a rendezetlen fehérjék evolúciójával és szerkezeti átalakulásával kapcsolatos munkáikat. Mivel az általuk művelt szakterület igen új, számos együttműködésből is született eredmény a múlt évben. Ezekben az együttműködésekben elsősorban szerkezetbiológiai és bioinformatikai tudásukat hasznosítják, ezzel sokszor kitekintve más tudományterületek felé is.

Fehérjeszerkezet Munkacsoport

Két adatbázis megalkotásában vettek részt. Az egyik egy széleskörű nemzetközi együttműködés keretében készült új adatbázis a rendezetlen fehérjék témakörében. A másik egy korábbi adatbázisuk korszerűsített változata, amit a csoportjukból tavaly „kivált” Lendület-kutatócsoporttal készítettek transzmembrán fehérjék témakörben. Adatbázisaikat évente több tízezerszer keresik fel a világ minden tájáról, ami egyértelműen jelzi hasznosságukat. Mindkettő a 8-as impakt faktorú NAR folyóiratban jelent meg. Megjelent továbbá két eredeti közleményük rendezetlen fehérje, illetve membrán témában.

Sejtarchitektúra Munkacsoport

Tagjai meghatározták a TPPP/p25 (tubulin polymerization promoting protein) fehérje egyes fiziológiás és patológiás kölcsönhatásaiért felelős kötőrégióit. Ehhez rekombináns csonkolt fehérjéket állítottak elő, amelyek nem tartalmazták a rendezetlen N- és/vagy C-terminális részeket. Ezeknek olyan fúziós formáit is elkészítették, amelyek egy fluoreszcens részt is tartalmaztak, ami lehetővé tette e fehérjék sejtszintű vizsgálatát. A kétszeresen csonkolt fehérje elvesztette azt a képességét, hogy kötődjön fő fiziológiás partnereihez, a mikrotubulusokhoz. Ugyanakkor azonban megőrizte az alpha-szinuklein-kötő tulajdonságát és azt, hogy ennek hatására a nevezett fehérje aggregálódik. Ennek nagy valószínűséggel patológiás funkciója lehet. Az, hogy a fiziológiás, illetve patológiás kölcsönhatásokban a TPPP/p25 fehérje más-más részei vesznek részt, egyrészt magyarázzák az ún. neomorphic moonlighting jellegét, másrészt ígéretes lehet szelektíven ható potenciális gyógyszermolekula tervezése szempontjából.

Elméleti munkákban modellezték a citoskeleton sokoldalú funkcióit eukarióta sejtekben. A citoskeletonnak érzékelő, integráló és koordináló szerepe révén hatása van a sejt fenotípusára, a jelátviteli és az energiatermelési folyamatokra. Ezeknek a sokrétű feladatoknak az ellátását elősegíti a mikrotubulusok különböző fehérjékkel történő „dekorálása”, amelyek megszabják dinamikáját. Ugyanakkor ez visszahat a kölcsönható

partnerekre is: például enzimek esetén az aktivitásukra. Elemezték a TPPP/p25 szerepét is e folyamatokban.

Genom Metabolizmus Munkacsoport

Fényt derítettek a genomi integritás és a virulencia gének átíródása közötti szabályozásra *Staphylococcus aureus* esetében. Kiderítették továbbá, milyen módon irányítja a sejtciklus-függő foszforiláció humán fehérjék sejtmagba irányuló transzportját a sejtosztódás után.

Szerkezeti Biofizika Munkacsoport

Kutatói tisztázták a vérben található proteáz inhibitorok szerepét a komplementrendszer lektin útjának gátlásában. Felfedezték, hogy a C1-inhibitor mellett az antitrombin is hatékony gátlószere a MASP-1 és MASP-2 enzimeknek, ezáltal fiziológiás inhibitora a lektin útnak. Jellemezték a MASP-1 és MASP-2 enzimek autoaktiválódási kinetikáját valamint meghatározták a keresztaktivációs reakciók enzimkinetikai paramétereit. Az eredmények felhasználásával finomították a lektin út aktiválódásának korábban, specifikus inhibitorok segítségével meghatározott mechanizmusát. Felfedezték, hogy az aktív enzimek ellen mesterséges evolúciós technikával fejlesztett specifikus inhibitorok kötődnek a zimogén enzimekhez is és gátolják az autoaktivációt. Eredményeiknek az alapkutatáson kívül gyakorlati jelentősége is lehet a gyógyászatban, hiszen a komplementrendszer lektin útjának rendellenes aktiválódása számos népbetegség (például szívinfarktus, szélütés, makuladegeneráció) patogenezisében szerepet játszik.

Nemzetközi együttműködés keretében sikerült meghatározniuk a C1s molekula N-terminális fragmentuma és a C1q molekula kollagén szára által alkotott komplex kristályszerkezetét. A szerkezet alapján új modellt állítottak fel a C1 komplex szerkezetére és közelebb jutottak a klasszikus út aktiválódási mechanizmusának megértéséhez.

A fehérjék funkcionális szabadenergia-hiperfelszíneivel kapcsolatos kutatási projekt kapcsán megmutatták, hogy a szegmenscserélt fehérjék (melyekben a két domént két peptidszakasz kapcsolja össze) evolúciója során funkcionális előnyt jelentett a szegmenscserélt topológia, mert a doménmozgások befagyasztása kisebb entrópiacsökkenéssel jár, mint tandem doméneket tartalmazó fehérjéknél, ez pedig kedvez az olyan funkciók kifejlődésének, amelyek doménzáródást igényelnek. Megmutatták továbbá, hogy a szabadenergia-hiperfelszín elemzéséhez gyakran használt főkomponens-analízis módszer könnyen produkál műtermékeket elégtelen mintavételezés esetén, ezért a mintavételezés minőségének mérése nem mellőzhető az ilyen elemzéseknél. Kifejlesztettek egy rendkívül gyors és pontos módszert fehérjemolekulák entrópiájának becslésére molekuladinamikai szimulációk eredményei alapján. A Szegedi Biológiai Központtal együttműködésben nagyszabású projektet indítottak transzpozon fehérjék szerkezetének predikciójára, s több száz modell alapján új következtetéseket vontak le a fehérjék evolúciójáról. A Semmelweis Egyetemmel együttműködésben áttekintették az allosztérikus jelátvitel mechanizmusait, beleértve a fehérjéről fehérjére történő jelátvitelt is, amely újfajta, kevesebb mellékhatással járó gyógyszerek tervezésére kínál lehetőséget.

A korábbiakban fehérjekrisztallográfiával és QM számolásaikkal jellemzett IPMDH-katalízis sebesség-meghatározó lépésének azonosítására „stopped flow”, illetve „quenched flow” módszerek segítségével felállítottak egy reakciósémát, mely szerint a sebesség-meghatározó lépés a redox reakciót követi és feltehetően azonos a domének kinyílása lassú konformációs lépésével, amely lehetővé teszi a reakciótermékek távozását az aktív centrumból. Egy specifikus fluoreszcens jel segítségével az aktív zárt enzimforma kialakulása kinetikáját

közvetlenül is követni tudták, ezáltal bizonyítván, hogy a redox-lépés bekövetkezéséhez szükséges a domének záródása, azaz az aktív konformáció kialakulása. Az IPMDH működését kísérő alloszterikus változások (doménzáródás) részleteinek felderítésére előállítottak több aktív-centrum mutánst, melyeket SAXS és FRET módszerekkel vizsgáltak. Megállapították, hogy a katalízisben kémiai résztvevő oldalláncok közül számos (Asp 217, Asp 241, Lys 185, Glu 270) jelentős szerepe van az aktív konformáció kialakításában, azaz a doménzáródásban is.

Az év folyamán új kutatási témát indítottak tumorokban és gyulladásos folyamatokban meghatározó szerepet játszó kinázok és foszfodiészterázok fehérje-fehérje kölcsönhatásainak feltérképezésére. A kísérleti munkát olyan fehérjékkel indították (Aurora A, ROCK1, RasSF1A, PDE4 és 5), amelyekkel van már tapasztalatuk, és funkcionálisan releváns fehérje-fehérje kölcsönhatásokban partnerei egymásnak. A munka kezdeti fázisában a fehérjék rekombináns előállítását valósítják meg rovarsejt és *E. coli* expressziós rendszerekben.

Membrán Fehérje Lendület Munkacsoport

Tudományos beszámolójuk szerint mind hazánkban, mind a világon súlyos problémát jelent, hogy a várható élettartam növekedésével a krónikus betegségek előfordulása rohamos növekedésnek indult. A daganatos betegségek egyre gyakoribb előfordulása, a daganatos betegek ellátása komoly egészségügyi és társadalmi kihívást jelent. A Lendület pályázatban meghatározott kutatási terv a sejtek multidrog rezisztenciájáért felelős membránfehérjék szerkezet-funkció összefüggéseit, működési mechanizmusát, valamint a terápiás beavatkozás lehetőségeit kívánja feltárni. A program központi feltevése, hogy a klinikai drogrezisztencia hátterében húzódó molekuláris mechanizmusok egyben a multidrog rezisztens tumorsejtek molekuláris célpontjául szolgálhatnak. Az ERC pályázat kiegészítő támogatásával kiépített HTS labor megkezdte az MDR-szelektív vegyületek szkrínelését. A TTK-n belüli együttműködések keretében elemezték a legígéretesebb molekulák in vitro farmakológiai tulajdonságait (MFI), valamint újabb analógokat terveztek és szintetizáltak (SZKI). Nemzetközi együttműködések keretében vizsgálták a multidrog transzporterekkel kölcsönható vegyületek szerkezet-funkció összefüggéseit, valamint hatásmechanizmusát. Spontán tumort formáló egerekben tesztelték a vegyületek citotoxikus hatását (Onkológiai Intézet). Vizsgálták a tumor- valamint a mezenchimális őssejtek jelentőségét a kemoterápiás szerek elleni rezisztenciában.

Tanulmányozták az ABCB6 fehérje élettani funkcióját sejtes modelleken, valamint génhányos egereken. Megállapították, hogy az ABCB6 megjelenése a vörösvérsejtek membránjában korrelál farmakológiailag releváns polimorfizmusokkal.

Lizofoszfolipid Munkacsoport

Jellemezték a kalmodulin szfingozin-kötődésének erősségét és a kalmodulin szfingozin-általi funkcionális gátlását in vitro, valamint hazai együttműködésben ex vivo. Az eredmények közzlése folyamatban van. Az EPAC1 fehérje DEP-doménjét kifejezték, tisztították és megmutatták, hogy a domén köti a szfingozilfoszforilkolint és a szfingozint. Megkezdtek az EPAC1 DEP-domén funkcionális esszéjének kidolgozását. QCM technika segítségével kinetikailag jellemezték az egyes rekombináns PH-domének (gelsolin, akt1, grp1, nck1) kölcsönhatását lizofoszfátidsavval in vitro. Kidolgozták a Caskin-1 SH3 doménjének rekombináns előállítását és tisztítását, jellemezték a lizofoszfolipidek kötődését a doménhez.

b) Tudomány és társadalom

Membránfehérje Bioinformatika Lendület Munkacsoport

Az általuk végzett kutatások alapkutatások, ezért a társadalom számára nehezen érthetőek. A kapott eredmények és a már kidolgozott, illetve kidolgozandó eljárások azonban rendkívül fontosak a gyógyszerkutatás szempontjából, amit jól mutat, hogy a csoport által fejlesztett és fenntartott szerverek segítségével a világ kutatói évente több százezer becslést végeznek (lásd: <http://counter.enzim.hu>).

Genomstabilitás Lendület Munkacsoport

Vezetőjük az Eötvös Loránd Tudományegyetemen kutató társszerzőkkel együtt közölt egy népszerűsítő cikket a Természet Világa folyóiratban, mely szakszerűen bemutatja DNS-hibajavítás folyamatait. Ezen kívül bemutatta munkáját egy, a Lendület programot bemutató műsorban, a Duna Televízióban, és különböző szintű ismeretterjesztő előadásokat tartott egyetemeken, egy gimnáziumban és a szegedi Eötvös Kollégiumban.

Aktív Transzport Fehérjék Munkacsoport

Vezetőjük közzétett egy cikket a tudományos közlemények publikálásának problémáiról az Élet és Irodalom c. hetente megjelenő lapban.

Jelátviteli Lendület Munkacsoport

Vezetőjük a Lendület pályázat nyertese, így számos fórumon beszámolt kutatásairól, illetve népszerűsítette kutatási területét.

Rendezetlen Fehérjék Munkacsoport

A munkacsoportban kutatott rendezetlen fehérjék témája igen specifikus, újdonsága miatt még az egyetemek biokémia, szerkezetbiológia tanrendjéből is hiányzik, így eredményeik jelentős része igen nehezen kommunikálható a társadalom felé. Csoportjukban számos hallgató végzi tudományos munkáját (szakdolgozó, TDK hallgató) különböző egyetemek (ELTE, BME, PPKE) hallgatóiként, ezzel csoportjuk jelentős mértékben járul hozzá a témakör felsőoktatásban való megismertetéséhez. Úgy gondolják, hogy ez az első lépés a társadalom felé való nyitás útján, melyeket követve tudományukat a jövőben szeretnék szélesebb körben is kommunikálni, elsősorban a fiatalok felé. Következő lépésként előadásokat szerveznek a Kutatók Éjszakáján és középiskolás diákok felé történő nyitást terveznek.

Fehérjeszerkezet Munkacsoport

Részt vettek a laikusok számára is szervezett két, a magyar bioinformatikai kutatások eredményét bemutató konferencia megszervezésében a májusi „akadémiai nagyhét”-hez kapcsolódóan, illetve a novemberi tudomány hónapja alkalmából.

Sejtarchitektúra Munkacsoport

Mivel az eredmények egy része a Richter Gedeon Nyrt. támogatásával született, így ezek hosszú távú célja eleve a gyakorlati hasznosulás is volt, új gyógyszer-célpontok validálása.

Lizofoszfolipid Munkacsoport

Részt vettek a Magyar Tudomány Ünnepe rendezvényen műszeres bemutatóval, amelynek során a fiatalok megismerkedhettek a biomolekulák kölcsönhatását kinetikailag jellemző modern kvarckristály-mikromérleg műszerrel.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2013-ban

Membránfehérje Bioinformatika Lendület Munkacsoport

A munkacsoport 2013-ban nem dolgozott külföldi kutatóhelyet tartalmazó pályázaton. A csoport egy hazai együttműködésben vesz részt az Országos Onkológiai Intézet Sebészeti és Molekuláris Daganatpatológiai Központ professzora által vezetett kutatócsoporttal, a formaldehidbe és parafinba ágyazott daganatsejt minták DNS analízise témában.

Genomstabilitás Munkacsoport

Téma címe: Ultraibolya léziók detekciójára alkalmas proteo-próba fejlesztése

Együttműködő partnerintézmény neve: Department of Cancer Biology, Dana-Farber Cancer Institute, Boston, USA

Egyezmény neve: tudományos együttműködés

A projekt lényege egy ultraibolya fény által okozott DNS léziók hatékony detekciójára képes proteo-próba fejlesztése és felhasználhatóságának vizsgálata. Megmérték, hogy a reagens milyen affinitással köti a különféle léziókat, és bebizonyították, hogy segítségével izolálhatók a DNS-javításért felelős fehérjekomplexek. Az eddigi, már publikált eredmények további tudományos munkát alapoztak meg; az együttműködés folytatódik.

Közös publikációk száma: 1.

Téma címe: A Spartan (C1orf124) gén szerepe a sérült DNS replikációjában

Együttműködő partnerintézmény neve: MTA Szegedi Biológiai Kutatóközpont

Egyezmény neve: tudományos együttműködés

Eredmények, illetve együttműködés értékelése: Az MTA SZBK Mutagenesis és Karcinogenesis kutatócsoportjával elkezdett együttműködés keretében a Genomstabilitás kutatócsoport a Spartan gén szerepét vizsgálja különféle DNS-hibaelkerülő útvonalakban. A csoport által kifejlesztett mutagenesis essét felhasználó genetikai kísérletek ígéretes eredményeket adtak a Spartan fehérje szerepéről a mutációk elkerülésében.

Téma címe: Bioreguláció (biomérnök MSc)

Együttműködő partnerintézmény: Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Egyezmény neve: egyetemi oktatás és vizsgáztatás

Eredmények, illetve együttműködés értékelése: A kutatócsoport vezetője a DNS javítás témaköréről adott elő a Bioreguláció kurzus keretében, és részt vett a vizsgáztatási folyamatban is.

Téma címe: XX. Marosvásárhelyi Tudományos Diákköri Konferencia

Együttműködő partnerintézmény neve: Marosvásárhelyi Magyar Diákszövetség, Marosvásárhelyi Orvosi és Gyógyszerészeti Egyetem

Egyezmény neve: TDK-konferencia-részvétel

Eredmények, illetve együttműködés értékelése: A kutatócsoport vezetője meghívott előadóként bemutatta a csoportnak a DNS javítás témakörében folyó kutatásait, találkozott az egyetem vezetésével, és részt vett a diákok TDK előadásainak zsűrizésében.

Aktív Transzportfehérjék Munkacsoport

„ABCC6-Budapest Konferencia, 2013” névvel konferenciát szerveztek 2013. szeptember 27-28-án, Budapesten, melyre 41 résztvevő érkezett 9 országból. A konferencia az ABCC6 és a hozzá kapcsolódó betegségek alap- és klinikai kutatásáról szólt, 20 előadással és 7 poszter-előadással.

Téma címe: „Modellrendszerek PXE-re”

Együttműködő partnerintézmény neve: Thomas Jefferson University, Philadelphia, USA

Egyezmény neve: NIH együttműködési támogatás, R01 AR055225-06A1

Eredmények, illetve együttműködés értékelése: Új preklinikai állatmodellek az arteriális kalcifikációs betegségek vizsgálatára.

Közös publikációk száma: 1.

A csoportvezető „Molekuláris Biológia” c. PhD-kurzust tart (két másik professzorral) a Semmelweis Egyetemen. A csoportvezető két PhD-hallgató témavezetője az ELTE PhD-programjában, és egy PhD-hallgató témavezetője a Semmelweis Egyetem PhD-programjában.

Jelátviteli Lendület Munkacsoport

Vezetőjük a Magyar Biokémiai Egyesület egyik alelnöke, illetve a Jelátvitel Szakosztály társelnöke, ilyen minőségében folyamatosan részt vesz egy egyesület vezetésében, illetve annak programjai szervezésében. A csoportvezető az Európai Biokémia Társaságok Szövetségének Ösztöndíjbizottságának tagja, így ilyen minőségében szervezett bizottsági ülést Budapesten, 2013 júniusában.

A csoportvezető részt vesz a Semmelweis Egyetemen folyó orvosképzésben rendszeres előadások tartásával. Jelenleg 3 PhD-hallgató munkáját irányítja.

A csoportvezetőt megválasztották az MTA levelező tagjának.

Rendezetlen Fehérje Munkacsoport

Rendszeresen keresik az együttműködési lehetőségeket más kutatócsoportokkal, melyet a későbbiekben részletesen kifejtenek. Csoportjukban számos hallgató dolgozik, mint TDK-hallgató és szakdolgozó, elsősorban az ELTE, BME, PPKE. PhD-hallgatóik az ELTE és a BME doktori képzésében vesznek részt, mely egyetemeken a csoport munkatársai akkreditált témavezetők. Az elmúlt évben 3 új PhD-hallgató kezdte meg a munkáját a csoportban. Csoportjuk a tavalyi évben a korábban elnyert EU-s pályázat keretein belül egy nemzetközi konferenciát szervezett „3rd Annual User group Meeting of BioNMR, NMR and protein dynamics in structural biology” címmel, melyen minden jelentős európai NMR központ képviselője részt vett. A többnapos konferencián 160 kutató vett részt. A munkacsoport vezetője Brüsszelben is fenntart egy kutatócsoportot, mely csoportok a szokásos éves találkozó mellett (mely 2013-ban intézetünkben volt) szoros együttműködésben vannak, számos fiatal kutató kiküldésére van lehetőség, munkájukhoz a kinti infrastruktúrát is használhatják.

Téma címe: Rendezetlen fehérjék általános jellemzése

Együttműködő partnerintézmény neve: VIB Department of Structural Biology, Brüsszel, Belgium

Egyezmény neve: kutatási együttműködés

Eredmények, illetve együttműködés értékelése: A csoportvezető budapesti és brüsszeli csoportja között igen szoros az együttműködés, mely bár a tavalyi év előtt kezdődött, számos új projekt indítása és befejezése kötődik a 2013-as évhez. A munkacsoport tavalyi eredményei elsősorban a rendezetlen fehérjék szerkezeti átalakulásával, annak lehetséges módjaival kapcsolatos.

Közös publikációk száma: 4.

Téma címe: Rendezetlen fehérjék szerepe a rák kialakulásában

Együttműködő partnerintézmény neve: Korean Research Institute of Bioscience and Biotechnology, Daejeon, Dél-Korea

Egyezmény neve: kutatási együttműködés

Eredmények, illetve együttműködés értékelése: A két csoport együttműködése a rendezetlen fehérjék szerkezeti sokaságának kutatására irányul. Míg a munkacsoport a bioinformatikai és a fehérje-interakció jellemzésben erős, a koreai partner NMR műszerével és annak rutinszerű használatával járul hozzá az együttműködéshez. Bár a két csoport már korábban is együttműködött, idén újra elnyerték a további 3 évre szóló támogatást, az említett projekttel.

Közös publikációk száma: 2

Téma címe: EEG eredmény kiértékelő programfejlesztés

Együttműködő partnerintézmény neve: Semmelweis Egyetem, Gyógyszerhatástani Intézet, Budapest

Egyezmény neve: kutatási együttműködés

Eredmények, illetve együttműködés értékelése: Bár a két csoport együttműködése a 2013-as évnél korábban indult, számos új projekthez volt szükséges az együttműködés idén is. Az egyik legjelentősebb 2013-ban lezárul projekt, melyben finn és svéd csoportok is részt vettek a narkolepszia betegség kialakulásáról szól.

Közös publikációk száma: 1.

Téma címe: Izomfehérjék szerkezeti feltérképezése

Együttműködő partnerintézmény neve: Pécsi Tudományegyetem, Orvostudományi Kar, Biofizika Tanszék, Pécs

Egyezmény neve: kutatási együttműködés

Eredmények, illetve együttműködés értékelése: A pécsi csoport megkeresette a munkacsoportot az általuk vizsgált fehérjék rendezetlen szakaszainak feltérképezésére és e szakaszok lehetséges funkciójának megadására. A munkacsoport tagjai feltérképezték a közel 1000 aminosavas SALS fehérjét, valamint az ADF-H domének egy szerkezeti sajátosságát is megtalálták. Jelenleg számos biokémiai és biofizikai kísérlet folyik az általuk talált funkciók megerősítésére.

Közös publikációk száma: 1.

Téma címe: A Shadoo fehérje (RXXX)₈ motívumának funkcionális és evolúciós vizsgálata

Együttműködő partnerintézmény neve: MTA TTK MFI

Egyezmény neve: kutatási együttműködés

Eredmények, illetve együttműködés értékelése: A prion fehérje funkcionális homológjaként számon tartott Shadoo fehérje kutatásában a kooperációs partner már évek óta élen jár. A

munkacsoport az együttműködésben egy a fehérjére specifikus régió evolúciós változását, lehetséges funkcióit vizsgálta.
Közös publikációk száma: 1.

Fehérjeszerkezet Munkacsoport

Téma címe: 1. Transzmembrán fehérjék és membránok elméleti szerkezet vizsgálata; 2. Rendezetlen fehérjék funkcionális helyei
Együttműködő partnerintézmények neve: School of Medicine at Mount Sinai, New York, USA; Australian National University, Canberra, Australia.
Lendület Transzmembrán Bioinformatikai Csoport (MTA TTK EI)
Lendület Fehérje Csoport, Molekuláris Farmakológiai Intézet MTA TTK
Eredmények, illetve együttműködés értékelése: A csoport munkáinak jelentős része készül hazai és nemzetközi együttműködésben. Ezek a bioinformatikai munkák nem eszközigényesek, sőt a megbeszéléseket is többnyire a világháló segítségével tartják, így a maximális rugalmasság érdekében ezek az együttműködések informálisak, a külvilág számára csak a közös publikációk révén jelennek meg.
Közös publikációk száma: 4.

Sejtarchitektúra Munkacsoport

Téma címe: Moonlighting Function of the Tubulin Cytoskeleton
Együttműködő partnerintézmény neve: Faculté des Sciences de l'Université de Rouen, Franciaország
Eredmények, ill. együttműködés értékelése: Az együttműködés több éve tart, kölcsönös látogatásokkal. Elméleti munka, melynek témája a citoszkeleton sokoldalú funkcióinak modellezése eukarióta sejtekben. A citoszkeletonnak érzékelő, integráló és koordináló szerepe révén hatása van a sejt fenotípusára, a jelátviteli és az energiatermelési folyamatokra.
Közös publikációk száma: 2 (egy könyvfejezet és egy folyóiratcikk).

Téma címe: Kutatási javaslat gyógyszer célpontok azonosítására és validálására, és azok bizonyítása
Együttműködő partnerintézmény neve: Richter Gedeon Nyrt., Budapest
Egyezmény neve: RG-IPI-2011/TP5-001 szerződés
Eredmények, illetve együttműködés értékelése: Jelen munka két éve tart; az eredmények részben nem publikusak; másrészt viszont van egy elfogadott publikáció (folyóiratcikk), amelyhez megkapták a közlési engedélyt. Ebben meghatározták a TPPP/p25 fehérje egyes fiziológiás és patológiás kölcsönhatásaiért felelős kötőrégióit. Ez utóbbi potenciális gyógyszer-célpont lehet.

Téma címe: Identification of motives mediating alternative functions of the neomorphic moonlighting TPPP/p25
Együttműködő partnerintézmény: ELTE TTK Kémiai Intézet
Eredmények, illetve együttműködés értékelése: Meghatározták a TPPP/p25 fehérjének egyes fiziológiás és patológiás kölcsönhatásokért felelős kötőrégióit. Ez utóbbi potenciális gyógyszer-célpont lehet.
Közös publikációk száma: 1.

Téma címe: Structural diversity of the disordered TPPP/p25 and its catalytically active forms
Együttműködő partnerintézmény: ELTE TTK Biológia Doktori Iskola
Egyezmény neve: doktori iskola törzstag

Eredmények, illetve együttműködés értékelése: 1 PhD-fokozat megszerzése.
Közös publikációk száma: 1 (PhD-értekezés)

Téma címe: Diplomamunkák

Együttműködő partnerintézmény: Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Eredmények, illetve együttműködés értékelése (néhány sorban): 1 MSc és 1 BSc diploma megszerzése.

Genom Metabolizmus Munkacsoport

Téma címe: A Plasmodium falciparum CTP:foszfokolin citidililtranszferáz (CCT) enzim szerkezeti karakterizálása

Együttműködő partnerintézmény: The Laboratory Dynamics of Membrane Interactions in Normal and Pathologic Cells, CNRS-Université Montpellier 2 laboratórium. Franciaország

Egyezmény neve: Részt vevő kutatói együttműködésben az NIH (NKTH)-ANR AddMal kétoldalú magyar–francia konzorciális pályázat keretében.

Eredmények, illetve együttműködés értékelése: A kutatás célja a *Plasmodium falciparum* CTP:foszfokolin citidililtranszferáz (CCT) enzim szerkezeti karakterizálása, a kórokozó fertőzésében betöltött szerepének jobb megismerése céljából. Ezen belül az enzim szerkezeti katalitikus hatékonyságában kulcsszerepet játszó elemek megismerését végzik különféle biofizikai módszerekkel, valamint az enzim-szubsztrát és szubsztrát-analóg komplexek vizsgálatát végzik. A 2013-as évben sikerült a PfCCT enzim alapvető biokémiai vizsgálatához elvégezniük a szükséges kísérleteket, majd a munkát a FEBS Journalban publikálták. Ezután az enzim aktív helyének kolin helyén folytattak helyspecifikus mutagenézis tanulmányt a ligand kötés szerkezeti értelmezéséhez.

Közös publikációk száma: 1.

Téma címe: Biostruct-X

Együttműködő partnerintézmény neve: European Molecular Biology Laboratory (EMBL) Hamburg Outstation c/o DESY, Hamburg, Németország

Egyezmény neve: FP7 Infrastructure

Eredmények, illetve együttműködés értékelése: Meghatározták a dUTPáz enzimátikus működésének elemi lépéseit, az intermedier állapotok atomi felbontást közelítő 3D szerkezetével.

Közös publikációk száma: 1.

Szerkezeti Biofizika Munkacsoport

Felsőoktatási tevékenység: Pázmány Péter Katolikus Egyetem Műszaki Informatika Szak: biofizika és molekuláris biológia tárgyak oktatása mérnök informatikus és bionikus hallgatók számára, biokémia tárgy oktatása, TDK-hallgatók témavezetése.

ELTE TTK Biológus szak: Biofizika tárgy oktatása, valamint Fehérjék fizikai vizsgálata tárgy oktatása.

ELTE Biológiai Doktori Iskola: PhD-hallgatók témavezetése.

BME Doktori Iskola: PhD-hallgató témavezetése.

BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar: BSc-hallgató témavezetése.

Corvinus Egyetem: BSc-hallgató témavezetése.

Membrán Fehérje Lendület Munkacsoport

Téma címe: Targeting the Achilles heel of cancer

Együttműködő Partnerintézmény: CNRS-Université Lyon

Egyezmény neve: NIH-ANR pályázat

Együttműködés értékelése: Megállapították, hogy az ABCG2 nem képes glutation exportra, így ez a mechanizmus a kollaterális szenzitivitásban nem valószínű. Megállapították a chromone-származékok ABCG2 fehérjét gátló hatásainak szerkezet-funkció összefüggéseit.

Közös publikációk száma: 2.

Téma címe: ABCB6 patofiziológiája

Együttműködő partnerintézmény: Curie Intézet

Egyezmény neve: közös pályázat benyújtása (Franciaországban)

Együttműködés értékelése: Az izgalmas együttműködésben vizsgálják az ABCB6 melanogenezisben játszott szerepét. A csoportban 5 PhD-hallgató dolgozik, köztük egy külföldről érkezett (Bonn, Németország).

Lizofoszfolipid Munkacsoport

Téma címe: Biofizika, MSc-kurzus biomérnök hallgatóknak

Együttműködő partnerintézmény neve: BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Téma címe: Biológiai és biomimetikus anyagok, MSc-kurzus vegyészmérnök hallgatóknak

Együttműködő partnerintézmény: BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

IV. A 2013-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A pályázat megnevezése: OTKA K (108630)

A pályázati téma megnevezése: Biological functions and mechanism of action of WFIKKN1 and WFIKKN2 proteins

A pályázati támogatás mértéke: összesen: 44 M Ft (2013-ban: 11 M Ft)

A pályázat 2013. szeptember 1-jén kezdődött. Az eltelt négy hónapban elkezdtek a WFIKKN1 és WFIKKN2 expressziós mintázatának meghatározását transzkripciós és fehérje szinten; a ProGDF11 és GDF11 prodomének expresszióját bakteriális expressziós rendszerben; vizsgálták a WFIKKN1 és WFIKKN2 fehérjék hatását a promiosztatin furin által történő hasítására.

A pályázat megnevezése: NIH együttműködési RO1 kutatási támogatás (R01 AR055225-06A1)

A pályázati téma megnevezése: Modellrendszerek PXE-re

A pályázati támogatás mértéke: 38.000 USD/év.

Létrehoztak egy preklinikai állatmodellt, mellyel arteriális kalcifikációs zavarok vizsgálhatók. Nemzetközi konferenciát szerveztek Budapesten ebben a témában.

A pályázat megnevezése: KRCF-HAS

A pályázati téma megnevezése: A rendezetlen fehérjék szerepe a rák kialakulásában

A pályázati támogatás mértéke: 2013–2016: 100.000.000 KRW (~25 M Ft) / év

A pályázat a 2013 év végén kezdődött, így annak keretében az előkészületek folytak, az érdemi, elsősorban bioinformatikai módszereken alapuló munka 2014 elején kezdődik meg.

A pályázat megnevezése: PD OTKA (PD 108772)

A pályázati téma megnevezése: Kötőfelszín és kötéseerősség összefüggésének feltérképezése rendezetlen fehérjékben

A pályázati támogatás mértéke: 2013–2016: 24,735 M HUF, 2013-ban: 2,748 M Ft

A pályázat a 2013-as év őszén kezdődött. Elvégezték a további analízishez szükséges nagy mennyiségű adat összegyűjtését, így 2014-ben az adatok kiértékelése megkezdődhet.

A pályázat megnevezése: OTKA (K108798)

A pályázati téma megnevezése: Rendezetlen fehérjék funkcionális helyei

A pályázati támogatás mértéke: 42 M Ft (2013-ban: 3,56 M Ft)

A pályázathoz kapcsolódó projektek közül a legjelentősebb eredményeket a rák és a rendezetlenség kapcsolatának vizsgálatában érték el. Munkájuk során a COSMIC szomatikus rák mutációkat tartalmazó adatbázis adatait elemezve azonosítottak több olyan fehérjét is, amelyek szerepet játszhatnak a rák kialakulásában. Ezek mellett kidolgoztak egy módszert, amely képes a mutációs mintázat alapján, automatikus módon azonosítani potenciális driver mutációkat, melyek feltételezhetően ténylegesen felelősek a rák kialakulásáért. A munka másik gyakorlati szempontból fontos kimenete egy olyan új webes felület, amely lehetővé teszi a mutációs adatok és különböző szerkezeti és funkcionális információk, illetve egyéb genomszintű adatok integrálását és megjelenítését fehérje pozíciókra levetítve. Ezeket az eredményeket is a jövő évben tervezik publikálni.

A pályázat megnevezése: European Concerted Research Action: COST (TD1304)

A pályázati téma megnevezése: Zinc-Net

A pályázati támogatás mértéke 2013-ban: 117500 Ft

Részvétel az alakuló ülésen 2014 októberében. A 2014-ben tartandó budapesti ülés előkészítése.

A pályázat megnevezése: OTKA (108642)

A pályázati téma megnevezése: Tumorokban és gyulladáshoz kapcsolódó folyamatokban meghatározó szerepet játszó kinázok és foszfodiészterázok fehérje-fehérje kölcsönhatásainak feltérképezése

A pályázati támogatás mértéke: összesen: 74076000 (2013-ban: 6225667 Ft)

Az év folyamán új kutatási témát indítottak tumorokban és gyulladáshoz kapcsolódó folyamatokban meghatározó szerepet játszó kinázok és foszfodiészterázok fehérje-fehérje kölcsönhatásainak feltérképezésére. A kísérleti munkát olyan fehérjékkel indították (Aurora A, ROCK1, RasSF1A, PDE4 és 5), amelyekkel van már tapasztalatuk, és funkcionálisan releváns fehérje-fehérje kölcsönhatásokban partnerei egymásnak. A munka kezdeti fázisában a fehérjék rekombináns előállítását valósítják meg rovarsejt és E. coli expressziós rendszerekben.

A pályázat megnevezése: K+F Versenyképességi és Kiválósági Szerződések (VKSZ_12) (VKSZ_12-1-2013-0001)

A pályázati téma megnevezése: Bioszimiláris monoklonális antitestek fejlesztése

A pályázati támogatás mértéke: összesen: 480 M Ft (2013-ban 0 Ft)

A pályázati munka 2014. január 1-jén indul.

V. A 2013-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Herbert C, Schieborr U, Saxena K, Juraszek J, De Smet F, Alcouffe C et al. (19, Tompa P): Molecular mechanism of SSR128129E, an extracellularly acting, small-molecule, allosteric inhibitor of FGF receptor signaling. *Cancer Cell*, 23(4): 489-501 (2013) <http://real.mtak.hu/7129/>
2. Leveles I, Nemeth V, Szabo JE, Harmat V, Nyíri K, Bendes AA et al. (7, Papp-Kádár V, Zagyva I, Róna G, Tóth J, Vértessy B): Structure and enzymatic mechanism of a moonlighting dUTPase. *Acta Crystallographyca Section D: Biological Crystallography*, 69(12): 2298-2308 (2013) <http://real.mtak.hu/9333/>
3. Róna G, Marfori M, Borsos M, Scheer I, Takács E, Tóth J et al. (7, Buday L, Vértessy BG): Phosphorylation adjacent to the nuclear localization signal of human dUTPase abolishes nuclear import: structural and mechanistic insights. *Acta Crystallographyca Section D: Biological Crystallography*, 69(12): 2495-505 (2013) <http://real.mtak.hu/9317/>
4. Pomozi V, Le Saux O, Brampton CN, Apana A, Iliás A, Szeri F et al. (6, Szakács G, Váradi A): ABCC6 is a basolateral plasma membrane protein. *Circulation Research*, 112(11): 148-51 (2013) <http://real.mtak.hu/7119/>
5. Girija UV, Gingras AR, Marshall JE, Panchal R, Sheikh MA, Gál P et al. (4): Structural basis of the C1q/C1s interaction and its central role in assembly of the C1 complex of complement activation. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 110: 13916-13920 (2013) <http://real.mtak.hu/id/eprint/7104>

MTA TERMÉSZETTUDOMÁNYI KUTATÓKÖZPONT
KOGNITÍV IDEGTUDOMÁNYI ÉS PSZICHOLÓGIAI INTÉZET

1132 Budapest, Victor Hugo u. 18-22.; 1394 Budapest, Pf. 398

telefon: (1) 354 2290; fax: (1) 354 2416

e-mail: ulbert.istvan@ttk.mta.hu; honlap: www.ttk.mta.hu

igazgató: Czigler István; 2014.január 1-jétől: Ulbert István

I. A kutatóhely fő feladatai 2013-ban

- A vizuális emlékezeti rendszer működésének szabályosságainak vizsgálata.
- A párhuzamosan működő hangforrások szétválasztásának modellezése.
- Munkaemlékezeti folyamatok agyi mechanizmusainak hálózat-alapú elemzése időseknél és enyhe kognitív zavarban szenvedő betegeknél.
- Az öregedés során romló kognitív funkciók javításának lehetőségei és ezek pszichofiziológiai módszerekkel történő követése.
- Beszédmegértési kutatások. A szóhangsúly feldolgozása normál időre született és koraszülött csecsemőknél.
- Az aktív látás vizsgálata, a természetes olvasás és a diszlexia neurobiológiai hátterének feltárása.
- Az fMRI biomarkerek fejlesztése a kognitív funkciók hatékonyságának mérésére.
- Az epilepsziás működés in vitro vizsgálata patkány és emberi agyszeleteken. A szinkron populációs aktivitás elemzése, új elektródák fejlesztése.
- A kutya társas érzékenységének kognitív és neurohormonális mechanizmusainak kutatása.
- A csecsemők korai, fejlődési rizikót jelentő dezorganizált kötődésének kialakulásában szerepet játszó folyamatok vizsgálata.
- A magyar történelmi események és kollektív traumák narratív elemzése. Izolált kiscsoportok kommunikációjának vizsgálata.
- A győzelemmel és a veszteséssel kapcsolatos megküzdési mintázatok kultúrközi összehasonlítása.
- A pszichoanalízis történeti elemzése.

II. A 2013-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Pszichofiziológiai vizsgálatokban kimutatták, hogy a vizuális emlékezeti rendszer képes automatikusan regisztrálni perceptuális kategória jellegű szabályosságokat, mint amilyen a kétoldalú szimmetria. Ez az emlékezeti rendszer képes arra, hogy regisztrálja az arcok jellegzetes férfi-nő kategorizációját. Az automatikusan működő vizuális emlékezeti rendszer érzékenyebb új ingersajátságok megjelenésére, mint hiányukra, ami olyan sajátság, melyet hagyományosan a figyelmi rendszernek tulajdonítanak.

Lendület Beszédhang Szétválasztási Kutatócsoport

Kimutatták, hogy a cselekvéssel kapcsolatos hallási feldolgozási aktivitáscsökkenés nem perifériális folyamatok eredménye, viszont kialakulásában nem játszanak szerepet önkéntes figyelmi folyamatok sem, valamint a cselekvés hétköznapi életben játszott hatáskeltő szerepe sincs rá hatással. Demonstrálták, hogy az elterelődés megakadályozása alapvetően önkéntes folyamatok eredménye, amelyeket kognitív költséghatékonysági elvek befolyásolnak.

Megalkották és tesztelték párhuzamosan működő hangforrások szétválasztásának a hangok előrejelzésére és a lehetséges források versenyére épülő komputációs modelljét. Az eredmények továbbfejlesztés után megalapozhatják intelligens, a hangforrások szétválasztására képes hallókészülékek fejlesztését.

Megállapították, hogy képingerekhez hasonlóan a szóingerekkel kiváltott potenciálokban is érvényesülnek érzelmi hatások, melyek közül a negatív töltésűek a fiatalokban kifejezettebbek. Kockázatvállalással járó helyzetben a hibás döntéseket jellemző kiváltott potenciál komponens idős korban jelentős mértékben változik, de független a tét nagyságától.

Kognitív tréninggel a figyelmi és emlékezeti funkciók javíthatók, a korcsoportok közötti különbség csökken, vagy meg is szűnik. A feladat nehézségétől függően az idős kiváltott potenciál válaszai eltérnek a fiatalokétól. Kimutatták, hogy munkamemória feladat közben a frontális és hátsó kérgi területek (fázis-késéssel jellemezhető) kapcsolatának erőssége a végrehajtás sikerességétől függ, és idős korban csökken.

Igazolták, hogy enyhe kognitív zavarban szenvedő betegekben a frontális régió kapcsolata más kérgi területekkel már egy év elteltével is romlik. A gráfelméleti mutatók elemzése alapján megállapították, hogy számolási feladat (kivonás) végzése során a domináns féltékében következtek be jelentősebb változások, melyek nem tértek el a fiatal és idős korcsoportban. Az emlékezeti fenntartáshoz és előhíváshoz köthető legjelentősebb életkori eltérések a frontális kontrollfunkciók hanyatlására utalnak időskorban.

A szóhangsúly feldolgozásával kapcsolatosan kimutatták, hogy a különböző hangsúlymintázatú szavak eltérő agyi válaszokat váltanak ki attól függően, hogy a hangsúlymintázat mennyire felel meg a magyar nyelvre jellemző hangsúlyozási szabályosságoknak. A szóhangsúly feldolgozásának csecsemőkori fejlődésével kapcsolatos vizsgálatok eredményei azt mutatták, hogy a normál időre született és koraszülött csecsemők agyi elektromos válaszai különböznek egymástól a szabálytalan hangsúlymintázatú szavak feldolgozása esetén, de nincs hasonló eltérés a beszédhangok feldolgozásakor. Ez arra utal, hogy az intrauterin tapasztalatok eltérően befolyásolják a beszédhangok és a prozódiai jellemzők feldolgozásának fejlődését.

Új módszertani keretrendszer dolgoztak ki, amivel - non-invazív felszíni EEG jelek segítségével - az aktív látás, és ezen belül a természetes olvasás elektrofiziológiai korrelátumai vizsgálhatóak a szemmozgás paraméterek és a szemmozgásból adódó műtermékek megfelelő kontrollálása mellett. Ez lehetővé teszi az aktív látás mechanizmusainak vizsgálatát, a kapott eredmények pedig hozzájárulhatnak a természetes olvasás és a diszlexia neurobiológiai hátterének mélyrehatóbb megismeréséhez.

A tompalátásban megfigyelhető neurális deficit látómezei kiterjedtségének vizsgálatával kimutatásra került, hogy a centrális látási deficittel jellemzett tompalátás esetén a perifériás

látómezőben is kimutatható elektrofiziológiai károsodás, amely a neurális jelek időbeli összerendezettségét érinti. Ez kvalitatíve különbözik a centrális látómezőben található deficittől, mely mind az időbeli összerendezettséget, mind az idegi válaszok intenzitását érinti. Az eredmények hozzájárulnak a tompalátás alapjainak jobb megértéséhez, mely hatékonyabb terápiás lehetőségeket biztosít a betegek számára, akik jelenleg a társadalom 2-4%-át teszik ki.

Azt találták, hogy a specifikus agyterületek közötti intrinzik funkcionális konnektivitásának erőssége nem csak a munkamemória egyéni kapacitásával, de a memória feladat-függő specifikus kérgi fMRI válaszok nagyságával is korrelál. Az eredmények arra engednek következtetni, hogy a nyugalmi állapotban mért intrinzik funkcionális konnektivitás módszerek alapját képezhetik az emberi kognitív funkciók hatékonyságának mérésére alkalmas fMRI biomarkerek fejlesztésének.

Humán epilepsziás agyszeletekben kimutatták, hogy mind a kontroll (nem epilepsziás), mind az epilepsziás minták generálnak spontán szinkron populációs aktivitásokat, melyek egy mezőpotenciál tranzienssel, a rajta ülő magas frekvenciás oszcillációkkal, valamint megnövekedett soksejt aktivitással jellemezhetők. Intracelluláris egysejt elvezetéssel kimutatták, hogy a vizsgált sejtek többsége depolarizált állapotban volt az események során, és hogy az in vitro populációs aktivitás generálásában szerepet játszik a glutamaterg és a GABAerg rendszer. Eredményeik hozzájárulhatnak az idegsejtek szinkronitásáról és kapcsolatrendszeréről alkotott tudásához, és rávilágíthatnak arra, hogyan billen át a fiziológias szinkronitás patológias szinkronitássá.

Patkányokon tesztelték az új fejlesztésű in vivo intracraniális (fejbe és/vagy agyba beültetett) mikroelektródákat. Fő céljuk egy olyan szilícium elektróda létrehozása, amellyel az egyes sejtek kétdimenziós aktivitási térképe is elkészíthető.

A kutya társas érzékenységének kognitív és neurohormonális mechanizmusait kutatva sikerült kimutatni, hogy az oxytocin receptor gén polimorfizmusai összefüggésben vannak kutyák emberre irányuló szociális viselkedésével, az orrspray formájában alkalmazott oxytocin hormonkezelés pedig növeli a kutyák társas-együttműködési hajlamát, az ambivalens ingerek „optimista” megítélését és sajátos módon befolyásolja az emberi arc-érzelmek vizuális feldolgozását. Kidolgozták az agyi képalkotó eljárás (fMRI) éber állapotú kutyákra való alkalmazását, valamint egy könnyen replikálható non-invazív eljárást, mellyel a kutyák alvás közbeni agyi aktivitása mérhető (poliszomnográfias EEG módszer).

A csecsemők korai, fejlődési rizikót jelentő dezorganizált kötődésének kialakulásában szerepet játszó folyamatok vizsgálata során kimutatásra került, hogy az anya atipikus viselkedése, zavart érzelmi kommunikációja összefügg a dezorganizált, illetve a bizonytalan-rezisztens kötődés kialakulásával, különösen azokban az esetekben, amikor a csecsemő a D4 dopamin receptor gén, az anya pedig katekol-O-metiltranszferáz gén bizonyos hajlamosító változatát hordozzák. Mivel a dezorganizált kötődés összefüggést mutat gyermek- és fiataalkori pszichopatológiával, így kialakulásának és hajlamosító tényezőinek felderítése különös jelentőséggel bír.

A magyar történelmi események szociális reprezentációjának narratív elemzése révén megállapították, hogy a magyar nemzeti identitás szerveződésének meghatározó jellemzője a kollektív áldozati szerep.

A kollektív traumák pszichológiai folyamatainak vizsgálatára kidolgozott Narratív Trauma Elaboráció Modellt empirikusan ellenőrizték a trianoni trauma sajtóban megjelenő szövegeinek elemzésével, melyek azt mutatják, hogy a történelmi trauma teljes feldolgozása nem történt meg.

Kidolgozták a Nyelvi kategória modell kategóriáit angol nyelvű szövegben automatikusan elemző eljárás béta verzióját.

Izolált kiscsoportok kommunikációjának vizsgálata során a csoportdinamika feltárására szolgáló, orosz és angol nyelvű szövegek automatikus tartalomelemzésére alkalmas eszközt fejlesztettek ki. Ennek segítségével kimutatták, hogy a Mars-500 űrszimulációs kísérletben az 520 napra összezárt legénység autonómiája nőtt; idői tudatossága az ingerszegény időszakokban csökkent, és csoportkohéziója a küldetés második felében csökkent.

A győzelemmel és a veszteséssel kapcsolatos megküzdési mintázatok esetén a kínai-magyar kulturális összehasonlító vizsgálat feltárta, hogy az adaptív megküzdési viselkedés mintázatokat a magyar csoportban az egyén érzelmei, a kínai csoportban a társadalmi elvárások és normák közvetítik. Míg a magyar csoportban azok képesek adaptívan megküzdni a veszteséssel, akiknek a reakciói aktiváló érzelmekből tevődnek össze, addig a kínaiak esetében akár aktiválóak, akár deaktiválóak az érzelmek, a vesztesézből való talpra állás és továbbfejlődés, mint viselkedés megvalósul. A magyar középiskolások inkább tekintik a riválist ellenségnek, mint a kínaiak.

Magyar viszonylatban azt találták, hogy a vidéki egyetemistákra kevésbé adaptív győzelemmel és veszteséssel való megküzdési mintázatok jellemzőek és inkább tekintik a riválist ellenségnek, mint a budapestiek. Akadémikusan tehetséges, kutatásokban, illetve versenyeken résztvevő fiatalok adaptívabb győzelemmel és veszteséssel való megküzdési mintázatokkal rendelkeznek, mint átlagos képességekkel rendelkező társaik.

b) Tudomány és társadalom

Mivel öregkorban általában problémát jelent a hallás a sok hangforrással jellemezhető környezetekben, a hangforrások szétválasztásával kapcsolatos kutatások elősegíthetik az öregedés ezen hatásainak orvoslását. A hangforrások szétválasztásával kapcsolatos kutatások ez évi eredményeiről beszámoltak a sajtónyilvánosság előtt lezajlott Lendület-konferencián. Az öregedéssel együtt járó pszichofiziológiai változásokról a „Harmadik Kor Egyetemén” (ELTE) tartottak előadást.

Szakmai lektorként hozzájárultak egy a manapság oly divatos 3D-s mozizás, TV nézés során felmerülő fizikai és fiziológiai problémákat, jelenségeket taglaló tudományos ismeretterjesztő internetes írás megjelenéséhez. Ezzel a térlátás fiziológiai hátterének laikusok általi megértését segítették elő.

Előadást tartottak a Kutatók Éjszakája rendezvénysorozat keretében „Olvasás az agyban” címmel, amelynek témája az olvasás agyi folyamatainak tanulmányozása párhuzamos EEG-vel és szemmozgás-követéssel.

A Pécsi Tudományegyetem Bölcsészettudományi Kara szervezésében megrendezett Határon Túli Magyarok Interdiszciplináris Nyári Egyetemén bemutatták a narratív szociálpszichológiai megközelítés elméletét és módszerét.

Számos interjút adtak több rádióknak (Klub Rádió, Kossuth Rádió, Szonda - Tudományos Magazin) és újságnak (Népszabadság) az együttműködésről és versengésről, valamint a Japán - Magyar Baráti Társaságnak, illetve középiskolásoknak is tartottak előadásokat e témában (Szent István Gimnázium, ELTE Radnóti Miklós Gyakorlóiskola). Az LMBT történeti hónap keretében a lesbikusságról tartottak előadást a Brit Nagykövetségen. Rádió- és újságinterjút (ÉS) adtak jelenlegi társadalmi folyamatok kritikai elemzéséről.

Interjút készítettek neves kutatókkal és gyakorlati szakemberekkel az együttműködő állampolgárról a Kritika és a Fejlesztő Pedagógia folyóiratokba, kritikai könyvismertetőket írtak (ÉS) és a tanulási nehézségek témakörében tudományos ismeretterjesztő írásokat jelentettek meg (Magyar Tudomány, Mindennapi Pszichológia). A tudománykommunikáció részeként folyóirat-bemutatókat (Imágó), kerekasztal-beszélgetéseket vezettek a Nyitott Műhelyben és az Ünnepi Könyvhétben.

A csecsemőkori fejlődés alapvető fontosságú a társadalom pszichoszociális egészsége szempontjából. A korai kötődési kapcsolatokra vonatkozó tévhitek eloszlatása érdekében beszélgetés jelent meg egy népszerű gyermeknevelési portálon (<http://babafalva.hu/tenyek-es-tevhitek-a-korai-kotodesrol/>).

A Mindennapi Pszichológia folyóiratban megjelent egy tudományos népszerűsítő cikk (2013. január), valamint részt vállaltak egy német filmes vállalkozás (WTS Mixed Media) által forgatott, és 2013 tavaszán bemutatott tudományos ismeretterjesztő filmben (Können Tiere Denken?), mely világszerte több ismert kutatócsoport munkájának megfilmesítésével készült, és az állati, illetve emberi gondolkodás sajátosságaihoz próbálja közelebb vinni a laikus érdeklődőket. Több alkalommal adtak a kognitív fejlődésre vonatkozó kutatásokkal kapcsolatban interjút rádió (MR1) és televízió (RTL, TV2) csatornák számára, valamint különböző folyóiratoknak (Innotéka Magazin, Elixír).

Népszerűsítő előadásokat tartottak a Magyar Tudomány Ünnepe alkalmából megrendezett Családi Kutya Program Konferencián, melyben a kutatási program eredményeit ismertették a téma iránt érdeklődő nagyközönség előtt. A kutatás népszerűsítését és kívülállók általi elfogadottságának növelését szolgálja a szerkesztésükben havonta megjelenő hírlevél, az ún. Családi Kutya Program.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2013-ban

Téma címe: Auditory Cognitive Neuroscience (ACN) Erasmus Mundus Action 2 Partnership
Együttműködő partnerintézmény neve: Leipzig University, Germany
Egyezmény neve: Grant Agreement nr 2012-5538 / 001 – 001-EM Action2 – Partnership
Eredmények, illetve együttműködés értékelése: Lezajlott a szerződéskötés és az első utazási pályázatok kiírásra kerültek.

Téma címe: How humans separate concurrently active sound sources
Együttműködő partnerintézmény neve: Pavlov Institute of Physiology of the Russian Academy of Sciences, St. Petersburg, Russia
Egyezmény neve: Az MTA és az Orosz Tudományos Akadémia közötti csereprogram
Eredmények, illetve együttműködés értékelése: Az orosz partner két hónapot töltött a TTK-ban. Az első kísérletből készült cikk megjelent. A második kísérlet adatainak elemzése megtörtént.
Közös publikációk száma: 1.

Téma címe: Primacy bias on the Mismatch Negativity

Együttműködő partnerintézmény neve: University of Newcastle, Australia

Eredmények, illetve együttműködés értékelése: A kísérleti adatok elemzése megtörtént. Egy cikk megjelent; egy másikat közlésre benyújtottunk.

Közös publikációk száma: 1.

Téma címe: Az aktív látás elektromágneses korrelátumainak vizsgálata

Együttműködő partnerintézmény neve: Cognition and Brain Sciences Unit, Medical Research Council, Cambridge, Egyesült Királyság

Eredmények, illetve együttműködés értékelése: A 2013-as évben megtörtént a kutatási téma szempontjából releváns eszközpark és szellemi erőforrás felmérése a két intézetben, az együttműködés lehetséges formáinak meghatározása, valamint, részben megvalósult a szükséges tudástranszfer.

Téma címe: A történelmi reprezentációk szociálpszichológiai dinamikájának vizsgálata a kibővített Európai Unióban (IS1205)

Együttműködő partnerintézmény neve: Free University of Brussel

Egyezmény neve: COST network típusú projekt

Eredmények, illetve együttműködés értékelése: Az EU által támogatott COST kutatás (IS1205 A történelmi reprezentációk szociálpszichológiai dinamikájának vizsgálata, a kibővített Európai Unióban) keretein belül munkacsoportot hoztak létre az európai nemzetek történelmi eseményeire vonatkozó szociális reprezentációk narratív vizsgálatára. A munkacsoportban 13 ország képviselőjében 34 szociálpszichológus, illetve történész vesz részt.

Közös publikációk száma: 2 konferencia előadás.

Téma címe: Izolált kiscsoport és az irányító központ közötti kommunikáció automatizált tartalomelemzési módszerének kidolgozása és kísérleti alkalmazása

Együttműködő partnerintézmény neve: Institute for Biomedical Research, Moszkva, Oroszország

Egyezmény neve: MTA Kutatói mobilitási szerződés

Eredmények, illetve együttműködés értékelése: Az együttműködés során a Mars-500 űrszimuláció legénységi kommunikációjának többnyelvű tartalomelemzése történt.

Közös publikációk száma: 1 könyvfejezet, 4 konferencia előadás.

Téma címe: Lokális és globális kérgi hálózatok vizsgálata nagyfelbontású elektrofiziológiai monitorozást és optogenetikai ingerlést megvalósító újfejlesztésű agyi elektródákkal.

Együttműködő partnerintézmények neve: Albert-Ludwigs-Universität Freiburg, Németország, Interuniversitair Micro-Electronica Centrum vzw, Leuven, Belgium, Università degli Studi di Parma/IIT, Olaszország, Universiteit van Amsterdam, Hollandia, Fundação Champalimaud, Lisszabon, Portugália, Max Planck Gesellschaft zur Förderung der Wissenschaft e.V., München, Németország, Radboud Universiteit Nijmegen, Hollandia, University of Lethbridge, Kanada, ATLAS Neuroengineering, Leuven, Belgium

Egyezmény neve: Neuroseeker EU FP7 grant

Eredmények, illetve együttműködés értékelése: Új fejlesztésű in vivo intrakraniális mikroelektródák tesztelése patkányokon. Kimutatták, hogy a beépített elektróda körüli agyszövetben egy enyhe sejtpusztulás (kb 10-20%) és enyhe gliózis figyelhető meg.

Közös publikációk száma: 1 cikk, 3 poszter, 1 előadás.

Téma címe: Appearance Matters: Tackling the Physical and Psychosocial Consequences of Dissatisfaction with Appearance (COST IS1210) (2013-2016)

Együttműködő partnerintézmény neve: A projekt 27 tagország együttműködésével valósul meg. Az elnyert pályázati támogatás koordinátor intézménye a University of the West of England, Centre for Appearance Research, Dept of Psychology (UWE, Bristol, United Kingdom)

Egyezmény neve: COST network (action nr: COST IS1210)

Eredmények, illetve együttműködés értékelése: A projekt első 7 hónapjában a résztvevők elsősorban a stabil hálózat, munkacsoportok és célkitűzések kidolgozására fókuszáltak a későbbi, kinézettel való elégedetlenség területén végzendő kutatások megalapozására. 2013. május óta két nemzetközi találkozóra került sor, egy alakuló megbeszélésre Brüsszelben, illetve egy vezetői és munkacsoport megbeszélésre Desenzano del Garda-ban.

IV. A 2013-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A pályázat megnevezése: Nemzeti Fejlesztési Minisztérium/Magyar Űrkutatási Iroda (URKUT_10-1-2011-0025)

A pályázati téma megnevezése: Extrém környezeti tényezők hatása a viselkedésszabályozásra

A pályázati támogatás mértéke: összesen: 3.890 E Ft (2013-ban: 3.890 E Ft)

A pályázat keretében 2013-ban végzett munka fontosabb eredményei:

Mentális fáradás hatása a kognitív teljesítményre és az agyi elektromos aktivitásra kísérlet elvégzése, az adatok elemzése még folyamatban van.

A pályázat megnevezése: ESA PECS (4000101994/10/NL/HE)

A pályázati téma megnevezése: Computerised Analysis of Language phenomena – Content Analysis (COALA-Content)

A pályázati támogatás mértéke: összesen: 105 k€ (2013-ban: 35 k€)

A pályázat keretében 2013-ban végzett munka fontosabb eredményei:

Megtörtént a COALA kísérlet előkészítése és befejeződött az adatgyűjtés az első évben.

A pályázat megnevezése: OTKA Kutatási pályázat (108783)

A pályázati téma megnevezése: Action-induced changes in perceptual processing

A pályázati támogatás mértéke: összesen: 20.882 E Ft (2013-ban: 0 Ft)

A pályázati kutatási munka 2014. január 1-jétől indul.

A pályázat megnevezése: Erasmus Mundus Action 2 Partnership (Grant Agreement nr 2012-5538 / 001 – 001-EM Action2 – Partnership)

A pályázati téma megnevezése: Auditory Cognitive Neuroscience (ACN)

A pályázati támogatás mértéke: összesen: 1,446,750.00 € (2013-ban: 361,687.5 €)

A pályázat keretében 2013-ban végzett munka fontosabb eredményei: Lezajlott a szerződéskötés és az első utazási pályázatok kiírásra kerültek.

A pályázat megnevezése: Marie Curie Actions - Initial Training Networks (ITN) (FP7-PEOPLE-2013-ITN Project nr 604764)

A pályázati téma megnevezése: Cognitive Innovation (CogNovo)

A pályázati támogatás mértéke: összesen: 4,077,315.00 € (2013-ban: 1,159,502.52 €)

A pályázat keretében 2013-ban végzett munka fontosabb eredményei: A szerződéskötés előkészítése; az első PhD-pályázatok kiírásra kerültek.

A pályázat megnevezése: Piacorientált kutatás-fejlesztési tevékenység támogatása (PIAC_13) (PIAC_13-1-2013-0162)

A pályázati téma megnevezése: LeopolyNext térlátásfejlesztő alkalmazás kifejlesztése
A konzorcium vezetője a 3D for All Számítástechnikai Fejlesztő Kft.
A pályázati támogatás mértéke: összesen: 72.147.137 Ft (2013-ban: 0 Ft)
A pályázati kutatási munka 2014. január 1-jén kezdődik.
A pályázat megnevezése: OTKA K típusú (OTKA K 109009)
A pályázati téma megnevezése: A kollektív áldozati szerep vizsgálata a nemzeti identitás konstrukciójában
A pályázati támogatás mértéke: összesen: 29.296 E Ft (2013-ban: 0 Ft)
A pályázati kutatási munka 2014. január 1-jétől indul.

A pályázat megnevezése: Nemzetközi együttműködéssel megvalósuló alap és ipari kutatási valamint Infokommunikációs technológiai fejlesztési projektek támogatása (KTIA_AIK_12) (KTIA_AIK_12-1-2013-0037)
A pályázati téma megnevezése: Virtuális téri neurokognitív kutatóműhely létrehozása a jövő immerzív médiatechnológiáinak kutatásához és fejlesztéséhez
A pályázati támogatás mértéke: összesen: 61.420.000 Ft (2013-ban: 26.010.440 Ft)
A pályázat keretében 2013-ban végzett munka fontosabb eredményei: A pályázat első félévében előkészítő munka zajlott: megkezdték a mozgás közben rögzíthető EEG jelek elvezetésére alkalmas elektrofiziológiai mérőeszköz integrálását a 3 dimenziós virtuális valóság (3D VR) környezetet megvalósító informatikai rendszerbe, hardver és szoftver szinten egyaránt.

A pályázat megnevezése: EU FP7 Collaborative Project (600925)
A pályázati téma megnevezése: NeuroSeeker – Investigation of local and global cortical circuits with advanced neural probes for high-resolution electrophysiological monitoring and optogenetic stimulation
A pályázati támogatás mértéke: összesen: 199920 € (2013-ban: 49980 €)
A pályázat keretében 2013-ban végzett munka fontosabb eredményei:
A NeuroSeeker elektródával soksejt (MUA) és egysejt (SUA) aktivitást rögzítettek különböző agykérgi és talamikus területekről ketamin-xylazin altatott patkányokban. Szisztematikus eltéréseket tapasztaltak a különböző talamikus területeken mért talamokortikális up-state-ek kezdetének időpontjai között. Eredményeik alapján az up-state-ek nagy hányada talamikus eredetűnek feltételezhető az adott kísérleti körülmények között.

A pályázat megnevezése: EU_KP_12
A pályázati téma megnevezése: Pályázat a NeuroSeeker FP7 pályázat szerződéskötésére
A pályázati támogatás mértéke: összesen: 1.954.619 Ft (2013-ban: 1.954.619 Ft)
A pályázat keretében 2013-ban végzett munka fontosabb eredményei:
Megírták a szükséges engedélykérelmeket, és beindították az engedélyezési folyamatokat. Elkészítették és a NeuroSeeker pályázatba integrálták a módosított munkaterveket. Elvégezték a szükséges adminisztrációs teendőket.

A pályázat megnevezése: EU_BONUS_12
A pályázati téma megnevezése: Pályázat a NeuroSeeker EU FP7 projekt magyar részvétel támogatására
A pályázati támogatás mértéke: összesen: 12.091.562 Ft (2013-ban: 5.030.090 Ft)
A pályázat keretében 2013-ban végzett munka fontosabb eredményei:
Kifejlesztették a NeuroSelect kontroll szoftvert és grafikus felhasználói felületet az elektronikus mélység szabályozás elvét megvalósító (EDC) szilícium alapú elektródákhoz. Megvizsgálták a NeuroSeeker elektródák biokompatibilitását. Az elektródák környezetében

10-30% mértékű sejtpusztulást mértek. Összességében közepes, illetve erős gliasejt-reakciót tapasztaltak az elektródák közelében. Eredményeik alapján megállapítható, hogy a NeuroSeeker elektródák biokompatibilitása megfelelő.

A pályázat megnevezése: EU_KP_12 (EU_KP_12-1-2013-0012)

A pályázati téma megnevezése: Pályázat a CODECS pályázat előkészítésére

A pályázati támogatás mértéke: összesen: 2.213.823 Ft (2013-ban: 2.213.823 Ft)

A pályázat keretében 2013-ban végzett munka fontosabb eredményei:

A CODECS pályázat, bár elérte a szükséges úgynevezett pass score-t, nem kapott támogatást, ezért nem valósult meg. Ugyanakkor eredményeik alapján, ha megfelelő kiírás érkezik, a szükséges módosításokkal új Európai Uniós pályázatot kívánnak beadni.

A pályázat megnevezése: OTKA -K (K 109148)

A pályázati téma megnevezése: A pszi-tudások mint társadalmi diskurzusok – a humán tudományok a hatalmi viszonyok kontextusában

A pályázati támogatás mértéke: összesen: 13.971 E Ft (2013: 0 Ft)

A pályázat 2014-ben indul.

A pályázat megnevezése: OTKA-K (K108882)

A pályázati téma megnevezése: Csecsemőkortól serdülőkorig: epigenetikai változások a társas-érzelmi környezet hatására

A pályázati támogatás mértéke: összesen: 18.344 E Ft (2013: 0 Ft)

A pályázat, illetve az azzal kapcsolatos munka 2014-ben kezdődik.

V. A 2013-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Czigler I, Intraub H, Stefanics G: Prediction Beyond the Borders: ERP Indices of Boundary Extension-Related Error. PloS ONE, 8(9): e74245 (2013)
<http://dx.doi.org/10.1371/journal.pone.0074245>
2. Horváth J: Attenuation of auditory ERPs to action-sound coincidences is not explained by voluntary allocation of attention. Psychophysiology, 50:266-273 (2013)
<http://real.mtak.hu/4385/>
3. Barkaszi I, Czigler I, Balazs L: Stimulus complexity effects on the event-related potentials to task-irrelevant stimuli. Biological Psychology, 94(1): 82-89 (2013)
http://www.frontiersin.org/10.3389/conf.fnhum.2011.207.00425/event_abstract?sname=XI_International_Conference_on_Cognitive_Neuroscience_%28ICON_XI%29
4. Mill RW, Böhm TM, Bendixen A, Winkler I, Denham SL: Modelling the Emergence and Dynamics of Perceptual Organisation in Auditory Streaming. Plos Comput Biol, 9(3): e1002925 (2013)
<http://www.ploscompbiol.org/article/info%3Adoi%2F10.1371/journal.pcbi.1002925>
5. Szaldy O, Bohm T, Bendixen A, Winkler I: Event-related potential correlates of sound organization: Early sensory and late cognitive effects. Biol Psychol, 93(1): 97-104 (2013)
<http://real.mtak.hu/4368/>
6. Molnár M, Tóth B, Boha R, Gaál ZsA, Kardos Zs, File B, Stam JC: Aging effects on ERP correlates of emotional word discrimination. Clin Neurophysiol, 24: 1986–1994 (2013)
<http://real.mtak.hu/8416/>

7. Honbolygó F, Csépe V: Saliency or template? ERP evidence for long-term representation of word stress. *International Journal of Psychophysiology*, 87 (2): 165-172 (2013) <http://real.mtak.hu/5143/>
8. Hajos N, Karlocai MR, Nemeth B, Ulbert I, Monyer H, Szabo G et al. (2): Input-Output Features of Anatomically Identified CA3 Neurons during Hippocampal Sharp Wave/Ripple Oscillation In Vitro. *J Neurosci*, 33: 11677-11691 (2013) <http://real.mtak.hu/6138/>
9. Dombovari B, Fiath R, Kerekes BP, Toth E, Wittner L, Horvath D et al. (7, Ulbert I): In vivo validation of the electronic depth control probes. *Biomed Tech*, 1(1): 1-7 (2013) <http://real.mtak.hu/7050/>
10. Miklósi Á, Topál J: What does it take to become 'best friends'? Evolutionary changes in canine social competence. *Trends in Cognitive Sciences*, 17(6): 287-294 (2013) <http://real.mtak.hu/5532/>
11. Tóth I, Lakatos K, Gervai J: Gender differences in children's responses to attachment story stems: True or artefacts? *ISSBD Bulletin*, 2013/1(63): 2-6 (2013) <http://real.mtak.hu/6430/>
12. Fülöp M, Takács S: The cooperative competitive citizen: What does it take? *Citizenship Teaching and Learning*, 8(2): 131-156 (2013) <http://real.mtak.hu/6995/>
13. László J: *Historical Tales and National Identity: An introduction to narrative social psychology*. Routledge, (2013) <http://real.mtak.hu/id/eprint/8582>

MTA TERMÉSZETTUDOMÁNYI KUTATÓKÖZPONT
MOLEKULÁRIS FARMAKOLÓGIAI INTÉZET

1025 Budapest, Pusztaszeri út 59-67.; 1525 Budapest, Pf. 17
telefon: (1) 438 1167

e-mail: kardos.julianna@ttk.mta.hu; honlap: www.ttk.mta.hu
(Az intézet 2014. január 1-jétől megszűnt)

I. A kutatóhely fő feladatai 2013-ban

Az MFI fejlesztési koncepciója az alábbi tevékenységekre összpontosult: a) a TTK multidiszciplináris együttműködési képességének feltárása; b) a nemzetközileg kiemelkedő színvonal fokozása és a biotechnológiai alkalmazások támogatása a molekuláris farmakológiai, sejtbiológiai, nanobiológiai és spektroszkópiái alap és alkalmazott kutatások területén; c) a hazai kutatási pályázatokban nyertes kiemelkedő fiatal kutatók vezetői megbízása. A témavezető kutatók bevonásával szorgalmazták az idézettséget növelő publikációkat, az MFI és TTK kooperációban született cikkeket továbbá a pályázati források megszerzését, és kapcsolódóan az infrastruktúra fejlesztését. Az MFI technológiai platformjainak megalapozása és kutatási együttműködések fejlesztése érdekében, az MFI-ben az alábbi tevékenységek folytak: I.) előkísérletek fluoreszcens fehérjét szövetspecifikusan kifejező transzgén patkány előállítására (Funkcionális Farmakológiai Osztály laboratóriumai); II.) előkísérletek indukált pluripotens őssejt alapú idegi vizsgálati modellek létrehozására (Funkcionális Farmakológiai Osztály laboratóriumai); III.) membránfehérje funkció követésére alkalmas nanoszenzor prototípus fejlesztés (Biológiai Nanokémiai, Kémiai Farmakológiai és Funkcionális Farmakológiai Osztályok); IV.) optofiziológia technológiai platform megalapozása és közös Horizon2020 FET Open pályázat 2014. évi benyújtásának előkészítése (MFI Kémiai Farmakológiai, Funkcionális Farmakológiai, Biológiai Nanokémia és Spektroszkópiái Osztályok, továbbá KPI, MFA); V.) a nanotoxicitás vizsgálati platformjának kémiai, valamint in vitro biológiai megalapozása (MFI Kémiai Farmakológiai és Funkcionális Farmakológiai, valamint Biológiai Nanokémia Osztályok).

II. A 2013-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Lendület Molekuláris Sejtbiológiai Kutatócsoport

Az MTA Lendület Program támogatásával 2012-ben alakult csapat, 2013-ban lehetőséget kapott létszámának növelésére egy nagy összegű kutatási támogatás (KTIA_AIK_12) elnyerésével. Széleskörű nemzetközi együttműködés keretében feltárták a sejtek energiaháztartását szabályozó LKB1/AMPK kinázok szerepét az ABCB11 sejt felszíni megjelenésének szabályozásában (*PLOS ONE*, megjelenés alatt). Kimutatták a resveratrol, egy természetes polifenol új típusú kölcsönhatását az ABCG1 fehérjével (*FEBS Letters*). A kalcium transzporter PMCA fehérjék kutatása területén kimutatták, hogy a PMCA4b izoforma esetében egy C-terminális közeli di-leucin motívum szabályozza a fehérje internalizációját (*BBA-Mol. Cell Research*). A PMCA fehérjék nem csak a klasszikus Ca^{2+} transzport funkció révén, hanem a foszfatidilinozitol-4,5-biszfoszfát hidrolízisének szabályozásán keresztül is modulálják a Ca^{2+} jeleket (*J Cell Science*). Vizsgálták a PMCA fehérje-expresszió változásait tüdőcarcinoma sejt vonalak differenciálódása során (*FEBS J*). GFP-alapú Ca^{2+} indikátort (GCaMP2) stabilan expresszáló sejt vonalakat hoztak létre (TransRat pályázat) és

tanulmányozták, hogy a differenciáltató szerek hatására bekövetkező transzport fehérjék expressziós szintjének változásai hogyan befolyásolják a Ca^{2+} raktárak töltöttségét (*Cell Calcium – közlésre elfogadva*). Létrehoztak több G-CaMP2 Ca^{2+} indikátort stabilan expresszáló humán embrionális őssejt vonalat, amelyek segítségével jellemezték a pluripotens állapotra és a szívirányú differenciációt követően a szívizomsejtekre jellemző kalcium jeleket (*Cell Signaling*). A Nemzeti Agykutató Programhoz (NAP) kapcsolódóan előkészületeket tettek a pluripotens őssejt idegsejt irányú differenciációjának és a létrehozott neurális progenitorok és érettebb sejtek vizsgálatára. Korábbi megfigyelésüket megerősítve megmutatták, hogy az ABCG2 transzporter nemcsak a szöveti, hanem a pluripotens őssejtben is meghatározó szerepű (*Eur Biophys J*). Többféle kórképhez kapcsolódóan (diabetes, myeloma multiplex, Alzheimer kór) számos biomarkert vizsgáltak fagyasztott és friss vérminták vörösvérsejtjein (ABCG2, ABCB6, ABCA1, glükóz transzporterek, PMCA4, inzulin receptor, urea transzporter) (*Biomark Med*).

Biomembrán Laboratórium

A kutatócsoport egyik fő témaként a prionfehérje család lokalizációját és fiziológiás, illetve az Alzheimer és a szívacsos agysorvadás betegségek lefolyásában betöltött szerepét vizsgálta. Új, idegi eredetű humán és eger sejt modell rendszereket állítottak be, amelyekben a fehérjék és mutáns variánsaik hatását követik. Megmutatták, hogy a Shadoo fehérje az alkalmazott modellrendszerekben, akárcsak a szívacsos agysorvadás során, nem mutat analóg viselkedést az N-terminális prionfehérjével. Az ABCG2 transzporter vizsgálata területén megállapították, hogy a tisztított és rekonstituált ABCG2 fehérje speciális lipid függést mutat, amelyet a fehérje mutációi jelentősen befolyásolnak. Az ABCG2 fehérje ugyancsak fontos szerepet játszik a sejtek stressz-elleni védekezésében. Mindezek az eredmények a daganatok kezelésében és az emberi őssejt vizsgálatában is jelentős szerepet kaphatnak. Folytatták a mikroRNS-ek expresszióját szabályozó folyamatok vizsgálatát. A szakterületen elterjedten használt real-time PCR módszert tovább optimalizálták: bebizonyították, hogy a DNS szennyeződés komoly torzulást okoz a pontos kvantitálás során, illetve rávilágítottak az egy mikroRNS génről képződő 3'-isomiR-ek real-time PCR-rel történő elkülönítésének a problémájára (könyvfejezet elfogadva). Ezek az eredmények központi fontosságúak a mikroRNS-ek működésének a megértéséhez, illetve hatékony alkalmazásukhoz mRNS-ek és fehérjék expressziós szintjének szabályozására. Megállapították, hogy a csont- és fogimplantátumok beépülését, a korai csontregenerációt segíti, ha az implantátum beültetése előtt, az implantátumra mezenchimális őssejtet ültetnek. A gyakran alkalmazott titán, és marhacsont implantátumok felszínére nehezen tapadnak őssejt. Kísérleteikkel bizonyították, hogy ha a felszínre ciklikus arginin-lizin-aszparagin mellékágakkal funkcionális poliliz(Seri-DL-Ala) molekulákat adszorbeálnak, ez nagyban elősegíti a sejtek letapadását, és ezzel a csontbeépülést és regenerációt.

Biokémiai Farmakológiai Osztály

Kimutatták, hogy egyes vegyületek szérumban albumin kötődése bizonyos fehérjeoldalláncok specifikus konformációváltozásával jár. Ezt a felismerést hasznosítva, új spektroszkópiás megközelítést dolgoztak ki, amelynek alkalmazásával sikeresen azonosították több gyógyszer- és természetes szteroidmolekula albumin kötőhelyét. Biológiailag aktív, β -karbolinvázis alkaloidok szérumban albumin kötődését vizsgálva felismerték, hogy a táplálékkal felvett zsírsavak jelentős hatást gyakorolnak a vegyületek kötődésének erősségére és ezzel azok farmakológiailag aktív szabad plazmakoncentrációjára. A kísérleti adatokból kiindulva modellt alkottak a zsírsav- és alkaloidmolekulák közötti allosztérikus kölcsönhatások értelmezésére. A biológiailag aktív királis indol alkaloid evodiamin szérumban fehérje

kötődésében sztereoszelektivitást mutattak ki. Amfoter karakterű (danzil-aminosavak), királis szerves kismolekulák (serotonin receptor antagonisták, valamint új fejlesztésű Terada-Akiyama- és Mauroka-típusú katalizátorok) sztereoszelektív elválasztását oldották meg és komplexképződését jellemezték többek között új fejlesztésű bázikus sajátságú ciklodextrin szelektorokkal (együtműködés: MTA TTK SZKI; Cyclolab Kft.). Májátültetésen átesett betegek gyógyszer-lebontó képességét CYPtestTM vizsgálatokkal határozták meg, amely alapján személyre szabott gyógyszeres terápia kialakítására van lehetőség. A CYP-status alapján történő gyógyszeres kezelés szignifikánsan javította a májműködést és csökkentette a szövödmények előfordulását. A dehidroepiandroszteronnak jótékony szerepe van a daganatképződésben, lassítja vagy teljesen felfüggeszti a karcinogén anyagok által kiváltott folyamatokat. A molekuláris háttér vizsgálata során megállapították, hogy a dehidroepiandroszteron gátolja a karcinogén aktiválásban jelentős CYP1A2 enzim indukcióját, ezáltal csökkenti a reaktív intermedierek képződését. A dehidroepiandroszteron gátló hatását az androgén receptor aktiválásával és a CYP1A2 expresszió poszt-transzkripció csökkentésével éri el.

Funkcionális Farmakológiai Osztály

Feltárták egy új típusú, korábban általuk leírt, glutaminsav felvétellel közvetlenül kiváltható gliális γ -amino-vajsav (GABA) kibocsátási folyamat hatását a gliális szinkronizációra in vitro epilepszia modellben, és új gyógyszerjelölt vegyületeket fejlesztettek ezen neuroprotektív mechanizmus gyógyászati célú kiaknázására. Egyedi ioncsatornák aktivitásának mérésére alkalmas nanoszenzort fejlesztettek ki, melyet a Richter Gyógyszergyár egyik kutatási projektje keretében is támogatott. Kapcsolódóan kimutatták dendrimer nanorészecskék neurotoxikus hatását és feltárták ezen részecskék antibakteriális tulajdonságait. Feltérképezték a jelölésmentes agyi aktivitás térképezést lehetővé tevő Intrinsic Optical Signal (IOS) létrejöttében szerepet játszó neuronális és gliális mechanizmusokat, valamint az IOS és a feszültségfüggő festékekkel mérhető térbeli membránpotenciál jel összefüggését. Kalcium-szenzitív fehérjét expresszáló új patkány állatmodellt hoztak létre és karakterizáltak (TransRat projekt). Elvégezték idegsejtek differenciáltatott humán indukált pluripotens sejtek elektrofiziológiai karakterizációját. Rámutattak, hogy a szimmetrikus pentamer szerkezetű ligand-kapuzott ioncsatornák családja aszimmetrikus perturbációval aktiválódik. Kidolgoztak egy hepatocita-Kupffer sejt tartalmú ko-kultúra rendszert, amely alkalmas nanoanyagok máj funkcióra és sejtek közötti kommunikációra gyakorolt hatásának vizsgálatára. Tesztekkel dolgoztak ki a hepatociták Kupffer sejtek jelenlétében kialakuló CYP2B enzim, valamint ABC és SLC transzporter protein expressziójának és működésének jellemzésére. Különböző BDDCS (Biopharmaceutical Drug Disposition and Classification System) osztályba tartozó gyógyszerek hepatocitába történő aktív, illetve passzív felvételét és kétirányú eliminációját határozták meg. Megállapították, hogy függetlenül a BDDCS besorolásától, azoknál a gyógyszereknél, amelyek aktív transzport útján jutnak a hepatocitákba, az elimináció sebességmeghatározó lépése az uptake folyamat. A Toxi-Coop Zrt-vel közös projekt fő célkitűzése egy olyan in silico modell megalkotása, amely alkalmas lesz fejlesztés alatt álló gyógyszerek várható farmakokinetikai tulajdonságainak becslésére a fejlesztés korai stádiumában.

Biológiai Nanokémia Osztály

Új szerves és szerves összetételű, biokompatibilis, gyógyszerhordozásra, valamint biológiai képalkotásra alkalmas nanorendszereket állítottak elő és azokat széleskörűen jellemezték. Aranyatomokból és fehérjéből álló, vörös fényt emittáló nanoklasztert állítottak elő és annak biológiai alkalmazhatóságát modellmembrán rendszereken igazolták. Kiszögű röntgenszórás

detektálására alkalmas, Magyarországon egyedülálló laboratóriumi nagyberendezést (SAXS) terveztek és építettek kereskedelemben kapható sugárforrás és detektor felhasználásával. A berendezést komplett mérésvezérlő és a mérési adatok feldolgozását és kiértékelését biztosító számítógépes programcsomaggal látták el. A berendezés üzembe állításával a nanorendszerek szerkezetvizsgálatának hazai centrumát hozták létre, amellyel a versenyszférában, elsősorban a gyógyszeripari partnerek számára, közvetlen gazdasági előnyökkel szolgálnak.

Spektroszkópai Osztály

Makrociklusos vegyületekbe építéssel befolyásolni tudták fényelnyelés hatására színváltozást mutató anyag különböző szerkezetű formái közötti átalakulás sebességét. Szupramolekuláris komplex képzéssel sikerült elősegíteniük tömör, réteges szerkezetű, jól definiált méretű nanorészecskék képződését, ionfolyadékot tartalmazó oldatokban. Kimutatták, hogy a *luotonin* A rákellenes hatású természetes alkaloid fluoreszcenciás tulajdonságai jelentősen változnak fémionok és hidrogénhid-kötés hatására, és feltárták, hogy a reaktánsok sajátosságai miként befolyásolják a keletkező komplexek stabilitását. Időfelbontásos fluoreszcencia kísérletekkel felderítették amino-kumarinok gerjesztett állapotainak energiavesztési mechanizmusát vizes közegben. Az SZKI-ben előállított kétmagvú xantphos Au(I) komplex lumineszcenciája igen erősen függött a kristályokon végzett porítástól, illetve a jelenlevő oldószerfajzókától. Összefrekvencia-keltési spektroszkópiával i) megállapították, hogy a közepes molekulatömegű hialuronsav nem befolyásolja számottevően a foszfolipid kettősrétegek rendezettségét és töltéeloszlását; ii) vizsgálták alkálifém ionoknak a határfelületi töltéeloszlásra gyakorolt hatását alkilszulfátok Gibbs és Langmuir rétegeiben. Megalapozták a szilárd hordozós biológiai modell membránok röntgen-reflektometriás mérését. Az izotóphelyettesítéses neutronszórás technika új eljárást dolgoztak ki, mely elősegíti a szűkös neutronmérési idő optimális felhasználását. Az SZTE-vel együttműködve, meghatározták a Ga(III) ionok szerkezetét erős alkalikus közegben. Módszert dolgoztak ki a Richter Gedeon Nyrt. számára hatóanyag küveták röntgen-reflektometriás vizsgálatára. EPR spektroszkópai módszerekkel kimutatták, hogy a tioszemikarbazon (TSC) vas(II/III), valamint réz(II) komplexei lehetővé tehetik a korábbi rákellenes szerek kiváltását. Sikeresen alkalmazták az EPR spektroszkópia módszerét $Mn_xZn_{1-x}Fe_2O_4$ nanoporok Curie hőmérsékletének és effektív mágneses anizotrópia energia gátjának meghatározására és értelmezték a Mn^{4+} jelenlétét. Vashiány pótlására műtrágyaként alkalmazható új kísérleti vérliszt készítményben kimutatták a hematinra jellemző kis, valamint a hemoglobinra és a transferrinre jellemző nagy spinű Fe^{3+} ionok jelenlétét.

Lendület Fehérje Kölcsönhatás Kutatócsoport

A kutatócsoport 2013. július 1-én indult. Még a csoport formális indulása előtt az év elején publikáltak két tanulmányt. Meghatározták a röntgendiffrakciós szerkezetét az ERK5 fehérje kináznak, továbbá feltérképezték azt a kölcsönhatást, ami révén ez a jelátviteli szabályzó fehérje aktiválódik (Journal of Biological Chemistry). A fehérje és peptidek komplexeinek kristályosítása során szerzett többéves tapasztalataikat összegezték egy, az Acta Crystallographica D folyóiratban megjelent cikkükben. Fehérje kölcsönhatások vizsgálata révén együttműködésben bemutatták, hogy az NDK1 kináz kölcsönhatásba lép a KSR nevű jelátviteli állványfehérjével és ennek a fizikai kölcsönhatásnak fontos szerepe van a ras fehérje által közvetített jelátviteli válaszok szabályozásában (Development).

b) Tudomány és társadalom

A Biokémia című folyóirat márciusi számában a *Lendület Molekuláris Sejtbiológiai Kutatócsoport* kutatásairól szóló cikk jelent meg. A 2013-as orvosi Nobel-díjjal kapcsolatban a kutatócsoport vezetőjének segítségével cikk jelent meg a Népszabadságban (2013. okt. 8-i szám). A Biokémia című folyóirat decemberi számában a Lendület-kutatócsoport vezetője és egyik tagja szintén a 2013-as orvosi Nobel-díjjal kapcsolatban jelentetett meg írást. A kutatócsoport vezetőjével készült interjú jelent meg az Innotéka magazin decemberi számában. Katolikus Rádió, Recept helyett c. műsorában interjú (Őssejtek-Apáti Ágota 2013.01.07).

Biomembrán Laboratórium

A tagok rendszeres tájékoztatókat és bemutatókat tartottak a tudomány iránt érdeklődő laikusok számára, így részt vettek a Tudomány Napja és a Tudósok Éjszakája rendezvényein, valamint tudomány-népszerűsítő interjút adtak a Katolikus Rádiónak a „DNS csodás világa” címmel. Ugyancsak több tájékoztatót tartottak középiskolás diákok számára. Többek között nyílt napot szerveztek az ELTE Trefort Ágoston Gyakorlóiskola számára: „Csontpótlás őssejtekkel” címmel.

Metabolikus Gyógyszer-kölcsönhatások Laboratórium

Tájékoztatták az érdeklő laikusokat a CYPtestTM vizsgálat alapján kialakítható személyre szabott gyógyszeres terápia lehetőségeiről, amely biztosítja az ésszerű, kevesebb nem kívánt hatással és csökkent gyógyszer-fogyasztással járó terápia kialakítását. Bemutatták a személyre szabott terápia és a betegek gyógyszer-lebontó képességéhez igazított terápiás stratégia lehetőségeit, amely hatékonyabb, kevesebb mellékhatással járó gyógyszeres kezeléshez vezet, és végül is egy költségtakarékos, rövidebb kórházi kezelést igénylő ellátást és a betegek életminőségének javulását eredményezi. A tájékoztatás napi és hetilapokban, rádió és TV műsorokban, valamint laboratórium bemutató keretében történt.

Funkcionális Farmakológiai Osztály

A Kémiai Panoráma című, középiskolásokat megcélzó folyóirat munkájában szerzőként, valamint rovatvezetőként vettek részt. Részt vettek egy középiskolások számára rendezett tudományos nyári tábor szervezésében és lebonyolításában.

Biológiai Nanokémia Osztály

Két diák témavezetését végezték az „AKI Kíváncsi Kémikus” nyári táborban. (Gyógyszerhordozó mikro- és nanorészecskék; Hogyan épül fel a sejtmembrán). „Világító nap” keretében tartottak demonstrációt 25 főnek egy napon keresztül.

Spektroszkópiai Osztály

Fluoreszcens jelzőmolekulák vizsgálatáról született egy tudományt népszerűsítő kézirat, melyet várhatóan 2014-ben közöl az Élet és Tudomány folyóirat. „AKI Kíváncsi Kémikus” kutatótábor keretében foglalkoztak középiskolás diákokkal.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2013-ban

Lendület Molekuláris Sejtbiológiai Kutatócsoport

Hozzájárultak a 43. Membrántranszport Konferencia (Sümege, 2013.05.21–24.) szervezéséhez és megrendezték a 3. Gárdos György Szimpóziumot (Mátraháza, 2013.11.07–10.) A kutatócsoport szoros együttműködésben áll az SE Biofizikai és Sugárbiológiai Intézettel és a Molekuláris Biofizika MTA Kutatócsoporttal. A csoport tagjai rendszeresen részt vesznek az ELTE TTK, az SE és a DE posztgraduális képzésében, valamint szoros együttműködést alakítottak ki az SE Pszichiátriai és Pszichoterápiás és a Szív- és Érgyógyászati Klinika Össejtlaboratóriumának munkatársaival. Össejtek vizsgálatában kutatási együttműködést alakítottak ki különböző cégekkel: Creative Cell Kft.; BioTalentum Tudásfejlesztő Kft.; Richter Gedeon Nyrt.; Femtonics. Személyes kapcsolatokon alapuló nemzetközi tudományos együttműködések: NIH, Bethesda, USA; University of Sydney, Australia; Instituto de Química Biológica, Argentina; University of Namur, Bruxelles, Belgium; University of California, San Diego, La Jolla, CA, USA; Massachusetts General Hospital, Boston, MA, USA; Mayo Clinic College of Medicine, Rochester, MN, USA; PRES Sorbonne Paris-Cité, Bobigny, France; Medical University of Vienna.

Közös publikációk száma: 5 (3 megjelent és 2 megjelenés alatt).

Biomembrán Laboratórium

A laboratórium számos élő nemzetközi kapcsolattal rendelkezik, amelyek közül a legfontosabbak a NIH-NCI, a Zürichi Egyetem, a Lyoni Egyetem és a Bécsi Egyetem kutatóival folytatott együttműködések. Számos biotechnológiai vállalkozással (pl. SOLVO, SoftFlow, CellPharma) közös pályázatok alapján értek el kutatási eredményeket.

Biokémiai Farmakológiai Osztály

Téma címe: Szerves kismolekulák és ciklodextrinek kölcsönhatás vizsgálata és sztereoszelektív analitikai elválasztások kidolgozása kapilláris elektroforézissel

Együttműködő partnerintézmény neve: Ciklolib Kft., Budapest

Egyezmény neve: tudományos együttműködés

Eredmények, illetve együttműködés értékelése: Amfoter karakterű (danzil-aminosavak), királis szerves kismolekulák sztereoszelektív elválasztását oldották meg és komplexképződését jellemezték új fejlesztésű bázikus sajátságú ciklodextrin szelektorokkal.

Közös publikációk száma: 1.

Metabolikus Gyógyszer-kölcsönhatások Laboratórium

Téma címe: Személyre szabott gyógyszeres terápia kialakítása a beteg gyógyszer-lebontó képessége alapján

Együttműködő partnerintézmények neve:

Fővárosi Önkormányzat Egyesített Szent István és Szent László Kórház (Budapest)

Gottsegen György Országos Kardiológiai Intézet (Budapest)

Semmelweis Egyetem, Transzplantációs és Sebészeti Klinika (Budapest)

Semmelweis Egyetem Pszichiátriai és Pszichoterápiás Klinika (Budapest)

Heim Pál Kórház, Madarász Utcai Gyermekkorház (Budapest)

Fejér Megyei Szent György Kórház (Székesfehérvár)

Kapcsolat formája: Az egészségügyi intézmények és a Metabolikus Gyógyszer-kölcsönhatások Laboratórium közötti együttműködési megállapodások.

Eredmények: A kialakított együttműködés keretében a CYPtest™ alkalmazásával vizsgálják a betegek gyógyszer-lebontó (méregtelenítő) képességét, és közösen kialakítják a betegek egyéni gyógyszeres terápiáját.

Közös publikációk száma: 1 benyújtott és 1 megjelent tudományos cikk, 12 előadás.

Téma címe: Szteroid típusú vegyületek homeosztázisa, valamint a gyógyszer-metabolizmus és szabályozás kapcsolatának in vitro kísérletes és matematikai modellezése

Együttműködő partnerintézmény neve: Ljubljana Egyetem, Orvosi Kar (Ljubljana, Szlovénia)

Kapcsolat formája: TÉT_10-1-2011-616

Eredmények: Humán hepatocitákon és daganatos sejtvonalakon végzett kísérletes eredmények és a matematikai modellek együttes alkalmazásával új összefüggéseket és magyarázatokat találtak a szteroid homeosztázis és a gyógyszer metabolizmus molekuláris történéseire. A közös kutatások során Szlovéniából egy kutató professzor érkezett a laboratóriumba, 2 magyar PhD-hallgató és egy főmunkatárs látogatott a Ljubljana Egyetemre.

Közös publikációk száma: 2 tudományos cikk, 1 meghívott plenáris előadás

Téma címe: Egy új szolgáltatás, a CYPtest továbbfejlesztése és piaci bevezetése a személyre szabott gyógyszeres terápia kialakításában

Együttműködő partnerintézmény neve: Toxi-Coop Toxikológiai Kutató Központ Zrt. (Budapest)

Kapcsolat formája: GOP-1.3.1.-11/B-2011-0042

Eredmények: A szervezet gyógyszer-lebontó képességének meghatározására egy átfogó rendszer került felállításra, amelynek célja, hogy feltárja a betegek gyógyszer-lebontó képessége és a terápiában alkalmazott gyógyszerek metabolikus sorsa közti összefüggéseket.

Közös publikációk száma: 8 előadás.

Téma címe: Szakértői program a gyógyszer-lebontás és kiürítés becslésére

Együttműködő partnerintézmény neve: Toxi-Coop Toxikológiai Kutató Központ Zrt. (Budapest)

Kapcsolat formája: GOP-1.1.1-11-2012-0027

Eredmények: Rendelkezésre álló irodalmi adatok alapján feltérképezték ismert gyógyszerek in vitro farmakokinetikai és metabolikus sajátosságait, valamint intrinsic clearance értékét. Adatokat gyűjtöttek a már piacon lévő gyógyszerek metabolizmusának sebességéről, a metabolizmus során képződött termékek szerkezetéről, valamint az egyes metabolitok képződésében szerepet játszó CYP enzimekről.

Funkcionális Farmakológiai Osztály

Téma címe: Kombinált támadáspontú antipszichotikus hatású gyógyszerjelöltek fejlesztése

Együttműködő partnerintézmény neve: Semmelweis Egyetem, Budapest

Egyezmény neve: magyar-indiai (KTIA-DST) K+F+I együttműködési program

Eredmények, illetve együttműködés értékelése: Sikeresen benyújtottak az indiai partnerrel közös pályázatot az új típusú antipszichotikus vegyületek kifejlesztésére.

Téma címe: GABA transzporter altípus specifikus vegyületek fejlesztése

Együttműködő partnerintézmény neve: University of Leuven, Belgium

Egyezmény neve: Közös ERA Chemistry projekt „Novel targets and new drug candidates to combat epilepsy: Design of subtype-selective spirocyclic inhibitors to distinguish among gamma-aminobutyric acid transporter protein subtypes.”

Eredmények, illetve együttműködés értékelése: Az ERA Chemistry projekt keretében új gyógyszerjelölt vegyületeket fejlesztettek a neuroprotektív Glu/GABA mechanizmus gyógyászati célú kiaknázására.

Téma címe: Kalcium-szenzitív fehérjét expresszáló új patkány állatmodell létrehozása és felhasználása

Együttműködő partnerintézmények neve: MTA TTK MFI; KTT Kft.; MTA TKI; Toxicoop Zrt.; Immunogenes Kft. (valamennyi Budapest)

Egyezmény neve: Közös KTIA projekt „Kalciumérzékelő fehérjét szövetspecifikusan kifejező transzgenikus patkányok létrehozása in vivo gyógyszervizsgálatok céljára.”

Eredmények, illetve együttműködés értékelése: Kalcium-szenzitív fehérjét expresszáló új patkány állatmodellt hoztak létre és karakterizáltak.

Téma címe: Connectome térképezési módszerek kidolgozása

Együttműködő partnerintézmény neve: Richter Gedeon Gyógyszergyár, Budapest

Egyezmény neve: Kutatási szerződés „Nanosentry alapú connectome térképezés”.

Eredmények, illetve együttműködés értékelése: Immunhisztokémiai jelölési módszert dolgoztak ki, melynek révén a saját fejlesztésű nanoszenzorok fiziológias aktivitást mutató akut agyszövetben is célba juttathatóak.

Téma címe: Szimpózium szervezése a XI European Meeting on Glial Cells in Health and Disease (Berlin, Németország) nemzetközi konferencián

Együttműködő partnerintézmények neve: University of Utah, USA; University of California, Los Angeles, USA; University of Mainz, Németország

Egyezmény neve: Szimpózium „Role of glial GABA transporters in controlling neurotransmission”.

Eredmények, illetve együttműködés értékelése: Szimpóziumot szerveztek a XI European Meeting on Glial Cells in Health and Disease (Berlin, Németország) nemzetközi konferencián.

Téma címe: Tropeinek szerkezet-hatás összefüggései nikotinos acetilkolin és 5-HT_{3A} szerotonin receptorokon.

Együttműködő partnerintézmények neve: Skaggs School of Pharmacy and Pharmaceutical Sciences, University of California, San Diego, La Jolla, CAL, USA)

Egyezmény neve: Informális együttműködés egy professzor munkacsoportjával.

Eredmények, illetve együttműködés értékelése: Előadáskivonat: Structure-Activity Considerations for Heteroaromatic nortropeines and N-methyltropeines with Nicotinic Acetylcholine Receptor (nAChR) Subtypes and a Serotonin Receptor (5HT_{3A}). FASEB J. 27, 1b550 (2013).

Közös publikációk száma: 1.

Biológiai Nanokémia Osztály

Téma címe: A Malária diagnózisát szolgáló új spektroszkópiai módszer kidolgozása („Malária pigment kristály, mint mágneses mikromotor: kulcs a nagy érzékenységgű diagnózishoz”, Nature/Scientific Reports)

Együttműködő partnerintézmény neve: Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Fizika Tanszék

Eredmények, illetve együttműködés értékelése: A cikk egy új, rendkívül érzékeny, a malária kimutatására szolgáló és egyben költségkímélő diagnózis lehetőségét mutatja be. A kimutatás alapját a malária pigmentjének, az ún. hemozin mikrokristály sajátos, a vér többi komponensétől eltérő mágneses és optikai anizotrópiája biztosítja. A bemutatott elvet alkalmazva olcsó mérőkészülék konstruálható, amellyel a betegség szűrése a népesség széles körében elvégezhető (jelenleg 200 millió klinikai eset és 1 millió haláleset fordul elő évente a világon).

Közös publikációk száma: 1.

Téma címe: Metrological characterisation of micro-vesicles from body fluids

Együttműködő partnerintézmény neve: Academic Medical Center, University of Amsterdam, Amsterdam, Netherlands

Egyezmény neve: kutatási együttműködés (EMRP pályázat keretében)

Eredmények, illetve együttműködés értékelése: Elsőként jellemezték erythrocyta eredetű extracelluláris vezikulák méretét kisszögű röntgenszórással és egyéb módszerekkel.

Közös publikációk száma: 2.

Téma címe: Chemical and Optical Characterisation of Nanomaterials in Biological Systems

Együttműködő partnerintézmény neve: LGC Limited, Teddington, UK

Egyezmény neve: kutatási együttműködés (EMRP pályázat keretében)

Eredmények, illetve együttműködés értékelése: Elvégezték egy a kereskedelmi forgalomban kapható szilika nanorészecske amino-felületmódosítását. Elsőként állítottak elő 29-Si dúsított szilika nanorészecskéket.

Téma címe: Influence of aminoglycoside antibiotics on the flexibility of DPPE–DPPG model membranes

Együttműködő partnerintézmény neve: ILL (Institut Laue-Langevin – Neutron for sciences), Grenoble, France

Eredmények, illetve együttműködés értékelése: Vizsgálatokat végeztek különböző típusú antibiotikumoknak modell-membrán rendszerek dinamikai tulajdonságaira való hatásainak földerítésére, termális neutron visszaszórási spektrometriával (IN13-as mérőhely).

Spektroszkópai Osztály

Téma címe: Anyagtudományban és gyógyszerhatóanyag szállításban hasznosítható szupramolekuláris kölcsönhatások vizsgálata

Együttműködő partnerintézmény: Institut de Chimie et des Matériaux Paris-Est, CNRS UMR 7182, Thiais, France

Eredmények, illetve együttműködés értékelése: Makrociklusokat tartalmazó új, jól definiált méretű nanorészecskéket állítottak elő, és meghatározták ezek tulajdonságait. Az osztály két fiatal kutatója dolgozott a francia intézetben.

Közös publikációk száma: 2.

Téma címe: Fluoreszcens molekuláris szenzorok fejlesztése

Együttműködő partnerintézmény: Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Budapest University of Technology and Economics

Egyezmény neve: MTA TTK és BME–VEK közös Lézerspektroszkópia oktató-kutató laboratóriuma

Eredmények, illetve együttműködés értékelése: A BME-vel közös témáik közül kiemelt jelentőségű a podand, valamint a hidroxikromon típusú új fluoreszcens szenzormolekulák fejlesztése. Mindkét szenzortípus működik vizes közegben, ami előnyös, ha a szenzorokat biológiai minták mikroszkópos vizsgálatában alkalmazzák. A podand típusú szenzorok érzékenységet mutattak egyes nukleotidok jelenlétében, ezek mennyiségi meghatározására alkalmasak. Eredményeiket 2013-ban publikálták. A hidroxikromon vegyületcsalád egyes képviselői ATP-vel mutatnak kölcsönhatást, mely kölcsönhatás szelektívnek bizonyult a többi nukleotidhoz viszonyítva.

Szintén a BME szintetikus kémikusaival közösen fejlesztettek ki új fluoreszcens szenzorokat királis aminok, aminosavak analitikai kimutatásához. Tudomásuk szerint ezek az első cukoralapú, királis felismerést mutató fluoreszcens koronaéterek.

Közös publikációk száma: 1.

Téma címe: Biológiai modellmembránok előállításának és szerkezetének tanulmányozása.

Együttműködő partnerintézmény: MTA Wigner Fizikai Kutatóközpont

Egyezmény neve: együttműködés, pályázat előkészítés

Eredmények, illetve együttműködés értékelése: GINA (neutron reflektometria), SFG (összefrekvencia-keltési spektroszkópia), XRR (röntgen reflektometria) integrálása, hazai és nemzetközi infrastruktúra hálózat kialakítása.

Lendület Fehérje Kölcsönhatás Kutatócsoport

Vezetjük az ELTE TTK Biokémiai Tanszéken oktatót a *Bevezetés a Biokémiába* BSc gyakorlaton, a *Biokémia* MSc gyakorlaton, a *Fehérjetudomány* MSc kurzuson és a *Jelátviteli fehérjehálózatok* című PhD-kurzuson.

IV. A 2013-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A pályázat megnevezése: KTIA_AIK_12 (KTIA_AIK_12-1-2012-0025)

A pályázati téma megnevezése: Új kutatócsoport létrehozása emberi sejteket alkalmazó gyógyszervizsgálati platform kialakításához az MTA TTK Molekuláris Farmakológiai Intézetében

A pályázati támogatás mértéke: 37.700 E Ft

A KTIA támogatás lehetővé tette, hogy a Molekuláris Sejtbiológiai Kutatócsoport keretén belül megalakulhasson a pluripotens őssejtek tanulmányozásával foglalkozó kutatócsapat (11 fő), valamint az őssejtkutató laboratórium munkájához kapcsolódóan kiépülhessen a különböző fluoreszcens technikákat integráló kiszolgáló egység (3 fő).

A pályázat megnevezése: Kutatási szerződés (4700158153)

A pályázati téma megnevezése: Nanosentry alapú connectome térképezés

A pályázati támogatás mértéke: összesen: 16.000 E Ft (2013: 8.000 E Ft)

A pályázat megnevezése: KTIA Piacorientált kutatás-fejlesztési tevékenység támogatása a közép-magyarországi régióban (KMR_12-1-2012-0112)

A pályázati téma megnevezése: Kalciumérzékelő fehérjét szövetspecifikusan kifejező transzgenikus patkányok létrehozása in vivo gyógyszervizsgálatok céljára

A pályázati támogatás mértéke: összesen 71.784.125 Ft (2013: 51.476.784 Ft)

A pályázat keretében 2013-ban végzett munka fontosabb eredményei: Kalcium-szenzitív fehérjét expresszáló új patkány állatmodellt hoztak létre és karakterizálták.

A pályázat megnevezése: OTKA-pályázat (K 108752)

A pályázati téma megnevezése: Szintetikus kromo/fluorogén receptorok biomolekulák és ionok felismerésére

A pályázati támogatás mértéke: összesen: 17 550 E Ft (2013: 5 154 E Ft)

Podand, illetve hidroxikromon szerkezetű fluoescens nukleotidszenzorok érzékenységét és szelektivitását jellemezték spektroszkópiai kísérletek alapján.

Cukor-alapú királis fluoescens koronaéterek komplexképzését vizsgálták királis aminosavakkal és aminosavakkal, így jellemezve a koronaéterek alkalmazhatóságát királis aminovegyületek kimutatására.

Fluoescens jelzőanyagokként alkalmazott kumarinszármazékok gerjesztett állapotú tulajdonságait határozták meg időfelbontásos fluoescencia-kísérletekkel.

Lendület Fehérje Kölcsönhatás Kutatócsoport

A pályázati téma megnevezése: Jelátviteli fehérje komplexek: szerkezet, funkció és hatóanyag tervezés

A pályázati támogatás mértéke: összesen: kb. 300 M Ft (2013–2018)

A pályázat keretében 2013-ban végzett munka fontosabb eredményei:

A csoport munkája a témában a rákos és gyulladásos folyamatokban szerepet játszó kölcsönhatásokat vizsgálja és létrehoz olyan eljárásokat, melyek révén a jelátviteli folyamatok zavarai korrigálhatók.

V. A 2013-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Grabundzija I, Wang J, Sebe A, Erdei Z, Kajdi R, Devaraj A et al. (9, Sarkadi B): Sleeping Beauty transposon-based system for cellular reprogramming and targeted gene insertion in induced pluripotent stem cells. *Nucleic Acids Res.*, 41(3): 1829-1847 (2013) <http://real.mtak.hu/9777/>
2. Okiyonedo T, Veit G, Dekkers JF, Bagdany M, Soya N, Xu H et al. (7, Simon A): Mechanism-based corrector combination restores $\Delta F508$ -CFTR folding and function. *Nature Chemical Biology*, 9(7): 444-454 (2013) <http://real.mtak.hu/8266/>
3. Wintgens V, Le Coeur C, Amiel C, Guigner J, Harangozó JG, Miskolczi Zs, Biczók L: 4-Sulfonatocalix[6]arene-induced aggregation of ionic liquids. *Langmuir*, 29: 7682-7688 (2013) <http://real.mtak.hu/6342/>
4. Apáti Á, Pászty K, Hegedűs L, Kolacsek O, Orbán TI, Erdei Z et al. (4: Péntek A, Enyedi A): Characterization of calcium signals in human embryonic stem cells and in their differentiated offspring by a stably integrated calcium indicator protein. *Cell Signal*, 25(4): 752-9 (2013) <http://real.mtak.hu/id/eprint/4363>
5. Maksay G: Asymmetric perturbations of pLGICs: action! *Trends in Pharmacological Sciences*, 34: 299-300 (2013) <http://real.mtak.hu/5489/>
6. Pomozi V, Le Saux O, Brampton C, Apana A, Iliás A, Szeri F, Martin L, Monostory K, Paku S, Sarkadi B, Szakács G, Váradi A: ABCC6 is a basolateral plasma membrane protein. *Circ Res.*, 112: 148-151 (2013) <http://real.mtak.hu/7119/>
7. Nyitrai G, Keszthelyi T, Bóta A, Simon Á, Tőke O, Horváth G, Pál I, Kardos J, Héja L: Sodium selective ion channel formation in living cell membranes by polyamidoamine dendrimer. *Biochimica et Biophysica Acta*, 1828(8): 1873-80 (2013) <http://real.mtak.hu/5966/>

8. Pál I, Nyitrai G, Kardos J, Héja L: Neuronal and astroglial correlates underlying spatiotemporal intrinsic optical signal in the rat hippocampal slice. *PLoS ONE*, 8(3): e57694 (2013) <http://real.mtak.hu/4353/>
9. Szabo M, Veres Z, Baranyai Z, Jakab F, Jemnitz K: Comparison of human hepatoma HepaRG cells with human and rat hepatocytes in uptake transport assays in order to predict drug induced hepatotoxicity. *PLoS ONE*, 8(3): 1-8 (2013) <http://real.mtak.hu/4428/>
10. Domonkos C, Fitos I, Visy J, Zsila F: Fatty acid modulated human serum albumin binding of the β -carboline alkaloids norharmine and harmine. *Molecular Pharmaceutics*, 10(12): 4706-4716 (2013) <http://real.mtak.hu/7091/>
11. Berényi Sz, Mihály J, Kristyán S, Naszályi Nagy L, Telegdi J, Bóta A: Thermotropic and structural effects of poly(malic acid) on fully hydrated multilamellar DPPC–water systems. *Biophysica et Biophysica Acta Biomembranes*, 1828: 661-669 (2013) <http://real.mtak.hu/4347/>
12. Bacher F, Enyedy ÉA, Nagy NV, Rockenbauer A, Bognár GM, Trondl R et al: Copper(II) Complexes with Highly Water-Soluble L- and D-Proline Thiosemicarbazone Conjugates as Potential Inhibitors of Topoisomerase II α . *Inorganic Chemistry*, 52: 8895-8908 (2013) <http://real.mtak.hu/7874/>
13. Bakó I, Bencsura Á, Hermansson K, Bálint Sz, Grósz T, Chihaiia V, Olah J: Hydrogen bond network topology in liquid water and methanol: a graph theory approach. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 15(36): 15163-15171 (2013) <http://real.mtak.hu/6742/>
14. Masoudi N, Fancsalszky L, Pourkarimi E, Vellai T, Alexa A, Reményi A, Gartner A, Mehta A, Takács-Vellai K: The NM23-H1/H2 homolog NDK-1 is required for full activation of Ras signaling in *C. elegans*. *Development*, 140: 3486-3495 (2013) <http://dev.biologists.org/content/140/16/3486.short?rss=1>
15. Czirok JB, Bojtár M, Hessz D, Baranyai P, Drahos L, Kubinyi M, Bitter I: Aminonaphthalimide-based dipodal imidazolium/triazole receptors for fluorescent sensing of nucleoside polyphosphates. *Sensor Actuat B-Chem*, 182: 280-287 (2013) <http://real.mtak.hu/6539/>

MTA TERMÉSZETTUDOMÁNYI KUTATÓKÖZPONT
MŰSZAKI FIZIKAI ÉS ANYAGTUDOMÁNYI INTÉZET

1121 Budapest, Konkoly Thege M. út 29-33.
telefon: (1) 392 2225; fax: (1) 392 2226; e-mail: barsony.istvan@ttk.mta.hu
honlap: www.ttk.mta.hu/intezetek/muszaki-fizikai-es-anyagtudomanyi-intezet/
igazgató: Bársony István

I. A kutatóhely fő feladatai 2013-ban

Az intézet meghatározott stratégia szerint, mint multidiszciplináris rendszerintegrátor folytatja a nanoméretű szerkezetek és architektúrák, funkcionális anyagok tulajdonságainak felfedező kutatását és az ismeretek kreatív alkalmazását integrált mikro- és nanorendszerekben. Az MFA eredményei, így a tudásmetriai mutatókon túl a benyújtott szabadalmakban, PhD képzési és egyéb oktatási támogatásban, a tudományos eredmények ipari hasznosításában, komplex módon testesülnek meg.

Az MFA tevékenységét a KFKI Csillebérci kampuszon végzi; immár az egy évvel korábbinál 20%-kal kisebb területen, mintegy 5000 m²-en. 2013-ban a tudományos munkán túlmenően befejeződtek a CERN@Wigner projekt miatt szükségessé vált laboratóriumok átköltöztetésének és az épületek felújításának feladatai, valamint átalakításra került az intézeti tanácsterem is.

Az MFA belső szervezeti felállása 2013-ban kis mértékben változott. A *Kerámia és Nanokompozitok Osztály* megszűnt, munkatársait és feladatait a *Vékonyréteg-fizika* és a *Mikrotechnológia Osztály* vette át. Önálló kutatási egységként létrejött a *Nanobioszenzorika Lendület Kutatócsoport*.

2013-ban 75 pályázatuk futott párhuzamosan, ebből 5 ipari fejlesztést végző KMR, 10 EU FP7-es, 2 db ENIAC, 26 OTKA és számos bilaterális projekt. Az év folyamán négy új PhD fokozat, 3 új MTA doktora fokozat született. 32 PhD kutatás témavezetése folyt az intézetben. Kiugróan magas a TDK (16), BSc (30), MSc (21) témavezetések száma, ami a földrajzi távolság ellenére az intézet attraktivitásának bizonyítéka. Nyolc poszt doktoruk dolgozott külföldi vezető intézményekben.

II. A 2013-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Mikrotechnológiai Osztály

Magyarország egyetlen komplett Si CMOS technológiai sorát üzemelteti. Fő tevékenysége Si alapú érzékelők kutatása, új érzékelési elvek kidolgozása és új funkciójú nano- és mikroméretű eszközök integrált megvalósítása, a kapcsolódó technológiák kidolgozása. Ugrásszerű az igény olyan új alkalmazási területekről, mint a gyógyászat, például a személyi diagnosztika (personalized diagnosis) és gyógyszerbejuttatás (personalized medicine).

2013 főbb eredményei:

- Minőségi az előrelépés a szimulációs háttér általános alkalmazásában valamennyi kutatási területen a tervezésben és karakterizációban, ami a következő évek eredményességét alapozza meg.
- Számos új technológiai műveletet fejlesztettek ki és vezettek be Si, polimer, üveg valamint vegyület-félvezető alapú mikro- és nanoérezkelő rendszerek előállításában.

- Tovább folytatódott hazai és nemzetközi kutatási projektek keretében a Mikroelektromechanikai rendszerek (MEMS) kutatása, fejlesztése és megvalósítása. Jelenleg szennyvizekben és talajvízben oldott szénhidrogének detektálására és folyamatos monitorozására alkalmas műszercsalád fejlesztésén dolgoznak.
- A BioMEMS terület sikeresen zárta az ENIAC JTI CAJAL4EU projektet. A szívizom elhalás hatására a véráramban megjelenő fehérje érzékelésére kidolgozott nanopórusos mikrofluidikai érzékelő rendszer bizonyítottan alkalmas a célfehérje (troponin) nagyon kis koncentrációjának kimutatására akár egy csepp vérből is.
- Si alapú, agyi idegi folyamatok vizsgálatára lokális gyógyszeradagolás mellett is alkalmas NeuroMEMS beültethető eszközöket kutattak. Az agyi elektróda K+F a TTK intézetével (KPI) közös kutatási témájuk a NAP pályázatban.
- Polimer alapú elektródahálózatok alkalmazhatóságát bizonyították US együttműködések keretében.
- A NEMS (nano-elektromechanikai rendszerek) kutatás kvázi egydimenziós nanostruktúrák előállítására, vizsgálatára és hasznosítására területén volt igen sikeres. Megmutatták, hogy az integrált ZnO nanorudak nem csak mechanikai, kémiai, biológiai érzékelő-struktúrák, valamint nanotranszisztorok létrehozására alkalmasak, de segítségével növelhető a félvezető, illetve kompozit napelem struktúrák hatásfoka is.
- A 2013-ban indult PIEZOMAT FP7 projektjük célja az ujjlenyomat vizsgálatára alkalmas, rendezett ZnO nanokristályokból álló új típusú nanoérezékelő szerkezetek kutatás-fejlesztése.

Nanoszerkezetek Osztály

Legfontosabb eredményei 2013-ban:

- Arany hordozó felületére transzferált, CVD módszerrel növesztett, grafénban STM litográfiás eljárással kristálytanilag orientált, éllel rendelkező nanométeres szélességű nanoszalagokat alakítottak ki. Elsőként igazolták kísérletileg, hogy a karosszék típusú éllel rendelkező grafén nanoszalagok sávszerkezetében a szalag szélességével fordítottan arányos tiltott sáv nyílik a kvantumozás következtében. Kimutatták, hogy a legegyszerűbb elméleti modellel ellentétben a cikk-cakk élű nanoszalagok is félvezető jellegűt mutatnak 8 nanométeres szélességig, e felett viszont ismét fém viselkedést figyeltek meg az alagútspektroszkópiás mérésekben. Elméleti modellt dolgoztak ki a jelenség magyarázatára.
- Elsőként dolgoztak ki egy olyan AFM-litográfiás módszert, amelynek segítségével grafén rétegekben tetszőleges mechanikai feszültségprofil alakítható ki, egy- és kétdimenziós feszültségű szuperrácsokat készítettek SiO₂ hordozóra felvitt grafén mintákban. A grafénban keltett mechanikai feszültség az elektronszerkezet tervezhető módosulásához vezet, ezáltal új, izgalmas tulajdonságok hozhatók létre, akár hangolható módon is.
- Oxidáción alapuló eljárást dolgoztak ki, amellyel karosszék élű grafén nanoarchitektúrák hozhatók létre. Tömbszerű grafén legfelső rétegei pontszerű kristályhibák környezetében szelektíven oxidálódnak, ezzel szabályos, karosszék élű hatszögek jönnek létre. A hatszögek mérete jól szabályozható a kezelés hőmérsékletének, időtartamának és az atmoszféra oxigéntartalmának változtatásával. Igazolták, hogy az ilyen módon mintázott grafén rétegek átvihetők szigetelő hordozóra úgy, hogy a mintázat megőrződik.
- Pásztázószondás kísérleti és hullámcsomag-dinamikai szimulációs módszerrel, elsőként mutatták ki, hogy a CVD grafén szemcsehatárai jellemző módon eltérnek a magasabb hőmérsékleten előállított grafén szemcsehatáraitól, ami jelentős mértékben a kettős koordinációjú szénatomoknak tulajdonítható. Számítógépes szimuláció segítségével megmutatták, hogy az egyenes és „kígyózó” szemcsehatárokon keresztüli töltéstranszport

nem tér el drasztikusan, ha ezek nem tartalmaznak kettős koordinációjú szénatomokat, viszont ez utóbbiak jelenlétében a transzmisszió harmadára csökken.

- Különbféle kék boglárkalepkék színét adó nanoarchitektúrákat vizsgáltak biológiai, szerkezeti és gáz/gőzérzékelési szempontok szerint. Hőmérsékletfüggő mérésekkel megmutatták, hogy adott hőmérsékleten és gőz parciális nyomás mellett letörés-szerű a színvesztés. Ez megerősíti azt a korábbi feltételezést, hogy az optikai tulajdonságok gáz/gőz-környezettől függő változását elsősorban a kapilláris kondenzáció jelensége okozza. ALD rétegleváltással a lepkeszárny–nanoarchitektúrák konformálisan bevonhatók tetszőleges vastagságú Al_2O_3 réteggel, így a biológiai eredetű nanoarchitektúra tulajdonságai hangolhatók.

Nanobioszenzorika Lendület Kutatócsoport

A kutatócsoport 2012 júliusában alakult, kutatási profilja jelölésmentes optikai bioszenzorok fejlesztése és alkalmazása, a vizsgált biológiai-biofizikai folyamatok modellezése. 2013-ban kialakítottak egy sejt kultúrák laboratóriumot, lehetővé téve a jelenleg még unikális „élő sejtek jelölésmentes bioszenzorikája” kutatási terület művelését. Magyarországon csak itt elérhető technikákat szereztek be: egy EPIC jelölésmentes többcsatornás optikai bioszenzor prototípust és egy M4 Holomonitort.

- Új kutatási irányokban, több vonalon is – mint a műszer-fejlesztés, sejtek által termelt mikrovezikulák monitorozása, flagellin alapú funkcionális rétegek alkalmazása, elméleti modellfejlesztés biológiai rétegek rendezettségének vizsgálatára – stratégiai eredményeket publikáltak rangos nemzetközi folyóiratokban.
- A világon elsőként sikerült élő sejt eredetű mikrovezikulák és emberi monociták adhéziós tulajdonságait jelölésmentes optikai bioszenzoron megmérniük SOTE, és ELTE csoportokkal együttműködve.
- Úttörő jellegűek a nanométeres biológiai filmek (fehérjék, lipid kettősrétegek) rendezettségének vizsgálatában elért eredményeik is, melyek az orvosi diagnosztika különböző területein alkalmazhatók.

Vékonyréteg Fizika Osztály

Tradicionalis kutatási területük a polikristályos rétegek szerkezetének kialakulása, melyhez modelleket alkotnak és ismereteiket olyan területeken hasznosítják, mint kis súrlódású és kopásálló anyagok, kemény bevonatok, mágneses rétegek. Ugyancsak hagyományos területük a félvezető rétegek, heteroátmenetek és kontaktusainak kutatása. Harmadik terület az ion-szilárdtest kölcsönhatás, ion mixing rétegekben határfelületeken. A fenti témákat főként elektrondiffrakción alapuló metodikai fejlesztések segítik. A 2013 derekán az osztályba integrált korszerű kerámiák és biokompatibilis implantátumok fejlesztése az egyik legsikeresebb témájuk.

- Megmutatták, hogy TiN vékonyrétegekben a szokásos $\langle 111 \rangle$ textúra helyett a $\langle 001 \rangle$ textúra akkor alakul ki, amikor a beépült oxigénszennyezés > 15 at%. XPS és TEM vizsgálataik világosan megmutatták, hogy a $\langle 111 \rangle$ orientációjú kristályok felületén kétdimenziós TiO_2 fedőréteg alakul ki, míg a $\langle 001 \rangle$ orientációjú kristályok felületére érkező oxigén atomok jelentős része beoldódik a TiN kristályrácsba.
- Önszerveződő diffúziós barrier-rétegek fejlesztése során pontosították a Cu-Mn rendszer szerkezeti zóna diagramját. Megmérték a feltárt fázisok elektromos és mechanikai tulajdonságait. Végül a 40-70 at% Mn tartalmú, amorf rétegekben sikerült kimutatni egy hordozó menti határréteg kialakulását.

- Bioinert implantátumokhoz vizsgáltak argonban és nitrogénben növesztett titán-szén alapú vékonyrétegeket. A 200°C-on argonban növesztett TiC/amorf C réteg szerkezete néhány nanométeres nagyságú, köbös TiC kristályokból és amorf szén mátrixból tevődik össze, míg a nitrogénben növesztett réteg amorf, de atomi felbontásban látható, nagyon kicsi méretű (kb. 2 nm) TiCN kristályokat is tartalmaz. Kimutatták, hogy a tojáshegyből attritor őrléssel előállított nanoszerkezetű HAP (hidroxiapatit) könnyen lebomlik *in-vivo* környezetben és a csontregeneráció, csontpótlás legígéretesebb anyaga.
- Gyors hűtéssel szilárdított $Al_{91}Mn_6Fe_2Mo_1$ szalagokról megállapították, hogy a Mo adalék növelte a kvázikristályos fázis stabilitását. Al- Al_2O_3 nanokompozitokat állítottak elő SPS gyors szintereléssel. A tiszta Al összetevővel tömör, szinterelt testeket sikerült előállítani.
- Nanométeres mintázatú mágneses adathordozó témában alumínium-oxid rétegeket állítottak elő majd mintáztak meg impulzusüzemű excimer lézerrel. Szilika nanogömbök Langmuir-Blodgett (LB) filmjével borították a mintázandó felületet, amik egyedi gömblencséként fókuszálták a lézer fényét. A módszerrel szabályos nanogödör-hálózat alakítható ki.
- Igazolták, hogy gyémánt egykristály hordozó felületének nitridálása megakadályozza az inverziós domének kialakulását, ami a rajta növesztett GaN minőségét jelentősen javítja. Nikkelre leválasztott graféneken HRTEM vizsgálatokkal és a paraméterek optimalizálásával sikerült elérni, hogy (~20 μm átmérőjű) nagy területeken kizárólag egyrétegű, grafén keletkezzen.
- Hordozóra helyezett grafén jelentős geometriai torzulást szenved, ami korrugációhoz, illetve ún. moiré-szuperrácsok kialakulásához vezet. Atomi szintű szimulációkkal igazolták, hogy a megfigyelt 1,5 nm periodicitás 10 fokos elfordulási szögnek felel meg.
- Az Auger laborban a kémiai kötési állapotokat vizsgálták XPS módszerrel és eredményesen használták a REELS (reflection electron energy loss spectroscopy) technikát nanorészecskék detektálására.
- Modell szerkezeteken igazolták, hogy az amorf Si/nikkel határfelületen már 250°C-on nikkel-szilicid keletkezik, majd *in situ* hőkezeléssel bizonyították, hogy ez csökkenti az amorf Si kristályosodási hőmérsékletét. C/Si réteg ionkeverésével SiC-ben gazdag, 5-20 nm vastagságú réteget állítottak elő és megmutatták, hogy ez ellenáll a Si marószereknek.
- Új szoftver eszközt fejlesztettek ki szemcsehatárok HRTEM vizsgálatához, mely segíti polikristályos mintában olyan szomszédos szemcsék kiválasztását, amik a TEM goniométere által engedett döntési határokon belül úgy orientálhatók, hogy mindkét szemcse egyidejű nagyfeloldású TEM leképezése lehetővé váljon.

Fotonika Osztály

Fő feladatuk roncsolásmentes vizsgálati módszerek és integrált fotonikai rendszerek kutatás-fejlesztése.

- Nemzetközi (japán-magyar-cseh) együttműködésben roncsolásmentesen vizsgáltak neutronsugárzásnak kitett reaktor acél mintasorozatokat. Bizonyították, hogy az MFA-ban kifejlesztett Mágneses Adaptív Teszt (MAT) mind érzékenységben, mind megbízhatóságban a legjobb módszer a jobbára roncsolásos alternatív módszerekkel összehasonlítva. A MAT technika segítségével egyértelműen és megbízhatóan becsülhető a várható maradék élettartam.
- Egy EU FP7-es (Ultra-versatile Nanoparticle Integration into Organized Nanoclusters, UNION) projekt keretében gömb alakú, valamint alak és felületi kémia anizometriával rendelkező nanorészecskék előállításával és vizsgálatával foglalkoztak. Építőelemként felhasználva őket tanulmányozzák, a részecskék kontrollált aggregációját.

- Új módszert dolgoztak ki a részecskék előre meghatározott konfiguráció szerinti összekapcsolására a részecskék közötti kölcsönhatási potenciál tervezett, külső inger hatására bekövetkező módosításán keresztül, például arany nanorészecskék alkotta „nyaklánc” kialakulása periodikus rácsban.
- Hazai és nemzetközi projektek keretében fejlesztik saját MFA-s szabadalom (USA, EU, japán) alapján az „Ipari méretű vékonyréteg optikai térképezésre szolgáló berendezés” prototípusait rekord méretű, 30, illetve 45 cm átmérőjű Si szeleten, valamint 60 és 90 cm-es méretű vékonyréteg mintákhoz.
- Az ún. szélesszögű spektroszkópiai ellipszométer témájában, illetve a vele folyamatos napelem-gyártásban végzett in-line vizsgálatok eredményeiről 2013 márciusa és 2014 márciusa között (egy év leforgása alatt) 8 meghívott előadást tartottak/tartanak rangos nemzetközi konferenciákon.

Komplex Rendszerek csoport

Tagjai a statisztikus fizika módszereit használják társadalmi dilemma helyzetek és potenciáljátékok elemzésére.

- Vizsgálták a társadalmi dilemma helyzeteket, ahol a sokszereplős rendszer résztvevői két elkülönülő gráfba rendezhetők, vagy ha a dinamikában eltérő sebességeket, illetve késleltetéseket különböztetnek meg. Az emberi viselkedés kísérleti megismerésében kialakuló új irányzatokat követve vizsgáltak olyan társadalmi rendszereket is, ahol már az emberi érzelmeket is beépítették a modellbe. Kiderült, hogy mindezen hatások külön-külön is képesek a társadalmat a tisztességesebb (közösségi érdeket szem előtt tartó) magatartás irányába terelni.
- A potenciáljátékok elemzésének kiemelt szerepét az biztosítja, hogy ilyenkor az egyensúlyi statisztikus fizika és termodinamika törvényei érvényben maradnak, és az eredményeket más élő rendszerek megismerésénél hasznosíthatják. Ezek a vizsgálatok hozták felszínre, hogy snóblizás és kő-papír-olló típusú játékok alapvető/elemi kölcsönhatásként értelmezhetők.
- Egy ötfajos térbeli ciklikus (ún. kő-papír-olló-gyík-Spock) ragadozó zsákmány modellben a kétféle inváziós ráta egy adott arányánál a megjelenő divergenciát a fluktuációkban a szilárdtest-fizikai fononok leírásánál használt komplex függvényekre épülő matematikai módszerrel sikerült értelmezni.
- A terjedési folyamatokat általánosított kisvilág hálózatokon tanulmányozták. A befagyasztott hálózatokban a Griffiths fázis jelenlétének számszerűsítését segítő hatékony analitikus és numerikus módszereket dolgoztak ki.
- A népcsoportok népzenei hagyatékában megőrzött hasonlatosságok matematikai elemzése a vogul, lapp, észt, és közép-andoki indián 2400 dallamával bővült. A genetikai adathalmazban megjelenő hasonló hasonlatosság kimutatására szolgáló algoritmusok megbízhatóságát is sikerült javítani.
- A csoport háttérrel biztosít egy olyan K+F tevékenységhez, ahol a digitális képfeldolgozásban és lényeg-kiemelésben szerzett korábbi tapasztalatok a mozgó objektumok vagy háttér azonosításában, illetve számszerűsítésében hasznosul.

b) Tudomány és társadalom

Az utánpótlás biztosítása érdekében egyetemi oktatásban való személyes részvétel mellett:

- 26 Kárpát-medencei magyar középiskolás kisdíjakkal 2013-ban is megrendezték immár hatodik alkalommal az MFA Nyári Iskolát, ahol a diákok érdeklődésének a felkeltése a

- cél. Számukra az intézet biztosított bentlakásos egyhetes lehetőséget a tudományos kutatásba történő bekapcsolódásra.
- Az MFA által létrehozott Nanobusz, országosan számos helyszínen szerepelt óriási sikerrel a tudománynépszerűsítésben és nano-ismeretterjesztésben. A Nanobusz üzemeltetését 2013 októberétől az MTA intézetei által tulajdonolt KFKI Üzemeltető Kft. vette át.
 - Az MFA Nyílt Napok (közel 120 látogatóval) az érdeklődő adófizetőknek biztosítanak lehetőséget az intézet kutatómunkájába való betekintésre.
 - Új kezdeményezésként az MTA intézmények közül elsőként kapcsolódtak be a Lányok Napja nemzetközi rendezvénysorozatba, ahol elsősorban az intézet női munkatársai kalauzolták az érdeklődő lányokat az intézetben.
 - Oktatási és ismeretterjesztési célra az intézet fenntartja a <http://www.nanotechnology.hu> honlapot, ahol nanotechnológiai vonatkozású eredményeik szerepelnek közérthető megfogalmazásban. Innen letölthetők az ismeretterjesztő műsorok videói, cikkek anyagai. Ugyanitt érhető el a folyamatosan fejlesztett Web-Schrödinger nevű programjuk, amely a stacionárius és az időfüggő Schrödinger egyenlet numerikus megoldására szolgál. A program célja a kvantummechanikai jelenségek szemléletes bemutatása, például diákok számára.
 - Az intézet kutatási eredményeit az év során 5 kommunikációban ismertették az MTA honlapján és egyéb sajtóorgánumokban tekintélyes visszhanggal.
 - A társadalomtudományok számára természettudományos háttérrel biztosító evolúciós játékelmélet módszereit, céljait, eredményeit különböző fórumokon (egyetemi előadássorozatok, szemináriumok, nemzetközi nyári iskola, blog-os találkozók) népszerűsítették. Részt vettek a Természet Világa „Káosz, környezet, komplexitás” című tudománynépszerűsítő kiadványának megjelentetésében.
 - Igen széles körben (rádió, TV, előadások, könyv) sikerült ismertetni a különböző népcsoportok zenéje és nyelve közötti rokonság (hasonlatosság) számszerűsítésére kidolgozott módszerük eredményeit és ígéretes jövőbeli alkalmazásait.
 - Finanszírozás nélkül fenntartották és működtették az Integrált Mikro/Nanorendszerek Nemzeti Technológiai Platform (IMNTP) irodáját, honlapját a szakmai közvélemény tájékoztatására, illetve pályázati tevékenysége összehangolására.

Szabadalmak

2013-ban megadott hazai szabadalom: Eljárás maszk kialakítására görbült felületű test felületén és alkalmazásával felületi struktúra létrehozása orvosi implantátumon, Lajstromszám:229026, Magyar szabadalom

2013-ban megadott nemzetközi szabadalom: Imaging optical arrangement with a pinhole camera, NSZO: G01N21/00, G01N21/55, Lajstromszám: US 8,437,002 B2 esp@cenet link USA szabadalom.

<http://www.uspto.gov/web/patents/patog/week19/OG/html/1390-1/US08437002-20130507.html>

2013-ban megadott értékesített szabadalom (licence átadás): Imaging optical arrangement with a pinhole camera, NSZO: G01N21/00, G01N21/55, Lajstromszám: US 8,437,002 B2 esp@cenet link USA szabadalom. Korlátozott licence átadás 2017-ig.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2013-ban

Hazai kapcsolatok

Az MFA oktatási kapcsolatainak eredményessége:

Az MFA-ban hat emeritus és négy kinevezett egyetemi tanár, egy docens, két főiskolai tanár és négy habilitált doktor dolgozik. Vezető munkatársaik zöme oktat az ELTE, BME, SE, PE, DE, ME, SZTE, PTEK, PPKE, BMF különböző kurzusain, doktoraik tagjai a fenti egyetemek doktori iskoláinak, doktori és habilitációs tanácsának, többen a doktori iskolák alapító, illetve tőrzstagjai. Az intézetben működik a Pannon Egyetem MIK-vel közös Nanobioszenzorika Laboratórium, a BME VBMK-ral közös Nanokémiai Laboratórium, az ÓE KKVMK-val közös Molekulasugaras Epitaxiás Laboratórium, a BME TTK-val közös Elektronsugaras Litográfiai labor és a PPKE Információs Technológiai Karral közös MEMS-tervező laboratórium. Preparatív és analitikai laborjaikban rendszeres gyakorlatokat tartanak a graduális és posztgraduális képzés számára külső támogatás nélkül.

Az intézetben 2013-ban négyen szereztek PhD-fokozatot. 2013-ban 32 PhD-ösztöndíjas hallgató, illetve MTA fiatal kutatói álláshelyen foglalkoztatott fiatal folytatta PhD-kutatásait az MFA-ban.

További 28 MSc- és 30 BSc-dolgozat, valamint 19 TDK-munka témavezetését is vállalták. Diákjaik 2013-ban két OTDK első helyet, két 2. és egy 4. helyezést, valamint az egyetemi TDK-szekciókban 2 első (egyikük rektori különdíjas, másik Pungor Ernő díjas) és 3 egyéb helyezést értek el.

A beszámolási évben négy vezető munkatársuk védte meg MTA doktora címét. Ezzel az MFA munkatársak minősítettsége kiemelkedő szintet ért el

Részvétel a hazai tudományos közéletben:

Az MFA kutatói adtak két aktív MTA levelező tagot, két fő MTA doktorképviselőt, egy-egy tagot az Élettelen Természettudományi Szakbizottságban; az MTA Vagyonkezelő Testületben. Az MFA munkatársa közül kerül ki az MTA Elektronikai Eszközök és Technológiai Bizottság titkára és 7 tagja, az MTA Szilárdtestfizikai Bizottság négy tagja, a VEAB egy tagja, a VEAB Nanotechnológiai Munkabizottság négy tagja. Az MFA delegálta az OTKA Kollégium két tagját, a Fizika Zsűri Elnökét, az Informatikai és Villamos Zsűri egy tagját, az ELFT tanács egy tagját, az ELFT Vákuumfizikai Szakcsoport elnökét, ELFT Atom-, Molekulafizikai és Kvantumelektronikai Szakcsoport egy vezetőségi tagját, a Magyar Mikroszkópos Társulat elnökét és egy vezetőségi tagját, a Kémiai és Kohászati Munkabizottság elnökét, az Egészségügyi Telematikai Munkacsoport egy tagját, a Magyar Anyagtudományi Egyesület titkárát, az Integrált Mikro/nanoszerkezetek Nemzeti Technológiai Platform szakmai vezetőjét és irodavezetőjét.

Tagságok hazai bizottságokban:

- BME TTK, Fizika Doktori Tanács tagja (4 fő)
- BME VBK Doktori Tanács tagja
- BME VIK Villamosmérnöki Doktori Tanács tagja
- BME VIK Informatikai Doktori Tanács tagja
- PE MIK Molekuláris és Nanotechnológiai Doktori Tanácsa (elnök +4 tag)
- ELTE Fizikai Intézet, Fizika Doktori Tanács, tag
- ELTE Fizikai Intézet, Igazgató Tanács, tag
- ELTE, kari habilitációs Bizottság, tag

- Eötvös Lóránd Fizikai Társulat Atom-molekulafizikai és Kvantumelektronikai Szakcsoport vezetőségi tagja.
- Eötvös Lóránd Fizikai Társulat Felügyelő Bizottság, tag
- Eötvös Lóránd Fizikai Társulat Vákuumfizikai technológiai és Alkalmazásai Szakcsoportban tag, vezetőségi tag és elnök
- Eötvös Lóránd Fizikai Társulat, Díj Bizottság, tag
- Eötvös Lóránd Fizikai Társulat, tag
- Gépipari Tudományos Egyesület, tag
- Hírközlési és Informatikai Tudományos Egyesület, tag
- KFKI könyvtárbizottság, tag
- Magyar Anyagtudományi Egyesület elnökségi tagja
- Magyar Anyagtudományi Egyesület, titkár
- Magyar Biofizikai Társaság vezetőségi tagja
- Magyar Elektronmikroszkópos Társaság Kuratórium, titkár
- Magyar Mikroszkópos Társaság elnöke
- Magyar Innovációs Szövetség választmányának tagja
- Magyar Mérnökakadémia tagja
- Magyar Mikroszkópos Társaság, két vezetőségi tagja
- Magyar Művészeti Akadémia Népművészeti Kollégium – kollégiumi tag
- Magyar Nemzeti Bank – MNB Értékteremtők Klub – tag
- Magyar Nemzeti ILO Bizottság: tag
- Molekuláris és Nanotechnológiák Doktori Iskola, Pannon Egyetem, vezető
- MÖB Biológiai Szakmai Kollégium elnöke
- MTA Akusztikai Komplex Bizottság – bizottsági tag
- MTA Anyagtudományi és Technológiai Bizottság tagja
- MTA Anyagtudományi és Technológiai Bizottság, Nanoanyagok és Nanotechnológiák Albizottság, tag és elnök
- MTA Biofizikai Bizottság tagja
- MTA Biológiai Tudományok Osztálya, Biofizika Bizottság – tag
- MTA Elektronikus Eszközök és Technológiák Bizottságának 2 tagja és titkára
- MTA Felületkémi és Nanoszerkezetek Munkabizottság, tagja és titkára
- MTA Felületkémi és Nanoszerkezeti Munkabizottság, tag
- MTA Fizikai Osztály Doktori Bizottság, elnökhelyettes
- MTA Fizikai Osztály Doktori Bizottság, póttag
- MTA Fizikai Osztály tagja
- MTA Informatikai Tudományos Bizottság tag
- MTA Közgyűlés választott Doktor Képviselője
- MTA Közoktatási Elnöki Bizottságának tagja
- MTA Fizikai Tudományok Osztálya levelező tagja
- MTA Műszaki Tudományok Osztálya levelező tagja
- MTA Matematikai és Természettudományi Kuratórium tagja
- MTA Műszaki Tudományok Osztálya Elektronikus Eszközök és Technológiák Bizottság, tag
- MTA Statisztikus fizikai bizottsági tag
- MTA Szilárdtest-fizikai Bizottság, 6 tagja
- MTA Vagyonkezelői Testület választott tagja
- MTA Veszprémi Területi Bizottság, tagja és alelnöke
- MTA-IUVSTA Magyar Nemzeti Bizottság tagja
- Nők a Tudományban Egyesület, tag
- OTKA Fizika Zsűri elnök

- OTKA Informatikai és Villamosmérnöki zsűri, tag
- OTKA képviselője a Materials-ERA-NET Steering Board-ban
- OTKA Kollégium tagja
- Pannon Egyetem Egyetemi Doktori és Habilitációs Tanács tagja
- Pannon Egyetem MIK Molekuláris- és Nanotechnológiai Doktori Iskola tőrzstagja
- Pannon Egyetem Molekuláris- és Nanotechnológiák Doktori Iskola, tőrzstag
- Pécsi Tudomány Egyetem TTK Fizika Doktori Iskola alapító tagja
- Pécsi Tudományegyetem Fizika, Informatika doktori iskolájának alapító tagja
- Statisztikus Fizikai Bizottság, tag
- Tudományos Dolgozók Szakszervezete (TUDOSZ) országos elnökségi tag
- VEAB Nanotechnológiai Munkabizottság, tagja és elnöke

Hazai konferencia szervezések

- 2013. május 23–25. Mikroszkópos Konferencia (MMT), Siófok, szervező
- 2013. október 29. 2nd Hungarian–Korean Technology Day, szervező
- Pannon Tudományos Nap, Nagykanizsa, 2013. október 17.
- Műszaki Kémiai Napok 2013; Veszprém, 2013. április 23–25.
- MBFT XXIV. Kongresszus, Veszprém, 2013. augusztus 27–30.
- Lányok Napja 2013 április 25., szervező

Nemzetközi kapcsolatok

Az MTA TTK MFA a World Forum of Materials Research Institutes és az International Solid-state Lighting Alliance tagja.

Az MFA kutatói közül többen rendszeres bírálók az Európai Bizottságnál és az ERC programjaiban.

- Koreai–Magyar Nanotudományok Közös Laboratórium a Nanoszerkezetek Osztály kebelében az MTA és a Koreai Alap kutatási Tudományos Tanács közötti egyezmény keretében.
- Rendszeres munkakapcsolat a londoni Brown University-vel, Prof. Jeremy Ramsden, az MFA tanácsadója.
- Együttműködési megállapodása létrehozása a University „Mediterranea” of Reggio Calabria (Scientific Coordinator Prof Francesco Carlo Morabito, Head of the DICEAM Department Prof Nicola Moraci)-val.
- Licenzátadási szerződés és K+F együttműködés a svájci Creoptix S.A. céggel.
- Koreai–magyar technológia-transzfer workshopot szerveztek „Hungarian–Korean Technology Day” címmel a KOTRA és MFA szervezésében.

Részvétel 2013-as nemzetközi konferenciák szervezésében

- 19th International Conference on Chemistry, szekció társelnök
- 21st Soft Magnetic Materials Conference 1-4 September, 2013, Budapest – Local Organizing Committee
- 6th International Conference on Spectroscopic Ellipsometry, Kyoto, 2013.05.26–31., a Program Committee tag
- CompleNet 2013 Berlin, Germany, March 13–15., 2013
- EMAS-2013, Porto, 2013. máj. 12–16., Az International Scientific Committee tagja
- EUROSENSORS 2013, Barcelona – programbizottsági tag, session chair
- IEEE SENSORS 2013, programbizottsági tag
- IVC-19, ICN+T 2013, ICSS-15, Paris – Szeptember 9–13., 2013; szervezőbizottsági tag

- Microscopy Conference-2013 Regensburg, programbizottsági tag
- China Solid State Lighting Conference 2013, Beijing, round table discussion moderator
- THERMINIC 2013, Berlin – programbizottsági tag
- Transducers 2013, Barcelona – programbizottsági tag

Részvétel 2014-es és azt követő nemzetközi konferenciák előkészítésében

- 16th International Conference on Thin Films, Dubrovnik, 2014.10.13–16., International Organizing Committee tag
- 5th Workshop on Complex Networks, Bologna, Italy, March 12–14., 2014
- CIMTEC 2014 – 13th International Conference on Modern Materials and Technologies, International Advisory Board tagja
- EuroSIME 2015, pályázati ajánlattétel
- EUROSENSORS 2016, Budapest – chairman, elnyert pályázat előkészítése
- ICTF 16, 2014. október, Dubrovnik, programszervező
- Flagship Graphene Week-2014, International Advisory Board tagja
- JVC 15 (<http://www.iap.tuwien.ac.at/jvc15/>) 2014-es, Nemzetközi Programbizottsági tag
- MCM 2015, Eger pályázatának egyik készítője, és helyi szervezője <http://www.mcm2015.com/>
- Living Light 2014: Uniting biology and photonics – A memorial meeting in honour of Prof Jean-Pol Vigneron, International Advisory Board tagja

Külföldi céges együttműködések

- Tateyama Kagaku, Toyama, Japan
- Creoptix GmbH (www.creoptix.com) – témavezető
- Radosys
- CEA Institute for Nanoscience and Cryogenics kutatóintézet
- Rikola Ltd. megrendelésére NIR spektroszkópiában használható LED-ek fejlesztése
- TOPTIKA (München)
- MAHLE Motorkomponenten GmbH

Az intézményekkel való szervezett kapcsolatok teljes felsorolásától el kell tekinteni, hiszen több mint kétszáz intézményt kellene szerepeltetnünk. A rangos egyetemek (Cambridge, NIMS -Tsukuba, Osaka, Tokyo, Tohoku-Sendai, Linköping, Erlangen, Namur, SUNY Stony Brook, Barcelona, Thessaloniki, Istanbul, TU Helsinki, J. Kepler Uni. Linz, Krakow, Wien, a Max Planck és Fraunhofer intézetek sora, Akita Research Center, stb.) mellett 2010-ben is olyan ipari cégekkel dolgoztak együtt, mint THALES, Mahle, Volvo, GE Hungary, Tateyama, Picosun Oy, Weszta-T, Állami Nyomda, Semilab, BEH, stb.

Gyümölcsöző a kutatási-oktatási kapcsolat a Babes-Bolyai Egyetemmel (Kolozsvár) és a Sapientia Egyetemmel.

Az intézet a beszámolási évben egy-egy orosz, belga, cseh, szlovák, lengyel, ukrán és bolgár MTA kétoldalú egyezményes kapcsolatot ápol.

TÉT támogatással egy-egy japán, osztrák, horvát, szlovák és két indiai kapcsolatuk volt.

Nemzetközi szervezeti, szerkesztőbizottsági tagságok

Nemzetközi folyóiratok szerkesztőbizottsági tagságai

Thin Solid Films, Romanian Physics, Acta Physica Slovaca, PLoS ONE, Inzynieria Materialowa (Kiadja Sigma Not, Warsaw), Nanopages, valamint a „The Int. Res. and Rev. J. for Microscopy”, „IEEE Sensors Journal” szerkesztőbizottsági tagja. Továbbá:

- Academic and Scientific Publishing subject wise journals
- Conference on Electromagnetic Field Computations
- Frontiers in Ecology and Evolution.
- Frontiers in Physics
- Frontiers in Sensors
- Hindawi, Journal of Sensors (open access)
- Materials Science and Engineering Progress
- Open Journal of Composite Materials (OJCM)
- Open Journal of Organic Polymer Materials (OJOPM)
- Physica status solidi (b) – Guest Editor
- Science and Education a New Dimension (ISSN 2308 5258)
- Scientific Reports
- Természet Világa „Káosz, környezet, komplexitás” című különszáma

Nemzetközi tagságok

A European Microbeam Analysis Society elnökhelyettes, IUVSTA hazai képviselő, IUVSTA Nemz. Bizottság több tagja, a vékonyréteg divízió vezetőségének tagja, EUROSENSORS International Steering Committee tagja, ENIAC Scientific Council tagja.

- Böhmische Physical Society (USA) tag
- COST – „Designing novel materials for nanodevices – from Theory to Practice (NanoTP)” magyar Management Committee tag.
- Cseh–Szlovák Mikroszkópos Egyesület, tag
- E-MRS, Executive Committee – tag
- ENIAC Scientific Council magyar tagja.
- ERC Advanced Grant Panel 7 tagja
- European Microscopy Society, számos tagja
- EUROSENSORS Fellow Award Committee elnöke
- EUROSENSORS International Steering Committee szavazó tagja.
- IEEE tag
- International Solid-state Lighting Alliance Advisory Board tagja
- IUVSTA Biointerfaces steering committee
- IUVSTA Nanometer Structures Divízió delegáltja
- IUVSTA, tag, Nanoszerkezetek divízió magyar vezetője
- MRS tag
- Royal Microscopical Society (UK) tag
- Szlovák Tudományos Akadémia, köztestületi tag
- The Association for Iron & Steel Technology, tag
- Universal Network for Magnetic Nondestructive Evaluation elnöke

IV. A 2013-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Hazai pályázatok

- OTKA tárgyévben: 2 kutatási (1+ 1 (2014. januárban kezdődik))
- Bolyai Kutatói Ösztöndíj 5 futó pályázat + 2 új nyertes
- TÉT: 3 új TÉT és 2 MTA bilaterális pályázat nyert

Külföldi pályázatok

- 5 nyertes FP7 pályázat (PiezoMAT, SEA4KET, Hyporth, StatPhysNetFormGame, GraNaRip)
- 1 ENIAC JTI nyert (E450EDL)
- 1 Office of Naval Research pályázat

Díjak, címek, fokozatok

Magyar Érdemrend Tisztikeresztje
Máriás Antal Emlékérem
OTKA Ipolyi Arnold Tudományfejlesztési Díj
Honorary Membership of the European Microbeam Analysis Society
MFA Intézeti Díj
MFA Ifjúsági Díj
Kiváló Tudománytámogatásért – MFA Díj
MTA levelező tagja
MTA doktora (4 fő)
MTA Ifjúsági Díj
MTA Posztdoktori Támogatás
Bolyai János Kutatói Ösztöndíj
PhD-fokozatszerzés (4 fő)

V. A 2013-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Balácsi K, Lukács IE, Gurbán S, Menyhárd M, Bacáková L, Vandrovcová M, Balácsi C: Structural, mechanical and biological comparison of TiC and TiCN nanocomposites films. *J Eur Ceram Soc*, 33(12): 2217-2221 (2013) <http://real.mtak.hu/5563/>
2. Fogarassy Z, Dobrik G, Varga LK, Biró LP, Lábár JL: Growth of Ni layers on single crystal sapphire substrates. *Thin Solid Films*, 539: 96-101 (2013) <http://real.mtak.hu/5688/>
3. Pécz B, Tóth L, Barna A, Tsiakatouras G, Ajagunna AO, Kovács A, Georgakilas A: Structural characteristics of single crystalline GaN films grown on (111) diamond with AlN buffer. *Diam Relat Mat*, 34: 9-12 (2013) <http://real.mtak.hu/4640/>
4. Perc M, Gómez-Gardenes J, Szolnoki A, Floría A, Moreno Y: Evolutionary dynamics of group interactions on structured populations: a review. *J. Roy. Soc. Interface*, 10(80): 20120997/1-17 (2013) <http://real.mtak.hu/4644/>
5. Vukov J, Szolnoki A, Szabó G: Diverging fluctuations in a spatial five-species cyclic dominance game. *Phys. Rev. E*, 88(2): 022123/1-8 (2013) <http://real.mtak.hu/6242/>
6. Nemes-Incze P, Vancsó P, Osváth Z, Márk GI, Jin X, Kim Y.-S, Hwang C, Lambin Ph, Chapelier C, Biró LP: Electronic states of disordered grain boundaries in graphene prepared by chemical vapor deposition. *Carbon*, 64: 178-186 (2013) <http://real.mtak.hu/6653/>
7. Dobrik G, Tapasztó L, Biró LP: Selective etching of armchair edges in graphite. *Carbon*, 56: 332-338 (2013) <http://real.mtak.hu/4916/>

8. Pongrácz A, Fekete Z, Márton G, Bérces Zs, Ulbert I, Fürjes P: Deep-brain silicon multielectrodes for simultaneous neural recording and drug delivery. *Sensor Actuat B Chem*, 189: 97-105 (2013) <http://real.mtak.hu/4915/>
9. Szabó Z, Volk J, Fülöp E, Deák A, Bársony I: Regular ZnO nanopillar arrays by nanosphere photolithography. *Photonic Nanostructure*, 11(1):1-7 (2013) <http://real.mtak.hu/4646/>
10. Kovács N, Patkó D, Orgován N, Kurunczi S, Ramsden J, Vonderviszt F, Horvath R: Optical anisotropy of flagellin layers: in-situ and label-free measurement of adsorbed protein orientation using OWLS. *Analytical Chemistry*, 85(11): 5382-5387 (2013) <http://real.mtak.hu/5844/>
11. Patko D, Gyorgy B, Nemeth A, Szabó-Taylor K, Kittel A, Buzas EI, Horvath R: Label-free optical monitoring of surface adhesion of extracellular vesicles by grating coupled interferometry. *Sensors and Actuators B-Chemical*, 188: 697-701 (2013) <http://real.mtak.hu/6845/>
12. Gergely-Fülöp E, Nagy N, Deák A: Reversible Shape Transition: Plasmonic Nanorods in Elastic Nanocontainers. *Materials Chemistry and Physics*, 141(1): 343-347 (2013) <http://real.mtak.hu/6371>
13. Lohner T, Csíkvári P, Petrik P, Hárs G: Spectroellipsometric characterization of nanocrystalline diamond layers. *Applied Surface Science*, 281: 113-117 (2013) <http://real.mtak.hu/6056>

MTA TERMÉSZETTUDOMÁNYI KUTATÓKÖZPONT
SZERVES KÉMIAI INTÉZET

1025 Budapest, Pusztaszeri út 59-67.
telefon: (1) 438 1155; fax: (1) 438 1143
e-mail: soos.tibor@ttk.mta.hu; honlap: www.ttk.mta.hu
igazgató: Keserű György; 2014. január 1-jétől: Soós Tibor

I. A kutatóhely fő feladatai 2013-ban

A Szerves Kémiai Intézet 2012-ben alakult meg a Természettudományi Kutatóközponton belüli kutató egységek átszervezésével. A korábbi évek szerteágazó és elaprózódó kutatási területeinek újraszervezése (új tematikák indítása, illetve lecsengő kutatási irányok elhagyása) már akkor elkezdődött, de a lényegi és jelentős átalakítások a 2013-as esztendőben valósultak meg. A Szerves Kémiai Intézet továbbra is a szerves kémia és szerkezetvizsgálat kiválasztott területeinek kutatását tekinti tudományos alapfeladatának, azonban a tematikai megújulás jegyében olyan irányzatok is elindultak, mint például a gyógyszerkémiai és kémiai biológiai kutatások, amelyek speciális módon kiaknázzák a szerves kémiában rejlő potenciált biológiai problémák megoldására. A preparatív szerves kémiához kötődően pillanatnyilag öt kutatási irány van jelen: 1) gyógyszerkémiai kutatások, 2) organokatalízis, 3) kémiai biológia, 4) szupramolekuláris kémia, 5) szénhidrátkémia. Az intézeti felépítés érdeme, hogy a szerves kémiához kapcsolódó legfontosabb szerkezetvizsgáló módszerek (NMR, tömegspektrometria és egykristály röntgen) alkalmazása és azok fejlesztése szintén az intézet keretein belül folynak. A sokszor összehangolt kutatások így kölcsönösen elősegítik a műszeres és a preparatív területek tevékenységét és fejlődését. E vonatkozásban kiemelt feladatként szerepel a kémiai folyamatok elméleti módon történő értelmezése.

A kutatóhely egyik fontos közfeladata az egyetemi elméleti és gyakorlati oktatásban való részvétel. Elvárás a vezető kutatóktól előadások és speciálkollégiumok tartása az egyetemeken. A gyakorlati oktatás vonatkozásában a graduális és posztgraduális laboratóriumi gyakorlatok, illetve kutatások (egyetemi szakdolgozatok kísérleti munkája, PhD-kutatási munkák stb.) az intézeti feladatok kiemelt részét képezik.

II. A 2013-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Gyógyszerkémiai Kutatócsoport

2013-ban indult meg a gyógyszerkémiai kutatás a nagy hagyományokkal jellemző Heterociklusos Kémiai Kutatócsoport bázisán. Az elmúlt évben a legjelentősebb eredményük egy hatékony $\alpha 2C$ receptoron aktív fragens, melyet virtuális szűréssel azonosítottak. A vegyület és származékainak szintézise után a biológiai vizsgálatok következtek, amely megmutatta azt, hogy az általuk kifejlesztett molekula már fragensként is négyszer hatékonyabbnak bizonyult a referenciavegyületnél. Ez a kutatás a Richter Gedeon Nyrt.-vel történő együttműködésben zajlik.

Az elmúlt évben a kutatócsoport az EGIS Nyrt.-vel együttműködve generikus gyógyszerek eljárásfejlesztését sikeresen elvégezte.

Már több mint 8 éve a fémmentes aktiválások fejlesztésével és alkalmazásával foglalkoznak. Egyik kiemelt kutatási területük a *bifunkcionális organokatalizátorok fejlesztése és mechanizmusának vizsgálata*. Annak érdekében, hogy az organokatalitikus módszer az ipari alkalmazás kritériumrendszerének is megfeleljen, több kutatási projektet valósítottak meg. Így például az elmúlt évben egy szisztematikus fejlesztés eredményeként sikerült előállítani egy robusztus, olcsó és hatékony immobilizált bifunkciós négyzetamid katalizátort, amely elsősorban Michael-addíciós reakciókat katalizál, például az acetilaceton és nitrosztirolok közt. Az immobilizált katalizátor szintézise olcsó és méretnövelhető, mivel szilárd hordozóként egy meglehetősen olcsó, tonnás tételben is gyártott mikro- és makropórusos polisztirolo gyantát alkalmaztak. A kifejlesztett katalizátor enantio- és diasztereoindukciós hatása szinte teljes mértékben megegyezett a homogén katalizátor hatásával, s így mind ún. batch és átáramlós üzemmódban alkalmazni lehetett.

Az eredmények publikálása után (Eur.JOC, 2013, 4490), a kutatásaik főbb eredményeiről két összefoglaló közlemény is kiemelten értekezett. A Synfacts című újságban az immobilizált reagensek és katalizátorok áttekintésekor eredményeiket, mint az elmúlt időszak egyik fontos előrelépéseként mutatták be (Synfact 2013, 1135). Ezzel párhuzamosan, a Synlett újságban egy rövid, ún. spotlight (Synlett 2014, 298) jellegű cikkben a négyzetamid típusú katalizátorok kapcsán hivatkoznak munkájukra, megemlítve annak számos előnyös tulajdonságát, s előrevetítve az ipari léptékű alkalmazás lehetőségét is.

Bár az elmúlt évtizedben jelentős fejlődés ment végbe az organokatalizátorok fejlesztése és alkalmazása terén, azonban a katalitikus folyamatok mechanizmusáról az ismeretek mind a mai napig nem kellően teljeseek. Ennek érdekében számos olyan kutatási projektet kezdeményeztek, amely a bifunkcionális organokatalízis mechanizmusának alaposabb feltárására irányul.

Így az elmúlt évben többek között kimutatták, hogy a bifunkcionális tiokarbamid és négyzetamid katalizátorok mechanizmusa valóban megfelel egy kooperatív bifunkcionális mechanizmusnak, azaz a terner komplexben kialakuló C-C vagy C-X kötés a katalitikus folyamat sebességmeghatározó lépése. A kinetikai kép alapján azonban csak részleges információik voltak a kulcsfontosságú terner komplex szerkezetéről.

A bifunkcionális mechanizmus mélyebb szintű megértésének érdekében egy közös kutatási programot alakítottak ki az intézetben működő Elméleti Kémiai Kutatócsoporttal. A DFT számítások ugyanis a sebességmeghatározó elemi lépésről tudnak részletes szerkezeti információt szolgálni. A közös munka során rámutattak arra, hogy a bifunkcionális négyzetamidok reakciójában a bifunkcionális mechanizmus valójában egy általános mechanizmuskép, amely több változatot is magában foglal. Annak érdekében, hogy egy általánosabb, könnyen értelmezhető képet adjanak, végrehajtottak egy újszerű analízist, az ún. átmeneti állapot fragmensanalízisét. Ezen munka rámutatott arra, hogy a reakció során tulajdonképpen egy királis oxyanion üreg keletkezik, amely orientálja és stabilizálja az átmeneti állapot anionos jellegű fragmensét. Azt, hogy melyik reakcióút dominál, és milyen termék képződik, a rigid oxyanion üreghöz való kötődés energetikája szabja meg. Eredményeiket a Chemistry European Journal közlésre elfogadta.

Az Organokatalízis csoport kutatási törekvéseinek és tevékenységének másik fontos eleme a *frusztrált Lewis párok* (FLP) kémiájának tanulmányozása. Ez a kutatási irányvonal három évvel ezelőtt támogatást nyert a *Lendület program* keretében. Céljuk, hogy tudatosan alkalmazzák és kiaknázzák a frusztrált Lewis párok által nyújtott egyedi kémiai aktiválási lehetőségeket. A frusztrált Lewis párok a sztérikus gátlásra épülő különleges sav-bázis párok, ahol a sav és bázis komponensek eredeti hatása megmarad, nem oltódik ki. Ennek

következtében azok szinergikus hatása érvényesülhet reakciókban, s egészen különleges, egyedi kémiai reaktivitások tapasztalhatók. Ezek közül kiemelkedik a hidrogénmolekula aktiválása, ami jelentős paradigmaváltást hozott a fémmentes aktiválások és katalízis területén.

Nemrégiben bevezették és megmutatták egy új katalizátor tervezési elvét, a méretkizárás elvét, amelynek alkalmazásával a frusztrált Lewis párok funkciós csoport toleranciáját jelentős mértékben tudták növelni. Ez a fejlesztési irányvonal meghatározó lehet abban, hogy az FLP katalízis a laboratóriumi felhasználás mellett akár ipari folyamatokban is alkalmazható legyen. E kutatási irányvonal mentén az elmúlt évben a szerkezet finomhangolását folytatták, s végül olyan katalizátorokat tudtak előállítani, amelyek az eddigi katalizátorok meglévő fokozott nedvesség érzékenységét már nem mutatták, sőt akár kromatográfias úton tudták tisztítani. Meggyőződésük, hogy a praktikus sajátságai miatt ezen új katalizátorcsalád széleskörű felhasználást fog nyerni a katalitikus hidrogénezés területén.

Lendület Kémiai Biológia Kutatócsoport

A kutatócsoport 2013 júniusától kezdte meg működését, s kutatási programjukban biológiai indíttatású problémáknak kémiai úton való megoldására törekednek. A témához kapcsolódóan, így például sikerrel valósították meg egy új, fluorogén jelzővegyület család előállítását. Szintetikus szempontból jelentős, hogy a jelzővegyületek moduláris felépítésűek, ezáltal nagyfokú variabilitást tesznek lehetővé, így a spektrális tulajdonságok finomhangolása is lehetséges. Ennek érdekében a kifejlesztett vegyületek alapján egy elméleti kémiai modellt is sikerült felállítaniuk. Spektrális szempontból különösen érdekes, hogy az új jelzővegyületek ún. mega Stokes típusú molekulák, azaz gerjesztési és emissziós sávjuk maximuma több mint 100 nm távolságban van egymástól. Az előállított vegyületek alkalmazhatóságát élő rendszerek jelzésével tesztelték, melynek során megállapították, hogy alacsony háttérfluoreszcenciával rendelkeznek és akár a sejtlízis körülményei közt is alkalmazhatók. Eredményeiről egy publikációban (*Organic and Biomolecular Chemistry*) és egy poszter-előadás keretében adtak számot. A téma folytatásaként kifejlesztettek egy második generációs fluorogén jelzővegyület családot is, melynek gerjesztési hullámhossza az élő szervezetek szempontjából jóval előnyösebb látható tartományba esik. Az elmúlt év során sikerrel valósították meg olyan biolumineszcens jelzővegyületek előállítását is, melyek a természetes (Luciferin) származékhoz képest más hullámhosszú emissziós maximummal rendelkeznek. Ezt a természetes luciferin váz benzotiazol-moduljának más heterociklusra való cseréjével érték el. Kutatási projektjük fontos eleme a közeli IR tartományban emittáló jelzővegyületek. E témakörben elért eredményeiről egy közlemény jelent meg (*Chem. Asian J.*). E téren azt találták, hogy az egyik NIR emittáló festék hatékonyan törli le a daunomicin emisszióját, mely hatás megfelelő rendszerek előállításával megszüntethető.

Elméleti Kémiai Laboratórium

Kutatási tevékenysége a kémiai folyamatok elemi lépésének mélyebb szintű megértésére irányul. Kvantumkémiai számítások segítségével feltárták egy újonnan javasolt katalitikus hidrogénezési reakció mechanizmusát. Az új eljárás, melyet a Helsinki Egyetem kutatói dolgoztak ki, első alkalommal teszi lehetővé alkin vegyületek hidrogénezését frusztrált Lewis párok (FLP) alkalmazásával, vagyis fémmentes katalizátorok felhasználásával. Az elméleti tanulmányok rávilágítottak a katalitikus ciklus egyes elemi lépéseinek (hidroborálás, H₂ hasítás, protodeborilálás) szerepére, mely alapján az eljárás tovább fejleszthető. Az eredményeket a *Nature Chemistry* folyóiratban publikálták.

Összehasonlították és értékelték a frusztrált Lewis párok rendkívüli reakcióképességének értelmezésére kidolgozott *elektron transzfer* (ET) és *elektromos tér* (EF) modellek alkalmazhatóságát. Hat különböző FLP/H₂ rendszerre elvégzett kvantumkémiai számítások alapján megállapították, hogy a két reaktivitási modell közül csak az ET modell alkalmas a reakciók kinetikai jellemzőinek (például gátmagasság, átmeneti állapotok szerkezete) kvalitatív leírására. Fény derült arra is, hogy a sav/bázis párok gyenge asszociációjával létrejött intermedierek reaktív régiójában található elektrosztatikus tér önmagában nem indukálhat heterolitikus hidrogénhasítást, mert az ionizáció annál jóval gyorsabb folyamat.

Folytatják az oxidatív C-H aktiválás területén a mechanizmus vizsgálatokat. Az idén publikált Pd katalizált kapcsolás mellett felderítették terminális alkinek és 1,3-dioxo vegyületek ezüst-katalizált furánváz képződési reakciójának mechanizmusát. Megállapították, hogy egy gyökös előkészítő lépést követően a reakció ionos mechanizmussal zajlik. Azonosították a sebességmeghatározó lépést, amely a C-C kapcsolás. A számításokat kiegészítették kísérletekkel, amelyeket az ELTE TTK-n végeztek egy Lendület csoportban.

Kimutatták, hogy síkhullám-számítások alapján – amelyekben semmiféle atom-centráltság függvényeket nem alkalmaznak – is mód van meghatározni olyan alapvető kémiai fogalmak kvantumkémiai megfelelőit, mint egy kémiai kötés rendje vagy egy atom aktuális vegyértéke.

Új módszert dolgoztak ki H-kötéses háló szerkezetének leírására, és azt alkalmazták a folyékony víz és metanol esetére. A módszer segítségével jellemezhetők a folyadékok belső inhomogenitásai (például erősen kötődő molekula aggregátumok). Megmutatták, hogy víz esetében a négy H-kötéssel rendelkező molekulák alacsony hőmérsékleten perkolálódnak, azonban a keletkezett háló topológiája nem emlékeztet a vízmolekulák által kifeszített 3D háló topológiájára.

Lendület Szupramolekuláris Kémiai Laboratórium

Különleges tulajdonságú aranykomplexek szintézisével foglalkoznak. Egy kétmagvú arany(I)tartalmú helikát kristályosítási körülményeinek a finomhangolásával előállították a komplex kék, zöldeskék, sárga és piros színnel lumineszkáló formáit. Kapcsolatot találtak a szilárd fázisban megvalósuló molekuláris szerveződés és a fotolumineszcens tulajdonságok között. Részletesen tanulmányozták az arany(I)tartalmú helikát mechanokróóm és vapokróóm lumineszcenciáját és a jelenséget kísérő reverzibilis kristály-amorf átalakulásokat. Azt találták, hogy a helikát mechanikai erő és szerves oldószergőzők hatására intenzív lumineszcens színváltozással válaszol. Egyszerű, gyors és hatékony szilárdfázisú szintetikus módszereket dolgoztak ki új kétmagvú arany(I)tartalmú helikátok előállítására. Az előállított hasznos tulajdonságú arany(I)tartalmú szupramolekulák potenciális felhasználást nyerhetnek a hétköznapi élet számos területén, mint például szenzorok, adathordozók, memória chipek fejlesztésében, kijelzők gyártásában (OLED-ek), biztonsági megoldások körében (például UV-fényben detektálható nyomatok) és jövőbeli technológiai alkalmazásokban.

Tömegspektrometriai Laboratórium

Fő kutatási területük a proteomika, ezen belül speciálisan a glikoproteomika. Legfontosabb eredményük 2013-ban egy kromatográfián, tömegspektrometrián és ezzel integrált számítógépes analízisen alapuló vizsgálati protokolljuk továbbfejlesztése. Elméleti módszerekkel tanulmányozták a glikoproteinek fragmentációs folyamatait és rendszerbe foglalták fragmentációs tulajdonságaikat, melyet a szakterület egyik vezető folyóiratában publikáltak. Eredményeikre alapozva az adatkiértékelő szoftvereiket (Glycominer és Glicopattern) is továbbfejlesztették, mely weboldalukról elérhető (www.chemres.hu/ms/glycominer/, www.chemres.hu/ms/glycopattern/). A továbbfejlesztett

protokoll lehetővé teszi biológiai folyadékokban igen kis mennyiségben előforduló glikoprotein izoformok azonosítását, mennyiségi meghatározását, mely nemzetközi összehasonlításban is áttörést jelent.

A kidolgozott protokoll bizonyította jelentőségét mind a kutatás, mind pedig a gyakorlati alkalmazás szempontjából. Így többek között, ez a fejlesztés képezi alapját a rákos megbetegedések korai felismerésére és a rákos folyamatok patomechanizmusának megértésére szolgáló kutatásaiknak. Ennek keretében részletesen vizsgálták az AGP akut fázis protein glikoformjait, melyek mind rákos, mind kardio-vaszkuláris betegségek esetén megváltoznak, így orvos-diagnosztikai jelentőségük lehet.

Proteomikai, glikoproteomikai módszertani kutatásaik jelentőségét mutatja, hogy ezekre a technikai újításokra mind ipari partnereknek, mind pedig más kutatócsoportoknak komoly szüksége van. Glikoproteomikai téren végzett munkájuk alapozta meg, hogy 2014. évre a kutatócsoport NKTH pályázatot (VKSZ-12-1-2013-0001) nyert el a Richter Gedeon Nyrt.-vel közösen.

LCMS Laboratórium

2013. évben vált önálló kutatási csoporttá, s a TTK Műszercentrum egységeként részben tudományos együttműködések keretében, részben pedig megbízásos alapon több mint 11000 mintát mértek a legkülönbözőbb témákban. A csoport sikerrel pályázott nemrégiben az MTA műszerpályázatán, s az elnyert összegből beszereztek egy nagy érzékenységű tandem tömegspektrométert 2013-ban. A pályázat elnyerését követően megkezdődtek az előkészületek a kísérleti munkákra, s a decemberi üzembe helyezés után elindultak a mérések.

NMR Laboratórium

Kutatásaik biológiai jellegű problémák szerkezeti vizsgálata. Meghatározták a humán epesavkötő fehérje glikokólsavval és glikokenodeoxikólsavval alkotott komplexének oldatfázisú NMR szerkezetét. Az azonosított intra- és intermolekuláris kölcsönhatások alapján javaslatot tettek a ligandumkötődés mechanizmusára, hozzájárulva ezzel az epesavak intracelluláris transzportfolyamatainak molekuláris szinten történő jobb megértéséhez. Hőmérsékletfüggő NMR relaxációs vizsgálatok segítségével különböző időskálán tanulmányozták a komplexált és komplexálatlan fehérjében zajló belső mozgások dinamikáját. A komplexálatlan formában azonosítottak egy globális, ms időskálán zajló konformációs átmenetet egy rendezett és egy részlegesen rendezetlen forma között. A fehérjegerinc gyorsabb, ps-ns időskálán zajló mozgásainak tekintetében a vizsgált 283 K-313 K hőmérséklettartományban nemlineáris hőmérsékletfüggést állapítottak meg, összhangban korábbi termodinamikai mérésekkel. Eredményeik kiindulási alapjául szolgálhatnak a humán epesavkötő fehérje kötődési folyamatainak dinamikai sajátságok módosítása révén történő optimalizálásának, ezáltal a koleszterinszint szabályozásában fontos szerepet játszó fehérje inhibitorainak új alapokon történő tervezéséhez. Együttműködésben az MTA TTK MFI Funkcionális Farmakológiai csoportjával jellemezték a PAMAM G5 dendrimer antibakteriális tulajdonságait, amely a hagyományos antibiotikumokkal szembeni fokozódó rezisztencia idején új lehetőségeket teremthet a gyógyszerkutatásban.

Röntgen Egykristály Laboratórium

Kutatásainak eredménye a szilárd fázisban a molekulák és ionok közötti másodlagos kölcsönhatások felismerése és megértése, amely odáig vezetett, hogy olyan szerkezeteket sikerült előállítaniuk, ahol az intermolekuláris kölcsönhatásokat már képesek voltak

finomhangolni. Az eredmények jelentősége az, hogy alkalmazása közelebb visz a valódi „crystal engineering” megvalósulásához, azaz megkívánt fizikai-kémiai tulajdonságú anyagok előállításához, beleértve az izostrukturális és polimorf vegyületeket is.

Az eredményeket bemutató, 2013-ban elfogadott cikk a krisztallográfia egyik vezető folyóiratában, a CrystEngComm című újság Szupramolekuláris Makrociklusos Kémia különszámában kiemelt minősítést kapott.

Szénhidrátkémiai Laboratórium

Kutatói a heparin hatás-szerkezet összefüggés tanulmányozására olyan ortogonálisan védett oligoszacharidot szintetizáltak, amely D-glükuronsav és L-iduronsav egységeket is tartalmaz. Az ortogonálisan védett oligoszacharidból szulfatált oligoszacharidokat állítottak elő biológiai vizsgálatok céljára.

Folytatták a glikozilezési reakciók sztereoselektivitását befolyásoló tényezők szisztematikus vizsgálatát. Eredményeikből olyan következtetésekre jutottak, amelyek alapján megvalósítható egy általánosan használható sztereoselektív glikozilezési reakció.

Új típusú, szénhidráttartalmú organokatalizátorokat fejlesztettek ki, és vizsgálták ezek alkalmazhatóságát aszimmetrikus szintézisekben.

b) Tudomány és társadalom

A Gyógyszerkémiai Kutatócsoport részt vett a MTA által szervezett Innodiák programban, ahol egy tanuló tudományos előadás megtartására sikerrel felkészítettek a csoportban végzett korábbi munkájából. Az elmúlt évben az Organokatalízis Laboratórium csoportvezetője felkérést kapott, hogy egy középiskolás diákoknak és tanároknak szóló előadássorozat keretében tartson ismeretterjesztő előadást (Alkímia ma, ELTE TTK). A megadott tematika szorosan kapcsolódik a kutatócsoport jelenlegi kutatási irányvonalához, amit „A terpének csodálatos világa” címmel hirdettek meg. Az előadás során a terpenoid kémia fontosságára, történelmi és társadalmi jelentőségére mutatott rá az előadó. Az új Természettudományi Kutatóközpont átadása kapcsán az Organokatalízis Laboratórium csoportvezetője több interjút adott az MTV és Duna televízióknak. A Lendület Kémiai Biológia Kutatócsoport vezetőjével két rádióinterjú készült, melynek során ismertette a kutatócsoport témáit, kutatási eredményeit, várható társadalmi vonatkozásait (Rádió Q: Gordiusz és Klub Rádió: „Többet ésszel” című műsor). Az LCMS Laboratórium a Gyógyszer-kölcsönhatások Laboratóriummal közösen részt vett a személyre szabott gyógyszeres terápiás módszerek kifejlesztésében. Az eredmények fontos szerepet tölthetnek be (és részben már jelenleg is betöltik) a társadalom egészségi állapotában. Az eredményeket széles körben ismertették a kutatói társadalomban, illetve bemutatásra a gyakorló orvosok számára. Rendszeresen érkeztek felkérések iskolákból is, ahol a kutatói szakma népszerűsítéseként egy egészen más közönségnek mutatták be az eredményeket. Az NMR kutatócsoport munkatársai „Szimmetria a fehérjékben; a szerkezet és funkció összefüggései” címmel ismeretterjesztő előadást tartottak az MTA TTK szervezésében megrendezésre kerülő „AKI Kíváncsi Kémikus” kutatótábor megnyitóján.

A Röntgen Egykristály Laboratórium a „Szépség és szimmetria a kristályok világában” című kiállítást szervezett a Krisztallográfia Nemzetközi Éve alkalmából az MTA Wigner Fizikai Kutatóközpont és az ELTE TTK kutatóival. A kiállítás 2013. november 20–27-én, az MTA Könyvtár és Információs Központban volt. „Óvodai foglalkozás a krisztallográfiáról” címmel rendezvényt szerveztek az MTA Óvoda és Bölcsőde nagycsoportjában.

A Röntgen Egykristály Laboratórium szervezte és részt vett a 28. Európai Krisztallográfiai Találkozón (2013. augusztus 25–30., Warwick, Egyesült Királyság), valamint az Európai Krisztallográfiai Szövetség Végrehajtó Bizottságának ülésén (2013. február 15–17. Budapest). A Tömegspektrometria Laboratórium is több konferencia szervezésében vett részt, a 31. Informal Meeting on Mass Spectrometry (2013. május 5–8. Palermo, Olaszország) és 7. Central and Eastern European Proteomic Conference (2013. október 13–16., Jena, Németország).

Végül érdemes kiemelni, hogy a Szerves Kémiai Intézet több munkatársa rendszeres oktatási tevékenységet végzett az ELTE, a BME és a Semmelweis Egyetem több tanszékén, valamint az egyetemek doktori iskoláinak tagjai. Az intézet kutatói több előadást és gyakorlatot tartottak az egyetemeken és aktívan részt vettek az „AKI Kíváncsi Kémikus” programjaiban.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2013-ban

Téma címe: Enolát/enoil katalízis: Enolizáló organokatalizátorok fejlesztése

Projekt típusa: ERA Chemistry (magyar–finn együttműködés)

Együttműködő partnerintézmény neve: University of Jyväskylä, Finnország

Eredmények: Elméleti és kísérleti módszerek közös alkalmazásával, több organokatalitikus folyamat mechanizmusát is feltárták.

Közös publikációk száma: 2.

Téma címe: Fluorogén jelzővegyületek szintézise és tervezése

Együttműködő partnerintézmény: BME Fizikai-Kémia Tanszék

Eredmények, illetve együttműködés értékelése: A kísérleti (szintetikus) eredmények alapján sikerült egy jól alkalmazható elméleti modellt felállítani, mely segítségével a jövőben hasonló vegyületek tervezhetők.

Közös publikációk száma: 1 megjelent, 1 elbírálás alatt.

Téma címe: Cisztein specifikus vinil szulfon kémiai hívívők szintézise és alkalmazása

Együttműködő partnerintézmény neve: MTA–ELTE Peptidkémiai Kutatócsoport

Eredmények, illetve együttműködés értékelése: A csoportban előállított vinil szulfon származékokat sikerrel tesztelték peptidek ciszteinen át történő jelölésében.

Közös publikációk száma: 1 elbírálás alatt.

Téma címe: Construction and labeling of artificial organelles

Együttműködő partnerintézmény neve: Freiburg University, Freiburg, Németország

Eredmények, illetve együttműködés értékelése: A kifejlesztett fluoreszcens bioortogonális reagenseket az együttműködő partner mesterséges sejtszervecskék jelölésére használta fel. A magyar fél Freiburgban előadást tartott és munkamegbeszélésre került sor.

Közös publikációk száma: 1 elbírálás alatt.

Téma címe: Development of genetically encodable non-canonical amino acids

Együttműködő partnerintézmény neve: European Molecular Biology Laboratory, Heidelberg, Németország

Eredmények, illetve együttműködés értékelése: Az általuk előállított vegyületeket a partner modellfehérjék genetikai módosítására használja fel. Az együttműködés keretében egy PhD-hallgató egy hónapot töltött a németországi intézményben.

Közös publikációk száma: 1.

Téma címe: Gyógyszer hatóanyagok aktivitás modulációjának vizsgálata tömegspektrometriai módszerek és számítógépes modellezés alkalmazásával

Együttműködő partnerintézmény neve: B.Verkin Institute for Low Temperature Physics and Engineering of the National Academy of Sciences of Ukraine, Kharkov, Ukrjána

Egyezmény neve: MTA és Ukrán Tudományos Akadémia kétoldalú együttműködés

Eredmények, illetve együttműködés értékelése: Együttesen alkalmazott, különböző hatóanyagú gyógyszereknek egymásra gyakorolt, egyedi hatást gyengítő befolyását vizsgálták. Modellvegyületek tömegspektrometriás és elméleti kémiai tanulmányozásának eredményeképp megállapították, hogy a vizsgált esetekben a hatás gyengülése a két gyógyszervegyület között kialakuló, a foszfolipid molekulákhoz való kötődésért vívott kompetíció miatt, illetve a kétféle gyógyszermolekula egymással történő komplexképzése miatt következik be.

Közös publikációk száma: 1.

Téma címe: Az intermolekuláris kölcsönhatások finomhangolása, izostrukturalitás, polomorfia

Együttműködő partnerintézmény neve: Institute of Organic Chemistry, Technical University Bergakademy Freiberg, Németország

Eredmények, illetve együttműködés értékelése: Sztérikus és elektrosztatikus kölcsönhatások feltérképezésének segítségével a másodlagos kölcsönhatások finomhangolása valósult meg.

Közös publikációk száma: 1 megjelent és 2 elfogadott.

Téma címe: Li...P kölcsönhatás: az ionostól a semleges formáig

Együttműködő partnerintézmény neve: Karlsruhe Institute of Technology, Karlsruhe, Németország

Eredmények, illetve együttműködés értékelése: A Li...P kölcsönhatás vizsgálatára egy sorozat vegyületet sikerült előállítani, melyek fokozatos átmenetet mutatnak az ionostól a semleges kötésig. Ezt szerkezet-vizsgálattal igazolták.

Közös publikációk száma: 1 elfogadott.

Téma címe: Racém és enantiomer tiszta vegyületek szerkezetének vizsgálata

Együttműködő partnerintézmény neve: BME Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék és Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Eredmények, illetve együttműködés értékelése: S és racém 2-(2-nitro-1-phenylethyl)-1,3-diphenyl-propane-1,3-dione szerkezetének és oladási fázisdiagramjának meghatározását végezték el.

Közös publikációk száma: 1 elfogadott.

Téma címe: Ferrocén vegyületek szerkezetvizsgálata

Együttműködő partnerintézmény: ELTE Szervetlen Kémiai Tanszék

Eredmények, illetve együttműködés értékelése: Ferrocén származékok szintézise és szerkezetvizsgálata XRD, NMR és DFT technikákkal.

Közös publikációk száma: 2.

Téma címe: Fluorid anion komplexálás

Együttműködő partnerintézmény neve: BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Eredmények, illetve együttműködés értékelése: Az 5,5-dioxofentiazin bisz(fenilkarbamid) and bisz(feniltiokarbamid) egyedülálló fluorid anion komplexálása bázikus környezetben.

Közös publikációk száma: 1.

Téma címe: Vastartalmú oxigenáz modellek

Együttműködő partnerintézmény neve: Pannon Egyetem, Mérnöki Kar, Szerves Kémia Intézeti Tanszék

Eredmények, illetve együttműködés értékelése: Vastartalmú oxigenáz (katechin dioxigenáz), és szuperoxid dizmutáz modellek szerkezet meghatározása.

Közös publikációk száma: 1.

Téma címe: Réz katalizált oxidatív gyűrűzárás

Együttműködő partnerintézmény: MTA–ELTE „Lendület” Katalízis és Szerves Szintézisek Kutatócsoport

Eredmények, illetve együttműködés értékelése: Etinil anilidek réz katalizálta oxidatív gyűrűzárása diariljodónium sókkal.

Közös publikációk száma: 1.

Téma címe: Hatékony módszerek kidolgozása heparin és heparán szulfát vegyülettárak előállítására biológiai vizsgálatokhoz

Együttműködő partnerintézmény neve: Centre for Synthesis and Chemical Biology, University College Dublin, Dublin, Írország

Egyezmény neve: ERA Chemistry pályázat (OTKA NN 85216)

Eredmények, illetve együttműködés értékelése: Az együttműködés keretében olyan szintézisstratégiákat fejlesztettek ki, amelyek mindkét fél, eltérő szerkezetű, célvegyületeinek szintézisére egyaránt alkalmazhatók. Az ily módon előállított közös intermedierek cseréje révén a partnerek szintéziseinek idő- és munkaigénye jelentősen lecsökkent.

Téma címe: GAGPharm: Bioaktív rákellenes glikózaminoglikán oligoszacharidok fejlesztése emlőrák kezelésére

Együttműködő partnerintézmény neve: Department of Anatomy, National University of Szingapúr

Egyezmény neve: NKTH-A*STAR (TÉT_10-1-2011-0053)

Eredmények, illetve együttműködés értékelése: Az együttműködés keretében heparin, heparán szulfát oligoszacharidokat és ezek aza-analógjait szintetizáltak a külföldi partner által végzendő biológiai vizsgálatokhoz.

IV. A 2013-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A pályázat megnevezése: Nemzeti Agykutató Program / Gyógyszerkutató pillér

A pályázati téma megnevezése: Fragment based approaches for the validation of new central nervous system (CNS) targets

A pályázati támogatás mértéke: 225 M Ft 2014-2017.

A projekt kezdete: 2014.01.01.

A pályázat megnevezése: Lendület Kémiai Biológia Kutatócsoport

A pályázati téma megnevezése: Development of bioorthogonal reagents and fluorophores for chemical biology applications

A pályázati támogatás mértéke összesen: 49 433 000 Ft

A pályázat keretében 2013-ban végzett munka fontosabb eredményei: cisztein specifikus és tirozin specifikus (vinil szulfon és allil acetát) kémiai hírvivők előállítása, tesztelése. Genetikailag kódolható biolumineszcens vegyületek előállítása, fluorogén jelzővegyületek előállítása.

A pályázat megnevezése: ERA-Chemistry (OTKA-NN-110214)

A pályázati téma megnevezése: Multiple Labeling of DNA and RNA with NIR fluorophores by means of (bio)orthogonal approaches.

A pályázati támogatás mértéke (2013-ban): 7 551 000 Ft

A pályázat keretében 2013-ban végzett munka fontosabb eredményei: Reaktív tetrazinszármazékok előállítás, kinetikai tesztelése, beépítése nukleotidokba.

A pályázat megnevezése: Kutatói OTKA pályázat (K 108721)

A pályázati téma megnevezése: Hidrogén kötéses hálók vizsgálata kondenzált fázisokban

A pályázati támogatás mértéke (összesen, illetve 2013-ban): 11.7 M Ft összesen, 5.8 M Ft az első projektévre

A pályázat keretében 2013-ban végzett munka fontosabb eredményei: Új módszert dolgoztak ki H-kötéses hálók szerkezetének leírására, és azt alkalmazták a folyékony víz és metanol esetére.

A pályázat megnevezése: OTKA (PD 108955)

A pályázati téma megnevezése: Activation of Strong Covalent Bonds in Metalloenzymes: Theoretical Studies.

A pályázati támogatás mértéke: 21.9 M Ft összesen, 8.8 M Ft az első projektévre.

A pályázat keretében 2013-ban végzett munka fontosabb eredményei: A BoxABC enzimrendszer divas centrumának modellvegyületén végzett számítások előzetes eredményei alapján az benzoil-CoA epoxidálásában μ -oxo vagy μ -1,1-peroxo speciesz részvétele valószínűsíthető.

A pályázat megnevezése: OTKA (83857)

A pályázati téma megnevezése: A glikozilációs folyamatok feltérképezése és kapcsolata a rákos megbetegedések patofiziológiájával

A pályázati támogatás mértéke összesen: 85.5 M Ft, 2013-ban: 20.9 M Ft

A pályázat keretében 2013-ban végzett munka fontosabb eredményei: Lásd II/a) fejezet, Tömegspektrometria Laboratórium.

A pályázat megnevezése: MTA Infrastruktúra pályázat

A pályázati téma megnevezése: Nagy érzékenységű LC-MS/MS készülék beszerzése

A pályázati támogatás mértéke (2013-ban): 95,6M Ft

A pályázat keretében 2013-ban végzett munka fontosabb eredményei: közbeszerzés, installálás.

A pályázat megnevezése: OTKA (K 109035)

A pályázati téma megnevezése: A ligandumkötődés mechanizmusának vizsgálata a humán epesav-kötő fehérjében. Futamidő: 4 év (2014.02.01-2018.01.31.)

A pályázati támogatás mértéke: összesen: 23.834 M Ft.

A projekt 2014. februárban kezdődik.

V. A 2013-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Chernichenko K, Madarász Á, Pápai I, Nieger M, Leskelä M, Repo T: A frustrated-Lewis-pair approach to catalytic reduction of alkynes to cis-alkenes. Nature Chemistry, 5: 718-726 (2013) <http://real.mtak.hu/6136/>

2. Rokob TA, Bakó I, Stirling A, Hamza A, Pápai I: Reactivity Models of Hydrogen Activation by Frustrated Lewis Pairs: Synergistic Electron Transfers or Polarization by Electric Field? *J. Am. Chem. Soc.*, 135(11): 4425-4437 (2013) <http://real.mtak.hu/5192/>
3. Takács D, Egyed O, Drahos L, Szabó P, Jemnitz K, Szabó M, Veres Z, Visy J, Molnár J, Riedl Z, Hajós G: Synthesis and pharmacological investigation of new N-hydroxyalkyl-2-aminophenothiazines exhibiting marked MDR inhibitory effect. *Bioorganic and Medicinal Chemistry*, 21(13): 3760-3779 (2013) <http://real.mtak.hu/6839/>
4. Balog J, Riedl Z, Hajós G: A straightforward synthesis of indazolo[3,2-a]isoquinolin-6-amines. *Tetrahedron Letters*, 54(39): 5338-5340 (2013) <http://real.mtak.hu/6836/>
5. Kardos Gy, Soós T: Tether-Free Immobilized bifunctional squaramide organocatalysts for batch and flow reactions. *European Journal of Organic Chemistry*, 21: 4490-4494 (2013) <http://real.mtak.hu/8832/>
6. Cserép GB, Herner A, Wolfbeis OS, Kele P: Tyrosine specific sequential labeling of proteins. *Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters*, 23: 5776-5778 (2013) <http://real.mtak.hu/8855/>
7. Szabó F, Daru J, Simkó D, Nagy TZs, Stirling A, Novák Z: Mild Palladium Catalyzed Oxidative Direct ortho-C-H Acylation of Anilides under Aqueous Conditions. *Advanced Synthesis and Catalysis*, 355(4): 685-691 (2013) <http://real.mtak.hu/5164/>
8. Bakó I, Stirling A, Seitsonen AP, Mayer I: Extracting chemical information from plane wave calculations by a 3D ‘fuzzy atoms’ analysis. *Chem. Phys. Lett.*, 563: 97-101 (2013) <http://real.mtak.hu/4349/>
9. Révész Á, Rokob TA, Maász G, Márk L, Hevér H, Drahos L, Vékey K: Fragmentation, structure, and energetics of small sodium formate clusters: Evidence for strong influence of entropic effects. *Int. J. Mass Spectrom.*, 354-355: 292-302 (2013) <http://real.mtak.hu/7749/>
10. Vékey K, Ozohanics O, Tóth E, Jekő A, Révész Á, Krenyác J, Drahos L: Fragmentation characteristics of glycopeptides. *International Journal of Mass Spectrometry*, 345-347: 71-79 (2013) <http://real.mtak.hu/6718/>
11. Domján A, Manek E, Geissler E, László K: Host–Guest Interactions in Poly(N-isopropylacrylamide) Hydrogel Seen by One- and Two-Dimensional ¹H CRAMPS Solid-State NMR Spectroscopy. *Macromolecules*, 46: 3118-3124 (2013) <http://real.mtak.hu/5450/>
12. Nyitrai G, Keszthelyi T, Bota A, Simon A, Toke O, Horvath G et al. (3): Sodium selective ion channel formation in living cell membranes by polyamidoamine dendrimer. *Biochimica et Biophysica Acta-Biomembranes*, 1828: 1873-1880 (2013) <http://real.mtak.hu/5966/>
13. Fischer C, Bombicz P, Seichter W, Weber E: Fine-tuning of packing architecture: symmetrically bridge-disubstituted tetramethoxycalix[4]arenes. *Structural Chemistry*, 24: 535-541 (2013) <http://real.mtak.hu/6898/>

**AZ MTA TERMÉSZETTUDOMÁNYI KUTATÓKÖZPONT FŐBB MUTATÓI ÉS
PÉNZÜGYI ADATAI 2013-BAN**

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2013-ban

MTA Természettudományi Kutatóközpont

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	647	Ebből kutató ² :	419
PhD, kandidátus:	207	MTA doktora:	54
		Rendes tag és levelező tag:	7
A kutatóhelyhez kötődő akadémikusok száma ³ :			7
35 év alatti, kutatóhelyi állományban levő kutatók száma ⁴ :			191

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :	506
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :	486
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:	36
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:	14
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:	386
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció	344
Könyv, atlasz	magyarul: 1 idegen nyelven: 0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 6 idegen nyelven: 16

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	1155,262	Összes független hivatkozás száma (2012):	14374
Összes hivatkozás száma (2012) ⁸ :			16848

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2013-BAN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD:	16	MTA doktora:	4
---	------	----	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	1	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	3
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :	258
poszterek száma:	258
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	56
Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	79
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :	23

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :	136		
Témavezetések száma: TDK munka:	77	Diplomamunka (BSc):	126
Diplomamunka (MSc):	127	PhD:	196

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :	3602 669	E Ft		
Fiatal kutatói álláshelyen fogl. sz. ¹⁶ :	51	Teljes saját bevétel:	1750 183	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:			7773	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			204	
A tárgyévre vonatkozó támogatás és bevétel:	490 467	E Ft		
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:			104	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	609 243	E Ft		
Az év folyamán az összes uniós forrásból támogatott témák száma:			166	
A tárgyévre vonatkozó bevétel ¹⁷ :	561 524	E Ft		
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			14	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		E Ft		
A tárgyévre vonatkozó vállalkozásoktól származó és nem kutatási bevétel ¹⁸ :	571 643	E Ft		

VI/A. A kutatóhely részletezett pénzügyi adatai 2013-ban**MTA Természettudományi Kutatóközpont**

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege:	3602 669	E Ft
Az időszak folyamán a teljes saját bevétel összege:	1750 183	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:	7773	E Ft
OTKA - a tárgyévre vonatkozó támogatás:	490 467	E Ft
OTKA - a tárgyévre vonatkozó bevétel:		E Ft
Innovációs Alapból - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	609 243	E Ft
ÚMFT - a tárgyévre vonatkozó bevétel:		E Ft
Egyéb hazai pályázatok - a tárgyévre vonatkozó bevétel:		E Ft
EU-s pályázatok - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	561 524	E Ft
Egyéb külföldi pályázatok - a tárgyévre vonatkozó bevétel:		E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozásoktól származó bevétel - kutatásra:	409 279	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozásoktól származó bevétel - egyéb:	118 894	E Ft
A tárgyévre vonatkozó egyéb kutatási bevétel:	43 470	E Ft
A tárgyévre vonatkozó egyéb nem kutatási bevétel:		E Ft

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2013-ban

MTA TTK Anyag- és Környezetkémiai Intézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	115	Ebből kutató ² :	84	
PhD, kandidátus:	49	MTA doktora:10	Rendes tag és levelező tag:	2
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :				3
35 év alatti, intézeti állományban levő kutatók száma ⁴ :				32

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :	112		
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :	112		
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:	7		
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:	6		
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:	93		
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció	89		
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	5

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	253,826	Összes független hivatkozás száma (2012):	3106
Összes hivatkozás száma (2012) ⁸ :			3615

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2013-BAN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD:	3	MTA doktora:	0
---	------	---	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	2
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :	44		
poszterek száma:	41		
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	11	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	18
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :	2		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			24
Témavezetések száma: TDK munka:	13	Diplomamunka (BSc):	18
Diplomamunka (MSc):	19	PhD:	30

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2013-ban**MTA TTK Enzimológiai Intézet****1. LÉTSZÁMADATOK**

Átlagléttség ¹ :	98	Ebből kutató ² :	79
PhD, kandidátus:	35	MTA doktora:	5
		Rendes tag és levelező tag:	2
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :			3
35 év alatti, intézeti állományban levő kutatók száma ⁴ :			43

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :	56	
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :	54	
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:	0	
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:	0	
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:	52	
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció	50	
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven: 0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven: 2

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	254,009	Összes független hivatkozás száma (2012):	3126
Összes hivatkozás száma (2012) ⁸ :			3638

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2013-BAN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD:	6	MTA doktora:	0
---	------	---	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :	54		
posztterek száma:	36		
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	5	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	15
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :	2		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :	17		
Témavezetések száma: TDK munka:	22	Diplomamunka (BSc):	9
Diplomamunka (MSc):	14	PhD:	33

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2013-ban

MTA TTK Kognitív Idegtudományi és Pszichológiai Intézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	71	Ebből kutató ² :	46
PhD, kandidátus:	17	MTA doktora: 6	Rendes tag és levelező tag: 0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :			1
35 év alatti, intézeti állományban levő kutatók száma ⁴ :			26

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			89
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			81
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			16
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			4
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			42
mindezekből recenzió, kritika magyarul: 0		idegen nyelven:	1
Megjelent könyv/monográfia, atlasz magyarul: 1		idegen nyelven:	0
könyvrész, könyvfejezet, térkép magyarul: 6		idegen nyelven:	7
Könyv szerkesztése ⁷ magyarul: 0		idegen nyelven:	4
Folyóirat, vagy sorozatszerkesztés magyarul: 1		idegen nyelven:	0

3. IDÉZETTSÉGI MUTATÓK (2012)

Összes hivatkozás száma ⁸ :	2594	Összes független hivatkozások száma:	2155
--	------	--------------------------------------	------

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2013-BAN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 1	MTA doktora:	0
---	--------	--------------	---

5. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Tud. előadások száma nemzetközi rendezvényen ¹⁰ :	61	hazai:	75
Nyilvános esemény megrendezése ¹³ :	11	kulturális rendezvények ¹⁴ :	0
Tanácsadói tevékenységek száma ¹¹ :			17
Nemzetközi tudományos bizottsági tagság:	15	hazai:	21
Nemzetközi folyóirat szerkesztőségi tagság:	15	hazai:	17

6. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹² :			33
Témavezetések száma: TDK munka: 8		Diplomamunka (BSc):	47
Diplomamunka (MSc): 45		PhD:	45

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2013-ban

MTA TTK Molekuláris Farmakológiai Intézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	77	Ebből kutató ² :	68	
PhD, kandidátus:	29	MTA doktora:8	Rendes tag és levelező tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :				1
35 év alatti, intézeti állományban levő kutatók száma ⁴ :				31

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :				86
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :				81
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:				1
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:				2
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:				75
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció				72
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:		0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:		3

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	264,949	Összes független hivatkozás száma (2012):	1422
Összes hivatkozás száma (2012) ⁸ :			1633

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2013-BAN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 1	MTA doktora:	0
---	--------	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			27
		poszterek száma:	35
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	4	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	12
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :	2		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			21
Témavezetések száma: TDK munka:	9	Diplomamunka (BSc):	9
Diplomamunka (MSc):	14	PhD:	26

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2013-ban**MTA TTK Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Intézet****1. LÉTSZÁMADATOK**

Átlagléttség ¹ :	125	Ebből kutató ² :	80	
PhD, kandidátus:	48	MTA doktora:14	Rendes tag és levelező tag:	2
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :			3	
35 év alatti, intézeti állományban levő kutatók száma ⁴ :			25	

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :	158		
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :	153		
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:	10		
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:	2		
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:	119		
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció	95		
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	1

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	230,753	Összes független hivatkozás száma (2012):	3017
Összes hivatkozás száma (2012) ⁸ :			3531

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2013-BAN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD:	4	MTA doktora:	4
---	------	---	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	1	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	1
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :	42		
posztterek száma:	53		
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	15	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	11
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :	0		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :	24		
Témavezetések száma: TDK munka:	16	Diplomamunka (BSc):	30
Diplomamunka (MSc):	21	PhD:	32

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2013-ban**MTA TTK Szerves Kémiai Intézet****1. LÉTSZÁMADATOK**

Átlagléttség ¹ :	67	Ebből kutató ² :	58	
PhD, kandidátus:	29	MTA doktora:11	Rendes tag és levelező tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :			3	
35 év alatti, intézeti állományban levő kutatók száma ⁴ :			32	

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :	52	
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :	52	
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:	2	
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:	1	
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:	49	
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció	47	
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven: 0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven: 0

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	171,866	Összes független hivatkozás száma (2012):	1542
Összes hivatkozás száma (2012) ⁸ :			1892

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2013-BAN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD:	1	MTA doktora:	0
---	------	---	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :	30		
posztterek száma:	30		
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	6	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	8
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :	0		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :	17		
Témavezetések száma: TDK munka:	9	Diplomamunka (BSc):	13
Diplomamunka (MSc):	14	PhD:	30