

**A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
KUTATÓHELYEINEK
2014. ÉVI TUDOMÁNYOS EREDMÉNYEI**

I.

Matematika és természettudományok

*A „Tájékoztató az akadémiai kutatóhelyek 2014. évi tudományos tevékenységéről”
c. közgyűlési előterjesztés
1a. melléklete*

Budapest
2015

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
Tóth Ágnes

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 2014-ben.....	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 2014-ben	67
MTA Energiatudományi Kutatóközpont	74
Atomenergia-kutató Intézet.....	75
Energia és Környezetbiztonsági Intézet.....	87
Az MTA Energiatudományi Kutatóközpont főbb mutatói és pénzügyi adatai 2014-ben	99
MTA Rényi Alfréd Matematikai Kutatóintézet	104
Az MTA Rényi Alfréd Matematikai Kutatóintézet főbb mutatói és pénzügyi adatai 2014-ben	121
MTA Számítástechnikai és Automatizálási Kutatóintézet	123
Az MTA Számítástechnikai és Automatizálási Kutatóintézet főbb mutatói és pénzügyi adatai 2014-ben	139
MTA Természettudományi Kutatóközpont	141
Anyag- és Környezetkémiai Intézet	149
Enzimológiai Intézet.....	163
Kognitív Idegtudományi és Pszichológiai Intézet.....	176
Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Intézet	183
Szerves Kémiai Intézet	197
Az MTA Természettudományi Kutatóközpont főbb mutatói és pénzügyi adatai 2014-ben ..	209
MTA Wigner Fizikai Kutatóközpont	218
Részecske- és Magfizikai Intézet	223
Szilárdtest-fizikai és Optikai Intézet.....	236
Az MTA Wigner Fizikai Kutatóközpont főbb mutatói és pénzügyi adatai 2014-ben	249
Matematikai és természettudományi támogatott kutatócsoportok	254

MTA–BME Gépek és Járművek Dinamikája Kutatócsoport	255
MTA-BME Informatikai Rendszerek Kutatócsoport.....	258
MTA-BME Irányítástechnikai Kutatócsoport	261
MTA–BME Kompozittechnológiai Kutatócsoport.....	265
MTA–BME Kondenzált Anyagok Fizikája Kutatócsoport	269
MTA-BME Műszaki Analitikai Kémiai Kutatócsoport.....	272
MTA-BME Szerves Kémiai Technológia Tanszéki Kutatócsoport.....	276
MTA-BME Sztochasztika Kutatócsoport.....	280
MTA–BME Vízgazdálkodási Kutatócsoport.....	283
MTA-DE Egyenletek, Függvények, Görbék Kutatócsoport.....	287
MTA-DE Homogén Katalízis és Reakciómechanizmusok Kutatócsoport.....	290
MTA–DE Részecskefizikai Kutatócsoport.....	294
MTA-ELTE Egerváry Jenő Kombinatorikus Optimalizálási Kutatócsoport	297
MTA–ELTE Elméleti Fizikai Kutatócsoport.....	300
MTA-ELTE Fehérjemodellező Kutatócsoport	304
MTA–ELTE Geológiai, Geofizikai és Űrtudományi Kutatócsoport	307
MTA-ELTE Geometriai és Algebrai Kombinatorika Kutatócsoport.....	310
MTA-ELTE Komplex Kémiai Rendszerek Kutatócsoport	313
MTA-ELTE Numerikus Analízis és Nagy Hálózatok Kutatócsoport.....	316
MTA-ELTE Peptidkémiai Kutatócsoport.....	319
MTA–ELTE Statisztikus és Biológiai Fizika Kutatócsoport.....	323
MTA–ELTE Vulkanológiai Kutatócsoport	326
MTA–ME Anyagtudományi Kutatócsoport	329
MTA–ME Műszaki Földtudományi Kutatócsoport	333
MTA–MTM–ELTE Paleontológiai Kutatócsoport.....	337
MTA–PE Levegőkémiai Kutatócsoport	340
MTA-PTE Molekuláris Kölcsönhatások az Elválasztás-Tudományban Kutatócsoport	343
MTA–PTE Nagyintenzitású Terahertzes Kutatócsoport.....	346
MTA-PTE Szelektív Kémiai Szintézisek Kutatócsoport	349
MTA-SZTE Analízis és Sztochasztika Kutatócsoport.....	352
MTA-SZTE Bioszervetlen Kémiai Kutatócsoport.....	356
MTA–SZTE Fotoakusztikus Kutatócsoport	359
MTA-SZTE Mesterséges Intelligencia Kutatócsoport.....	362
MTA–SZTE Reakciókinetikai és Felületkémiai Kutatócsoport	366
MTA–SZTE Sztereo-kémiai Kutatócsoport	369

MTA–SZTE Szupramolekuláris és Nanoszerkezetű Anyagok Kutatócsoport.....	372
A matematikai és természettudományi támogatott kutatócsoportok főbb mutatói és pénzügyi adatai 2014-ben	376
Matematikai és természettudományi egyetemi Lendület-kutatócsoportok	413
MTA–BME Lendület Egzotikus Kvantum Fázis Kutatócsoport	414
MTA–BME Lendület Jövő Internet Kutatócsoport.....	417
MTA-BME Lendület Kémiai Nanoérzékelők Kutatócsoport.....	420
MTA–BME Lendület Kvantumkémiai Kutatócsoport.....	423
MTA-BME Lendület Magneto-optikai Spektroszkópia Kutatócsoport.....	426
MTA–BME Lendület Statisztikus Térelméleti Kutatócsoport	428
MTA-DE Lendület Funkcionálanalízis Kutatócsoport	431
MTA–ELTE Lendület Biofizikai Kutatócsoport	434
MTA–ELTE Lendület Dinoszaurusz Kutatócsoport.....	437
MTA–ELTE Lendület EIRSA Asztrofizikai Kutatócsoport.....	440
MTA–ELTE Lendület Katalízis és Szerves Szintézisek Kutatócsoport	443
MTA–ELTE Lendület Rácstérelméleti Kutatócsoport.....	446
MTA–PE Lendület Transzlációs Glikomika Kutatócsoport.....	449
MTA–SZTE Lendület Foldamer Kutatócsoport	453
MTA-SZTE Lendület Fotoelektrokémiai Kutatócsoport	456
MTA–SZTE Lendület Pórusos Nanokompozitok Kutatócsoport	458
A matematikai és természettudományi Lendület-kutatócsoportok főbb mutatói és pénzügyi adatai 2014-ben	461

ELŐSZÓ

A Magyar Tudományos Akadémia minden bizonnyal hazánk szellemiségének legeredményesebb és egyben társadalmilag is legelfogadottabb intézménye. Kissé mindannyian a magunkénak érezzük, és nem véletlenül. A tudás iránti vágy az emberi lét velejárója. Ugyanakkor a természetes érdeklődés folyamatos kísérője a kételkedés, a bizonyosságra való törekvés. Ezért a tudomány lényegét is ez a két elem határozza meg: a megismerésre irányuló tevékenység és a megszerzett tudás igazságáról való meggyőződés. Mindkettő intézményi kereteket igényel, amelyek alapja is kettős: az elvégzett munka és a hitelesség. Valójában ebben rejlik akadémiánk sikere, ami nem más, mint a társadalom iránta érzett bizalma. E bizalom kiérdemlése, megtartása ugyanakkor szakadatlan munkát és felelősséget jelent.

Az akadémiai kutatóhálózat a beszámolási év folyamán szerkezetében nem változott. A korábban elkezdett programok kiteljesedtek. A 2012-ben létrejött új kutatóközpontokban immár kikristályosodtak azok a tapasztalatok, amelyek a szükséges kiigazításokat (a 2011–2012-ben meghirdetett „finomhangolást”) megalapozzák. 2014-ben a Lendület program hatodik évébe lépett. A Lendület-kutatócsoportok száma 18-cal gyarapodott; a támogatási időszakot eredményesen záró Lendület-kutatócsoportok pedig kutatóintézeti keretek közé integrálódtak be. A támogatott kutatócsoportok száma 2014-ben nem változott; a csoportok nagy része az ötéves támogatási időszak második felében jár.

Az MTA mintegy 2500 kutatót foglalkoztató kutatóintézet-hálózata (valamint annak a körülbelül 500 kutatónak az összessége, akik egyetemi Lendület-kutatócsoportokban, támogatott kutatócsoportokban vagy egyéni posztdoktori kutatóként egyetemeken dolgoznak) változó globális és európai környezetben végzi a munkáját. Egységes, új – számunkra sokszor előnytelen – szabályok szerint kezdődött el 2014-ben az Európai Unió Horizont 2020 nevű keretprogramja, amelybe sikeresen kell tudnunk bekapcsolódni. És elsősorban Magyarország jövőjét (többek között kultúrájának megőrzését és gazdasági versenyképességének fokozását) kell szolgálnunk.

Az MTA évek óta nagy hangsúlyt fordít arra, hogy a kutatóhelyeknek juttatott közvetlen költségvetési támogatás mellett kiválósági pályázatokkal készítse fel a kutatóhálózatát az új kihívásokra. 2014-re az MTA pályázatainak összessége egységes rendszerré állt össze. Az emberierőforrás-fejlesztést szolgálja a) a fiatal kutatói álláshelyrendszer, b) az MTA Posztdoktori program, c) a Bolyai program, d) a Lendület program, e) az MTA támogatott kutatócsoport program, f) MTA vendégkutatói programja, g) a Kutató Professor Emeritus-rendszer. Az infrastruktúra-fejlesztés összetevői: a) a kutatóépületek folyamatos megújításának programja (beleértve a beruházásokat és a felújításokat egyaránt), valamint b) a kutatási infrastruktúra-fejlesztési program is. A 2014-ben elkezdett akadémiai-egyetemi kiválósági együttműködési program pedig a humán erőforrás- és az infrastruktúra-fejlesztés szempontjából is nagy jelentőségű, a jövőben feltétlenül bővítendő kezdeményezés. A kutatási pályázati rendszert tudásátadó „szakmódszertani” pályázat egészíti ki.

2014 derekas év volt, amelyben értékmegőrző megújítás (azaz az új kihívásokra való felkészülés, meglévő értékeinkre való gondos odafigyelés) részesei és alakítói vagyunk. Legyünk büszkéek 2014-es kutatási eredményeinkre.

Az MTA kutatóhálózatának éves beszámolóját három kötetben tesszük közzé, amelyek – a gazdag tudományos eredménylista mellett – számot adnak a kutatóhelyek 2014. évi tudományszervezési, eredményhasznosítási, oktatási és pályázati tevékenységéről is.

Bízom benne, hogy az olvasó részletes és egyúttal elemző képet is kap az akadémiai kutatóintézetek és kutatócsoportok elmúlt évi tevékenységéről.

Budapest, 2015. március 30.

Török Ádám
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 2013-ra) 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 2014. 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 közleményfajta 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 2014-es összesített impaktfaktorhoz a folyóiratok legutóbbi (2014-ben közzétett, de a 2013-as évre vonatkozó) impaktfaktorát használjuk.

⁸ A kutatóhelyhez rendelt összes eddigi publikációra 2013-ban kapott (a megjelenési év: 2013) 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 2013/2014-es tanév második és a 2014/2015-ös tanév elő szemeszterére vonatkoznak.

¹⁵ A 2014. évben a kutatóhely részére a Magyar Államkincstár által kiutalt összes költségvetési támogatás.

¹⁶ 2014. 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

1117 Budapest, Magyar tudósok körútja 2.; 1519 Budapest, Pf. 286.

telefon: (1) 382 6900

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

I. A kutatóközpont egészét érintő kutatási és tudományszervezési eredmények 2014-ben

A kutatóközpont életének minden területén gyökeres változások történtek 2014-ben. Négy különböző telephelyről költözött egy új telephelyre és épületbe, ahol az új infrastruktúra megismerése és birtokba vétele több évtizede nem tapasztalt kihívások elé állította a mindössze két éve működő szervezetet és a kutatókat. A második negyedév közepére fejeződött be a tervszerűen lebonyolított költözés. Az év során folyamatosan üzembe helyezték az áttelepített, a kutatási munkához nélkülözhetetlen műszereket. Az infrastruktúra beüzemelése mellett a szervezeti struktúrában is jelentős módosításra került sor. A kutatási súlypontokat újragondolták és ennek kapcsán végrehajtott szervezeti átalakítás a második negyedévtől működött. Átszervezésre került a Molekuláris Farmakológiai Intézet, kutatócsoportjai tematikájuknak megfelelően a TTK négy intézetéhez csatlakoztak. Létrejött az Agyi Képző Központ, két kutatócsoporttal és a Műszercentrum, mely egységek közvetlenül a kutatóközponthoz kötődve folytatták kutatási munkájukat.

A kutatási struktúra átalakítását új pályázati források megjelenése, a Nemzeti Agykutatási Program és ezzel egy időben, a többi állami pályázati forrás befagyása tette szükségessé.

A hazai kutatásfinanszírozási átszervezések miatt elhúzódott egyes projekt típusok elszámolása, kifizetése és előleg-finanszírozása. A 2014-ben elnyert OTKA pályázatok többségét csak 2015. január 1-vel lehet megkezdeni.

Az Európai Unió pályázatok indulásában, az FP7-H2020 rendszerek vonatkozásában 2014 szintén váltó év volt.

MTA TTK AKI

Az MTA TTK öt intézetének év eleji új kutatóházba költözésével könnyebbé vált a kémiai intézetek, valamint a KPI és az EI közötti együttműködés, az intézetnek az MFA-val már korábban kialakult munkakapcsolata az intézetek földrajzi távolsága ellenére változatlanul szoros maradt. További lényeges változást hozott az intézet életében, hogy az Molekuláris Farmakológiai Intézet megszűnésével két szervezeti egység csatlakozott az intézethez, ami a művelt témák között a biológiai vonal erősödését eredményezte.

Az intézet és az MTA TTK többi intézete közötti sok publikációban megmutatkozó gyümölcsöző együttműködések alapja, hogy az intézetek kutatói különböző iskolákból nőttek ki, ismereteikkel hasznosan kiegészítik egymást, a rendelkezésükre álló különböző vizsgálati módszerekkel a megoldandó problémákat komplexen, multidiszciplinárisan tudják megközelíteni.

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 a kutatóközpont többi intézetének kutatói is.

MTA TTK EI

Az Enzimológiai Intézetben számos tudományterületet átfogó, interdiszciplináris kutatások folynak, melyek során mind a biológia, mind fizika és a kémia tudománya által kínált lehetőségek alkalmazásra kerülnek. A kutatóhelyen részben szerkezeti biológiai alaputatásokat végeztek, melyek lehetővé teszik a fiziológiás és patofiziológiás folyamatok

sejt és molekula szintű értelmezését, másrészt a szerkezeti biológia mellett folyamatosan bővül a kutatási tevékenység a komplex biológiai folyamatok megértését célzó rendszerbiológia irányába a proteomika és a bioinformatika lehetőségeinek kihasználásával. Így többek között vizsgálja a sejtekben zajló jelátviteli utakat, a rendezetlen fehérjék működését, a komplementrendszer aktiválódási mechanizmusait molekulászerkezeti alapon, a daganatos és neurodegeneratív betegségek kialakulásához vezető egyes folyamatokat, a transzmembrán fehérjék szerepét, valamint a DNS hibajavításban szerepet játszó enzimeket.

Az intézet fontos eredménye a nemzetközileg beágyazott alapkutatás mellett a felsőoktatásban folyamatosan végzett oktatási aktivitás. Munkatársaik négy egyetemen tartanak előadásokat, illetve gyakorlatokat mind az alapképzésben, mind a posztgraduális oktatásban. Az intézet 2014-ben már hetven doktoranduszhallgató oktatását látta el, akik munkájukkal nagymértékben hozzájárulnak az intézet eredményeihez.

Az intézet alapkutatási eredményeinek hasznosítására együttműködések jöttek létre különböző kis- és nagyvállalatokkal. 2014-ben az intézet aktívan kooperált a Richter Gedeon NyRt-vel, és szoros kapcsolatokat alakított ki számos kisvállalattal. Az intézet kiemelten fontosnak tekinti a magyar tudomány eredményeinek nemzetközi szinten történő képviselését, amit nemzetközi pályázatok résztvevőiként és nemzetközi szervezetekben viselt tisztségek útján valósít meg.

MTA TTK KPI

A KPI Összehasonlító Pszichofiziológiai Csoportja a Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Intézettel a NAP program keretében működik együtt, melynek eredményeként egy folyóiratcikk is megjelent az általuk kifejlesztett platina elektródok tartósságáról in vitro és in vivo regisztráció során.

A Funkcionális Farmakológiai Csoport sikeresen szerepelt az MTA TTK Együttműködési pályázatán. Közös pályázatot nyert el három intézettel is: az Anyag- és Környezetkémiai Intézettel, az Enzimológiai Intézettel és a Szerves Kémiai Intézettel. Utóbbi két intézettel egy-egy közös publikációjuk is megjelent az év folyamán.

A Kognitív Idegtudományi II. Csoport az Agyi Képző Központtal a Lendület pályázat keretében vizsgálta a prozódia hatását a beszélők szétválasztására, a CogNoVo keretében pedig az egyéni különbségek statisztikai modellezésére került sor.

Az intézet munkatársai tudományos előadásokkal, demonstrációkkal, laborbemutatóval vettek részt a TTK közreműködésével zajló rendezvényeken, így a Magyar Tudomány Ünnepe, a Kutatók Éjszakáján, a Lányok Napján és az „AKI kíváncsi kémikus” kutatótáborban.

MTA TTK MFA

2014-ben az intézet fő eredményeit továbbra is a nanoméretű funkcionális anyagokon feltárt, azok fizikai, kémiai és biológiai tulajdonságait, valamint az ismeretek hasznosítása integrált nano/mikroeszközökben, szenzorokban és roncsolásmentes vizsgálati módszerek fejlesztésében érte el.

A TTK szinten végrehajtott szervezeti egység átnevezések az MFA-ban is megtörténtek, az addigi kutatási egységek kutatócsoport néven folytatták. A szervezeti struktúra a már korábban is meglévő 5 tudományos osztály mellett a Nanobioszenzorika Lendület kutatócsoporttal, mint önálló kutatási egységgel egészült ki. Júliustól egy második 2D Nanoszerkezetek Lendület csoport is megkezdte működését az intézetben.

Az MFA legkritikusabb gazdálkodási problémája a finanszírozó állami szervek szerződéses kötelezettségvállalásának akut nem teljesítése volt és maradt. Ennek ellenére születtek kimagasló szakmai teljesítmények az intézetben: a már említett új Lendület csoport indításán túl a grafén-kutatásban ez évben jelent meg az MFA első Nature publikációja. Munkatársaik

elnyerték az MTA szabadalmi nívódíját, egy Akadémiai Ifjúsági Díjat, egy EUROSENSORS Fellow díjat, egy megyei Prima Díjat és számos egyéb kitüntetést. Egy kollégájukat a Magyar Művészeti Akadémia rendes tagjává választotta. Tudományos minősítés terén 4 intézetből indult MTA Dr. és két PhD fokozatszerzés történt. Az MFA-team bekerült a Grafén Flagship Projektbe, egy ERANET egy EUREKA és egy ENIAC pályázatba. A gazdálkodási megszorítások ellenére megrendezték a REM konferenciát Budapesten, megszervezték az MFA-Napot, a középiskolás nyári tábort 25 Kárpát-medencei diák részvételével, kiosztották az MFA Díjakat, támogatták az Arany János Általános Iskola és Gimnáziumot és sikerült megmenteniük a Nanobuszt, ami metamorfózisa után immár „Sokszínű Fizika” néven járja az országot.

Az MTA új vezetői kollégiumának júliusban megszületett döntése nyomán az MFA 2015. január 1-től kiválik a TTK-ból és az MTA EK adminisztratív részeként működik tovább.

MTA TTK SZKI

Az SZKI általános kutatási profilja a szerves kémia, amely centrális kutatási terület, így lehetőséget nyújt széleskörű tudományos kooperációkra. A szintetikus kémiai laboratóriumok új modell vegyületeket állítanak elő anyagtudományi és biológiai vizsgálatok 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 Kutatócsoport a TTK-ban egyedülálló módon foglalkozik kvantumkémiaiával és egyéb elméleti számításokkal, melyek szervesen egészítik ki a teljes központ kutatásait.

A tárgyévben az Enzimológiai Intézettel élő, napi kapcsolat fejlődött ki 2012-től a membránfehérjékkal foglalkozó laboratórium (Lendület program) és az SZKI Organokatalízis Laboratórium között. Az SZKI kutató egységében előállított vegyületeket a membránfehérje laboratórium állatkísérleteinél használja fel.

Az MS Metabolomika Kutatócsoport az általuk művelt műszeres analitika alapján számos metabolizmus vizsgálatban vett részt együttműködő partnerként, különösképpen a Biomembrán Kutatócsoporttal. Az együttműködés keretében gyógyszerjelölt molekulák analitikai jellemzése, illetve a biológiai aktivitással rendelkező molekulák farmakokinetikai vizsgálatát végezték el.

Anyag- és Környezetkémiai Intézet Spektroszkópia Kutatócsoport ESR Laboratórium és az SZKI Organokatalízis Laboratóriumával együtt vizsgálják a frusztrált Lewis párok egy különleges, nemrégiben általuk felismert reaktivitását, az egy elektron átmenetet követő gyökionpárok képződését.

Az SZKI Kémiai Biológia Kutatócsoportja az AKI Környezetkémiai Kutatócsoportjával együttműködésben biológiai rendszerekben használható jelző molekulák új fluoroforjainak fotokémiai és fotofizikai tulajdonságait határozták meg.

A rendszeresen megrendezésre kerülő Szerves Kémiai Szemináriumok, melyek a teljes kutatóközpont körében népszerűek, kitűnő fórumot biztosítanak arra, hogy az SZKI-ben folyó kutatási irányok a társintézetek részére is megismerhetőek és követhetőek legyenek, és ezzel tovább szélesedő, kutatóközponton belüli együttműködés valósuljon meg.

2014-ben a kutatóközpont számos területen kötött együttműködési megállapodást felsőoktatási intézményekkel és vállalati szereplőkkel.

Szegedi Tudományegyetem, Semmelweis Egyetem, ELTE Pedagógiai és Pszichológiai Kar, Országos Klinikai Idegtudományi Intézet (OKITI), Jedlik Ányos Klaszter, Thomas Jefferson University, Teradata Hungary Ltd, BME VBK, Pázmány Péter Katolikus Egyetem, Óbudai Egyetem Bánki Donát Gépész és Biztonságtechnikai Mérnöki Kar, Szent István Egyetem,

II. Közvetlenül a kutatóközpont vezetése alá tartozó kutatócsoportok kutatási eredményei, ezek jelentősebb publikációi

A kutatóközponti átszervezés egyik eredményeként a kutatóközpontokhoz közvetlenül tartozó, három, új kutatócsoportot hoztak létre. Ezen kutatócsoportok eredményei az intézeti kutatócsoportokra vonatkozó részletességgel kerülnek bemutatásra.

Agyi Képpalkotó Központ, Agyi Szerkezet és Dinamika Kutatócsoport

A csoportban folyó kutatások kiterjedtek az EEG és fMRI módszerek fejlesztésére, valamint azok alkalmazására, az emberi kognitív képességek háttérét képező egészséges és kóros idegrendszeri folyamatok és agyi hálózatok jellemzésére. Legfontosabb új eredmények:

Látáskutatás: Azonosították a zajos ingerek és rossz látási körülmények esetén is hatékony tárgyfelismerést lehetővé tevő látókérgi hálózatot. Az eredményekből kiderült, hogy ezen hálózaton belüli intrinszik funkcionális konnektivitás erősségének egyének közötti különbségei megjósolják az individuális tárgyfeldolgozás hatékonyságát. A vizsgálatokat hagyományos ingerhez, feladathoz kötött, valamint nyugalmi intrinszik funkcionális konnektivitás fMRI módszerek együttes alkalmazásával folytatták. Az első kísérletsorozat a zajos ingerek, rossz látási viszonyok esetén is hatékony tárgyfeldolgozást biztosító visszacsatoló (recurrent) feldolgozási folyamatok agyi hálózatára fókuszált. Az eredményekből kiderült, hogy a zajos (fázisrandomizált) arcíngerek feldolgozásában elsődleges szerepet játszik az arc-szelektív fusiform face area (FFA) és a formaérzékeny, retinotopikusan szerveződő laterális occipitalis kéreg (LOC) területeket magába foglaló neurális hálózat. A viselkedési tesztekben mért egyéni arcfeldolgozás hatékonysága szoros összefüggést mutatott ezen hálózaton belüli intrinszik funkcionális kapcsolatokkal: minél erősebb az összeköttetés ezen területek között nyugalmi állapotban, annál jobb az identitás-diszkriminációs teljesítmény zajos arcokra.

Olvadás: A kutatás fókuszában az összefüggő szövegek, természetes körülmények között történő olvasásának idegrendszeri háttérét képező agyi folyamatok vizsgálata állt. A vizsgálatok normális sebességgel olvasó, kontroll önkénteseken történtek kombinált szemmozgáskövetési és EEG-módszerek alkalmazásával. A szemmozgás és EEG-adatok koregisztrációjával, valamint az egyénen belüli, single-trial szintű EEG mintázatok elemzésével sikerült jellemezniük az olvasás alatti vizuális információfeldolgozás folyamatait, beleértve azokat a komponenseket, melyek szoros összefüggést mutatnak az olvasásban való jártassággal. A kidolgozott kísérleti és adatfeldolgozási eljárások az olvasás kutatásának egy lényegében új és nagyon ígéretes megközelítését teszik lehetővé.

Figyelmi szelekció és munkamemória: A neuro-pszichiátriai betegségekkel kapcsolatos transzlációs kutatások vonatkozásában kiemelten fontos emberi munkamemória-kapacitás mérésére alkalmas fMRI intrinszik funkcionális konnektivitás módszert dolgoztak ki, amelyek segítségével sikerült kimutatniuk, hogy az individuális vizuális munkamemória-kapacitás megjósolható a munkamemória figyelmi szelekciós és tárolási folyamataiban fontos szerepet játszó parietalis és occipitalis kérgi területek közötti intrinszik funkcionális konnektivitás erősségéből. Az eredmények igazolták, hogy az intrinszik funkcionális konnektivitás fMRI mérése lehetőséget nyújt az emberi kognitív képességek háttérét képező agyi hálózatok

feltárására és jellemzésére, valamint a neuro-pszichiátriai translációs kutatásokban kulcsfontosságú fMRI biomarkerek fejlesztésére egyaránt.

Sikerült kidolgozniuk egy új kísérletes eljárást, amely lehetőséget nyújt a munkamemória hatékonysága szempontjából egyaránt fontos figyelmi szelekció és motivációs/jutalmazási szint EEG oszcillációs markereinek azonosítására és azok életkor, vagy gyógyszeres kezelés következtében történő változásának jellemzésére. Az eredményekből kiderült, hogy a jutalmazás hatására bekövetkező emlékezeti teljesítményjavulás a béta-sávban mérhető oszcillációs aktivitással függ össze. Továbbá, az egyidejű pupillometriás mérések kimutatták, hogy a pupillatágulás mértéke egy további megbízható mutatója a jutalomfüggő emlékezeti hatékonyságnak. Ugyanakkor a munkamemória figyelmi szelekciós és tárolási komponense a theta- és alfa-sávba eső oszcillációs tevékenységgel mutatott összefüggést. Az eredmények arra engednek következtetni, hogy a munkamemória különböző folyamatainak (figyelmi szelekció, információ-tárolás és jutalmazás/motiváció) háttérét képező agyi hálózatok intrinszik funkcionális konnektivitás fMRI és EEG-módszerek együttes alkalmazásával történő vizsgálata lehetővé teszi az egészséges és kóros kognitív öregedés mögöttes folyamatainak jobb megértését, valamint a neuro-pszichiátriai translációs kutatásokban kulcsfontosságú fMRI és EEG-biomarkerek fejlesztését egyaránt.

Tompalátás kutatás: A 3D for All Kft-vel együttműködésben elkészült egy számítógépes tréningcsomag, amely a tompalátás neurális rendellenességeinek helyreállítását célozza. A tréningsoftver koncepciója a korábbi saját és irodalmi eredményeken alapul, és a 3D for All Kft által fejlesztett immerzív 3D virtuális realitás platformra készült. Elsődlegesen a mélységészlelés fejlesztését célozza, és ezáltal a tompalátók tompalátó szemének látásjavulását eredményezheti. A kutatás-fejlesztési program célja kettős: egyrészt a tompalátással diagnosztizált gyermekek számára egy hatékony és élvezhető terápiás eszköz létrehozása, ami kiváltja a jelenlegi sokat kritizált szemletakarásos terápiát; másodsorban a szoftver segítségével lehetővé válna a tompalátás felnőttkori javítása/gyógyítása is, mely takarásos módszerrel már nem korrigálható. A tréningsoftver koncepciójának sikeres tesztelése megtörtént. A gyerekek szemészeti felmérése és szemük javulásának nyomon követése a Semmelweis Egyetem Szemészeti Klinikáján zajlott. A vizsgálatok eredményeiből kiderült, hogy a tréningsoftver képes szignifikánsan javítani tompalátó gyermekek látásélességét és térlátását már 10 óra játékidő után. A játék során használt 3D-s egérezköznek köszönhetően a gyermekek vizuomotoros koordinációs képessége is kimutathatóan javult. A szoftvert a validációs vizsgálat eredményei és tanulságai alapján továbbfejlesztették. Folyamatban van a végleges szoftververzió hatékonyságát tesztelni hivatott nagyobb elemszámú vizsgálat előkészítése.

További eredmények

3T MR készülék beszerzése: Az év során a csoport szakmai irányításával sikeresen lezajlott egy új 3T MR készülék beszerzési eljárása. Az eljárás nyertese a Siemens 3T MAGNETOM Prisma lett, mely a piacon jelenleg elérhető legkorszerűbb kutatás-fejlesztési célokra optimalizált 3T MR készülék. A készülék telepítése megkezdődött az MTA TTK által biztosított és a célnak minden szempontból kiválóan megfelelő MR laborterületen. Az átadása 2015. év elején várható. Az új készülék páratlan lehetőségeket teremt az fMRI adatgyűjtési és feldolgozási módszerek fejlesztése és alkalmazása területén.

Agyi Képpalkotó Központ, Neurokognitív Fejlődés Kutatócsoport

Kiemelkedő kutatási eredmények négy fő témában születtek, s ezek nemzetközi publikációkban is megjelentek.

Az elektrofiziológiai módszerekkel végzett, a *Research in Developmental Disorders* című

folyóiratban publikált kutatássorozatban a kutatók azt vizsgálták, hogy milyen szerepe van az anyaméhben szerzett tapasztalatnak a beszédészlelés korai fejlődésére. Az eredmények a beszédhangok és a szóhangsúly feldolgozásának olyan lényeges eltérését jelezték, amely legkifejezettebb a koraszülött csecsemőknél volt. Míg a szóhangsúly differenciált feldolgozása még 10 hónapos korban is elmaradást mutatott a normál időre születettekétől, ez a fejlődési különbség nem volt kimutatható a beszédhangok eltéréssel kiváltott agyi válaszok esetében. Az újdonságnak számító eredmények jelentőségét az adja, hogy a koraszülöttek a beszédfejlődés szempontjából is magas kockázati csoportnak tekinthetők. E kockázat vonatkozik a későbbi nyelvi, s következményesen a tanulási problémák kialakulására is, ezért a specifikus összetevők mélyebb ismerete rendkívül fontos. A kutatási eredményekre támaszkodva megkezdődött egy korai prevenciós program kidolgozása. A kutatóknak sikerült azt is kimutatni, hogy a tipikusan fejlődő csecsemőknél az anyanyelvre jellemző szóhangsúly, s az attól eltérő mintázatokra mutatott érzékenység 6 és 10 hónapos kor között jelentősen változik (*International Journal of Psychophysiology*). A kialakult hangsúly-reprezentáció kurrens modelljeinek ellentmond a kutatócsoportnak az az eredménye, amely szerint az idegen nyelvek észlelésében feltételezett „hangsúlysüketség” az agyi válaszokban nem jelenik meg, a hallási mintázatokra való érzékenység fiatal felnőtteknél jól mérhető (*International Journal of Psychophysiology*).

A végrehajtó funkciók agyi hálózatának mélyebb feltárására irányuló kutatások azt igazolták, hogy mind a felnőttkori vonásimpulzivitás, mind a figyelemhiányos hiperaktivitás (ADHD) elektrofiziológiai mutatókkal feltárható neurokognitív háttere az eddig ismertnél összetettebb. A kutatók több nemzetközi folyóiratban is publikált adatai szerint e jelenségek nem magyarázhatók csak a sérült gátlási kontroll vagy a sérült végrehajtó funkciók megnyilvánulásaként (*Advances in Psychiatry, Child Neuropsychology, International Journal of Psychophysiology*). A kutatók egy további, a *Psychophysiology* című folyóiratban megjelenés alatt álló közleményükben egy új, elektrofiziológiai kísérletekben még nem alkalmazott paradigma alkalmazásával azt is kimutatták, hogy a végrehajtó funkciók általános működési szintje erősen befolyásolja a kockázati döntéseket. Az ismeretlen valószínűségű jutalmazó és büntető ingereket alkalmazó döntésekben a végrehajtó működések szintje szerint nem volt eltérés a viselkedéses tesztekben. Az elektrofiziológiai adatok azonban egyértelműen igazolták, hogy a végrehajtó működések magasabb szintjén olyan prediktív belső modell jön létre, amely a feedback-érzékenységet növeli.

A kutatócsoport klasszikus kutatási témája az olvasás és az olvasási zavarok agyi korrelátumainak vizsgálata. A nemzetközi kollaborációban végzett vizsgálatokról készült publikációkban bemutatott adatok tovább erősítették a csoport azon korábbi eredményeit, amelyek szerint az olvasás és zavarai a nyelvi fejlődés komplex, még teljességében fel nem tárt rendszerének fejlődésétől függenek. A genetikai vizsgálatok a résztvevő nyolc ország közül többenél, így a magyar mintán is találtak asszociációs jeleket, egyetlen marker vagy haplotípus sem mutatott jelentős összefüggést az olvasás fejlettségével vagy annak egyes mutatóival (*European Journal of Human Genetics*). A kutatók következtetése szerint a diszlexia, mint összetett neurokognitív zavar, általános genetikai jellemzőinek feltárására irányuló kutatásokban a vizsgálatnál (900 fő) nagyobb minta bevonása szükséges. Ugyanakkor egy több mint ezer főn végzett nyelvközi vizsgálat eredményei (*Learning and Instruction*) azt mutatják, hogy a fonológiai manipuláció, s a mentális lexikonhoz való hozzáférés vizsgálatával az olvasás és helyesírás két általános, az adott nyelv ortográfiájától független mutatója ragadható meg. E két mutató prediktív ereje igen erős a legtöbb nyelvben, kivéve az angolt, ahol ez gyengébbnek mutatkozik.

A kutatócsoport új, hazai és nemzetközi kollaborációban végzett, s növekvő nemzetközi érdeklődést kiváltó kutatásainak középpontjában a téri kogníció áll. A virtuális térben végzett viselkedéses és elektrofiziológiai vizsgálatok számos meglepő, az aktuális modelleknek részben ellentmondó eredményt hoztak. Az első, már publikált (*Journal on Multimodal User Interfaces*) eredmények azt mutatják, hogy a multiszenzoros integráció és válaszserkentés akkor is hatással van a teljesítményre, ha a célingert kevésbé jelzi előre a célt jelölni nem hivatott inger. Az eredmények arra utalnak, hogy a téri eloszlás nem-gaussi paraméterei elkülönülő kognitív folyamatokat tükröznek. A kutatási eredmények egyik lehetséges alkalmazási területét az alkalmazó válaszidejét az optimális eredmény eléréséhez felhasználó intelligens jelzőrendszerek fejlesztése jelentheti.

További eredmények

A kutatócsoport 2014 áprilisától az MTA TTK új szervezeti egységében, az Agyi Képző Központban, megújult kutatási profillal és új néven folytatta munkáját. Az AKK kutatócsoportjainak egymást kiegészítő szakértelme és kutatási témái új integrációs feltételeket teremtettek. Az AKK új MR-laboratóriumában 2015-ben működését megkezdő 3T fMRI beszerzésének, beüzemelésének és működésének szakmai felügyeletét a kutatócsoport vezetője MTA elnöki megbízottként látta és látja el. A kutatócsoport vezetőjének témavezetésével a kutatócsoport két vezető témájában négy PhD disszertáció készült el, amelyeket sikeresen megvédtek.

Az elektrofiziológiai (EEG és EKP /eseményhez kötött agyi potenciál/) adatok elemzésére új, további fejlesztés alatt álló, R-nyelvben írott feldolgozó program készült el.

Elkészült a diszlexia első magyar nyelvű, számítógépes tesztjének kézikönyve.

Műszercentrum

2014-ben megoldották a nagyműszerek (5 db tömegspektrométer, 2 db NMR és 1 db egykristály röntgendiffraktométer) átköltöztetését az új telephelyre. Üzembe állították és tesztelték a készülékeket, elérték, hogy a Műszercentrum biztosítani tudja a nagyműszeres szolgáltatásokat. Együttműködtek proteinkomplexek tömegspektrométeres vizsgálatában az Enzimológiai Intézettel, glikoproteomikai kutatásban a Szerves Kémiai Intézettel. Metabolitok és glikoproteinek analitikájában alkalmazták a tömegspektrometriás technikákat (az NKTH VKSZ-12-1-2013-0001 pályázat keretén belül a Richter Gedeon Nyrt-vel közösen).

Szerkezetfelderítést, szerkezetazonosítást végeztek oldatfázisú NMR-vizsgálatok alkalmazásával heterociklusos vegyületek és polimerek körében.

A 2014-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Bankó ÉM, Körtvélyes J, Németh J, Vidnyánszky Z: Amblyopic deficit beyond the fovea: delayed and variable single-trial ERP response latencies, but unaltered amplitudes. *Investigative Ophthalmology & Visual Science*, 55(2):1109-1117 (2014) <http://real.mtak.hu/11023>
2. Knakker B, Weiss B, Vidnyánszky Z: Object-based attentional selection modulates anticipatory alpha oscillations. *Frontiers in Human Neuroscience*, 8:1048 (2014) *OA Journal* <http://journal.frontiersin.org/Journal/10.3389/fnhum.2014.01048/full>
3. Grotheer M, Hermann P, Vidnyánszky Z, Kovács G: Repetition probability effects for inverted faces. *NeuroImage*, 102(P2):416-423 (2014) <http://real.mtak.hu/21734/>

4. Kóbor A, Takács Á, Honbolygó F, Csépe V: Generalized lapse of responding in trait impulsivity indicated by ERPs: The role of energetic factors in inhibitory control. *Int J Psychophysiology*, 92:16-25 (2014) <http://real.mtak.hu/10955/>
5. Ragó A, Honbolygó F, Róna Z, Beke A, Csépe V: Effect of maturation on suprasegmental speech processing in full-and preterm infants: A mismatch negativity study. *Research in Developmental Disabilities*, 35(1):192-202 (2014) <http://real.mtak.hu/13036/>
6. Moll K, Ramus F, Tóth D, Honbolygó F, Csépe V, Landerl K: Cognitive mechanisms underlying reading and spelling development in five European orthographies. *Learning and Instruction*, 29:65-77 (2014) <http://real.mtak.hu/11400/>
7. Becker J, Czamara D, Scerri TS, Ramus F, Csépe V, Tóth D, Honbolygó F: Genetic analysis of dyslexia candidate genes in the European cross-linguistic NeuroDys cohort. *Eur J Hum Genet*, 22 (5):675-680 (2014) <http://real.mtak.hu/20619/>
8. Nagy GN, Marton L, Contet A, Ozohanics O, Ardelean LM, Revesz A et al. (5, Vekey K): Composite aromatic boxes for enzymatic transformations of quaternary ammonium substrates. *Angewandte Chemie-International Edition*, 53(49):13471-13476 (2014) <http://real.mtak.hu/18134/>
9. Horváth G, Egyed O, Toke O: Temperature dependence of backbone dynamics in human ileal bile acid-binding protein: Implications for the mechanism of ligand binding. *Biochemistry*, 53(31):5186-5198 (2014) <http://real.mtak.hu/21827/>
10. Bobaly B, Toth E, Drahos L, Zsila F, Visy J, Fekete J, Vekey K: Influence of acid-induced conformational variability on protein separation in reversed phase high performance liquid chromatography. *Journal of Chromatography A*, 1325:155-162 (2014) <http://real.mtak.hu/20955/>
11. Szoboszlai N, Guo XH, Ozohanics O, Olah J, Gomory A, Mihucz VG, Jeney A, Vekey K: Determination of energy metabolites in cancer cells by porous graphitic carbon liquid chromatography electrospray ionization mass spectrometry for the assessment of energy metabolism. *Analytica Chimica Acta*, 819:108-115 (2014) <http://real.mtak.hu/20958/>

MTA TERMÉSZETTUDOMÁNYI KUTATÓKÖZPONT

ANYAG- ÉS KÖRNYEZETKÉMIAI INTÉZET

1117 Budapest, Magyar tudósok körútja 2; 1519 Budapest, Pf. 286.

telefon: (1) 382 6500

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

I. A kutatóhely fő feladatai 2014-ben

Az intézet fő feladata 2014-ben magas színvonalú kémiai és interdiszciplináris kutatások végzése volt az anyagtudomány, az anyagtechnológia, a biológiai anyagtudomány és a környezeti kémia kiemelt területein.

Kutatómunkájukban a felmerülő tudományos kérdésekre komplex módon, a kémia, fizika és biológia eszköztárát felhasználva 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 biológiai, valamint az anyagtudományi és a környezetkémiai vonatkozások együttesen jelennek meg.

Anyagtudományi kutatásaikban különleges funkcionális anyagok előállítási 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.

A biológiai témájú kutatásaikban felhasználták anyagtudományi ismereteiket annak érdekében, hogy egyrészt a biológiai rendszerek megismerésére alkalmas speciális vizsgálati módszereket fejlesszenek ki, másrészt olyan anyagi rendszereket hozzanak létre, melyek biológiai közegben működőképesek.

Környezetkémiai kutatásaikban a megújuló energiaforrások alkalmazási lehetőségeivel és újszerű energiatárolási és hasznosítási eljárásokkal, valamint környezeti károk megelőzésére, illetve felszámolására alkalmas eljárások kifejlesztésével foglalkoztak.

II. A 2014-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

A kiemelkedő kutatási eredmények tárgyalásakor, az elsősorban anyagtudományi témáktól haladnak a biológiai rendszerek szempontjából fontos témákon keresztül, az elsősorban környezeti kémiai témákig.

Jól definiált szerkezetű multifunkciós polimerek

Új szerkezetű (lineáris és hiperelágazós) multifunkciós polimerek előállítását és azok funkcionalizálását dolgozták ki. Hiperelágazós polimereket állítottak elő 3-oxetanometanol és glicidol gyűrűfelnyílásos polimerizációjával. Ezekből az anyagokból, illetve kereskedelmi forgalomban kapható, elágazó poli(etilén-imin)-ből az általuk kidolgozott egyszerű egy lépéses eljárással olyan teljesen új, az irodalomban eddig még le nem írt, makromolekuláris stabilizátorokat hoztak létre, amelyek csomagoló és mezőgazdasági fóliákban alkalmazhatók. Igazolták, hogy azok kioldódása jelentősen kisebb a jelenleg alkalmazott kismolekulás stabilizátorokénál. Közvetlen egy-reakcióedényes módszert dolgoztak ki allil-telekelikus polisztirol előállítására, atomátadásos gyökös polimerizáció és azt követő karbokationos allilálás kombinálásával, amelynek láncvégeit különböző eljárásokkal továbbalakítva hidroxil-, karboxil-, amin-, valamint epoxid funkciós csoportokat

alakítottak ki. Különböző poli(terc-butil-akrilát-ko-poli(etilén-glikol)-metakrilát) kopolimereket állítottak elő. Hőmérséklet-érzékeny tulajdonságokkal rendelkező poli((poli(etilén-glikol)-metakrilát-ko-N-vinil-imidazol) kopolimereket és poli(N-izopropil-akrilamid) (PNIPAAm) és N,N-dietil-akrilamid alapú hibrid kopolimereket szintetizáltak, és vizsgálták ezek vizes oldatainak hőmérséklet-érzékeny viselkedését, termikus tulajdonságaikat és hatóanyag-leadó rendszerként történő alkalmazhatóságukat.

Különleges nanoszerkezetű amfifil kotérhálók

Poli(N-vinilimidazol)-tartalmú kotérháló-sorozatok vizsgálata során megállapították, hogy poli(propilén-oxid) és kis molekulatömegű poli(etilén-glikol) keresztkötők esetén nem tapasztalható az amfifil kotérhálókra jellemző nanoméretű fázisszeparáció, hanem ezek egységes anyagként viselkednek.

Kutatták, hogy poli(N-vinilimidazol), illetve poli(2-hidroxi-etil-metakrilát)-tartalmú amfifil kotérhálók miképpen használhatók templátként nanoméretű fémrészecskék előállításához. Ennek során palládium, illetve arany nanorészecskéket hoztak létre a kotérhálók egyik nanofázisában, és vizsgálták ezen újszerű nanohibrid anyagok katalitikus aktivitását egy modellreakcióban. Megállapították, hogy arany nanorészecskék esetében csak bizonyos előállítási reakciók esetén tapasztalható katalitikus aktivitás.

Tanulmányozták poliizobutilénnel keresztkötött poli(poli(etilén-glikol)-metakrilát) láncokból felépülő kotérhálók és triblokk-kopolimerek lítiumion-vezetését. Az eredmények arra utalnak, hogy ez az anyagcsalád újfajta lítiumion-vezető polimer alapú elektrolit rendszerek egyik alapanyaga lehet.

Poliolefinek szerkezet-tulajdonság összefüggéseinek feltárása és tulajdonságainak módosítása

A polietilén por jellemzői és a végtermék tulajdonságai közötti összefüggéseket tárták fel. Meghatározták különböző adalék csomagok összetételének hatását a polietilén és a polipropilén jellemzőire. Polipropilén optikai tulajdonságainak tanulmányozása során megállapították, hogy speciális oldódó göcképzők adagolása mellett a mintában jelen lévő szupermolekuláris képződmények mérete befolyásolja leginkább a minták jellemzőit. A kutatások során modellt állítottak fel, ami mennyiségileg leírja a göcképző hatékonyságának, valamint a homályosságnak a göcképző koncentrációjától való függését. Megállapították, hogy a modell paraméterei a minták molekuláris szerkezetétől függenek. Meghatározták különböző feldolgozási és alkalmazási stabilizátorokkal feldolgozott polietilén csövek hidrolitikus stabilitását, és következtetéseket vontak le az azt befolyásoló legfontosabb tényezőkről. A polimerek környezetre gyakorolt hatásának javítására különböző természetes antioxidánsok (kurkumin, kvercetin, β -karotin) hatékonyságát vizsgálták polietilénben. Összefüggést állapítottak meg a polimer jellemzői és az antioxidánsok koncentrációja, valamint a feldolgozási és alkalmazási körülmények között. A kutatást a TVK Nyrt-vel, a magyar poliolefin gyártóval kooperációban végezték.

Természetes és szintetikus polimerek és társított rendszereik

Intenzíven tanulmányozták biopolimerekből előállított társított rendszerekben a határfelületi kölcsönhatásokat. Politejsavból (PLA) készített keverékeket vizsgálva megállapították, hogy a PLA/poli-metil-metakrilát polimer pár esetén alakul ki a legerősebb kölcsönhatás, míg a polisztirol és a polikarbonát kölcsönhatása a biopolimerrel gyengébb. Természetes erősítőanyagokkal (faliszt, kukoricacsutka-örlemény) módosított politejsav kompozitokban három egymástól független módszerrel is igazolták, hogy a faliszt és a politejsav között meglehetősen erős kölcsönhatás alakul ki. Hasonlóan erős határfelületi kölcsönhatást mutattak

ki természetes szálakkal és rétegszilikáttal módosított termoplasztikus keményítőben (TPS) is. A társító anyagokkal sikerült a TPS zsugorodását és vízfelvételét csökkenteni, mechanikai tulajdonságait javítani. Polipropilén és politejsav alapú kompozitok deformációs folyamatainak jellemzése és összehasonlítása igazolta, hogy erős adhézió esetén a természetes szálak szilárdsága határozza meg a kompozitok makroszkópos tulajdonságait. A szálak belső szilárdsága függ a terhelés irányától, valamint a szemcsék méretétől. Többkomponensű, elasztomer is tartalmazó faliszt erősítésű PP kompozitok vizsgálatai során igazolták, hogy az erős adhézió mindig a természetes szálak tördelődését eredményezi. A tönkremenetelhez vezető makroszkopikus feszültség függ a kompozit elasztomer-tartalmától, de azonos lokális feszültség alakul ki a faliszt szemcsék környezetében. A gyógyszeripari csomagolóanyagként alkalmazható polimer/deszikkáns kompozitok kutatása során funkcionális adalék segítségével sikeresen módosították etilén-vinilalkohol polimerek tulajdonságait. Funkcionális kompozitokat állítottak elő különböző deszikkánsok segítségével. A vízmegkötő képességgel rendelkező kompozitok vízfelvételi tulajdonságai a deszikkánsok típusától és mennyiségétől függtek elsősorban. A kutatások egy jelentős része hazai vagy nemzetközi együttműködéshez, illetve pályázathoz kapcsolódik.

Funkcionális bevonatok kialakítása

Mágneses és dielektromos veszteségeket okozó, mechanikai hatásoknak és hőterhelésnek is ellenálló bevonatok kialakításának lehetőségét vizsgálták plazmaszórással. Az optimális anyagi rendszer meghatározását követően eljárást dolgoztak ki szórásra alkalmas kompozit granulátumok előállítására. A szervesen alkotók anyagától (kerámia vagy fém) függetlenül az alkotók finomszemcsés poraiból kialakított néhány 10 µm-es, gömbszerű granulátumok szerves kötőanyag nélkül is kellő szilárdságúak és szórásra alkalmasak, ezért különféle felületbevonáshoz használt termikus szórási technikák kiindulási anyagaként jöhetnek szóba. A kifejlesztett eljárásra szabadalmat nyújtottak be.

Mágneses nanorészecskék előállítása

Vasat és kobaltot tartalmazó, kétfázisú, teljes körűen redukált állapotú mágneses nanorészecskék kémiai előállítási lehetőségeit tanulmányozták. Megállapították, hogy nemionos felületaktív anyagok jelenlétében a vas és a kobalt ionok együttesen redukálhatóak mikroszemcsés fémalumíniummal. A redukációs folyamatban egy közös kristályrácsba rendezett köbös szerkezetű fémötvet alakul ki. Ez a fémötvet jellemzően anizometrikus, átlagosan 10 nm átmérőjű és 100 nm hosszúságú részecskékből áll. Az alkalmazott felületaktív anyagok adszorpciós képességének köszönhetően a redukált állapotú fémötvet nagy ellenálló képességgel rendelkezik a levegőn való oxidációval szemben, mivel nagy tömörségű, rendezett szerkezet alakul ki a fémrészecskék felületén. Ez a meglepő és nem várt viselkedés rendkívül nagy jelentőségű, hiszen ismeretes, hogy a finom eloszlású redukált fémek, pl. a vas is pirofóros tulajdonságúak. A nanoméretű fémporokat nagyon nehéz, illetve legtöbb esetben nem is lehetséges megvédeni az oxigén jelenlétében bekövetkező oxidációtól. Az előállított vas/kobalt kétfémes ötvözetanyag mágneses jellemzőit és szerkezetét ESR mérésekkel, illetve Mössbauer-spektroszkópiával vizsgálták. Megállapították, hogy a kobalt atomok véletlenszerű eloszlásban fordulnak elő a vas köbös rácsában. Az elemi összetétel függvényében várt ferromágneses rezonancia nagyságában mutatkozó különbség kisebbnek bizonyult a vártnál. Az elért eredmények kiemelkedő jelentőséggel bírnak, hiszen ezen anyagok állandó mágnesként vagy katalizátorként is felhasználhatóak.

Fázisváltó hőtároló anyagok mikrokapszulázása

Megújuló termikus energia hasznosítása céljából fázisváltó hőtároló anyagokat mikrokapszuláztak nagy hőkapacitással rendelkező anyagok (pl. paraffin, fémsók) hőátadásának növelése érdekében. N-hexadékan fázisváltó hőtárolóanyag és etil-cellulóz kapszulázó polimer alkalmazásával, mag-héj szerkezetű, jellemzően 10-200 mikrométer méretű, mikrokapszulákat állítottak elő emulziós – oldószer elpárologtatásos módszerrel. Paraffin fázisváltó hőtárolóanyagot csepegtetési (prilling) technikával, keresztkötéssel és hőkezeléssel stabilizált alginát héjba foglaltak, és jellemzően 1-2 mm nagyságú kapszulákat készítettek. Gömb alakú szervesen só (timsó) szemcséket szférikus agglomerációval állítottak elő, és vizsgálták szervesen só fázisváltó hőtároló anyag koacervációval történő mikrokapszulázását.

Proteáz szenzorok

A termelői tej minőségellenőrzési lehetőségeinek javítása modern analitikai módszerek felhasználásával volt a célja a Magyarország-Szlovákia Határon Átnyúló Együttműködési Program keretén belül futó EU finanszírozású MILKSENS kutatási projektnek. A projekt során többféle típusú proteáz érzékeny szenzort fejlesztettek ki és alkalmaztak. Szintén a proteázok detektálásához kapcsolódtak az érrendszeri károsodásokban szerepet játszó folyamatok során végbemenő heterogén fázisú enzimatis reakciók valós idejű elektrokémiai, spektrofotometriai és nagyfelbontású mikroszkópiás vizsgálatai is, amelyek segítséget nyújthatnak jobb hatékonyságú trombolitikus terápiák kifejlesztésében.

Vízoldható makrociklusok potenciális alkalmazása gyógyszerhatóanyag hordozóként

A különböző számú glikoluril egységet tartalmazó kukurbiturilok üregébe ékelődéssel növelhető a vegyületek stabilitása, oldhatósága, és szabályozható sebességű hatóanyag felszabadulás érhető el. E vízoldható, nem toxikus makrociklusok széleskörűen alkalmazhatók biokompatibilis szupramolekuláris szerkezetek alkotórészeként, vagy gyógyszerhatóanyag hordozóként. A gyakorlati szempontból legfontosabb kukurbit[7]uril (CB7) és kukurbit[8]uril (CB8) felhasználását akadályozza, hogy nem ismert, milyen sebességgel képződnek és disszociálnak szupramolekuláris komplexeik. A világon először határozták meg a CB7 és CB8 üregébe beépülés és disszociáció kinetikai paramétereit vízben. Egy rákellenes és antibakteriális hatású természetes izokinolin alkaloid, a berberin beékelődését tanulmányozták. Feltárták, hogy a makrociklus mérete miként befolyásolja a reverzibilis komplexképződési folyamatok kinetikáját és termodinamikáját. A kapott eredmények alapvető fontosságúak hatóanyagok szabályozott sebességű felszabadítására alkalmas rendszerek tervezéséhez.

Fluoreszcenciás analitikai módszerek fejlesztése

A kumarin 102 sokoldalú fluoreszcens jelzővegyület, többek között farmakokinetikai vizsgálatokban alkalmazzák modell-hatóanyagként. Meghatározták az alap- és a gerjesztett állapotú kumarin 102 protonálódási reakciójának egyensúlyi és kinetikai jellemzőit. A 3-hidroxi-flavon-alapú fluoreszcens vegyületek közül azok a legígéretesebbek, amelyeknek nukleotidok jelenlétében változnak a fluoreszcencia tulajdonságai. Ezek a vegyületeknek megfelelő körülmények között ATP-vel - a többi nukleotidhoz képest - szelektíven hatnak kölcsön. Stacionárius és időfelbontásos spektroszkópiai kísérleteket és elméleti számításokat végezve elemezték a 4'-diethylamino-3-hidroxi-flavon nukleotidkomplexeinek szerkezetét, és a közeg hatását a komplexképzés szelektivitására. A fluoreszcens próbák alkalmazása

szempontjából fontos a fotostabilitásuk ismerete. A fenti hidroxi-flavon fotostabilitását részletesen tanulmányozták. Megállapították, hogy acetonitriles oldatban fény hatására lassan oxidálódik. Azonosították a terméket, meghatározták a kinetikai jellemzőket, feltárták a reakciómechanizmust. Optikai spektroszkópiai mérések alapján jellemezték új, királis felismerésre képes heterociklusok (fluoreszcens koronaéter, foszfolén-származékok) szerkezetét és komplexképzését.

Új szervetlen nanorészecskék előállítása és széleskörű jellemzése

Szilika és amino-szilika nanorészecskéket állítottak elő, majd felületkémi karakter, méret és méreteloszlás szempontjából pontosan jellemezték azokat. Si²⁹-es tömegszámú izotópból felépülő szilika nanorészecskéket állítottak elő FFF/MALS/ICP-MS és NMR vizsgálatok céljára, amivel referencia rendszerek kidolgozását, és e rendszerek toxikológiai szempontból történő vizsgálatát alapozták meg. A kutatási eredményből jelentős gazdasági haszna származhat mind a nanokészítményeket gyártóknak, mind az egészségüggyel kapcsolatos felhasználóknak.

Cirkónium-dioxid alapú komplex nanorészecskéket készítettek, amelyek különböző felületi rétegüknek köszönhetően többféle hatóanyag molekulának a bezárására alkalmasak. A rendszerek tesztelését az állatorvosi gyakorlatban megkezdték.

Önszerveződő vezikulás rendszerek fejlesztése

A daganatos betegségek pontosabb diagnózisának felállítása érdekében új radioizotópos nyomjelzéssel ellátott vezikulás rendszereket fejlesztettek ki pozitron emissziós tomográfiai vizsgálatokhoz. Kimutatták, hogy ezek a rendszerek jól alkalmazhatóak a képalkotó laboratóriumban. A természetes eredetű extracelluláris vezikulákat elválasztották, vizsgálták a szerkezetüket, és komplex módon jellemezték azokat. A fehérje és lipid arányának meghatározására új spektroszkópiai alapú módszert fejlesztettek ki. Az eredmények a gyógyszeripar, valamint az orvos-diagnosztikával és praxissal kapcsolatos területek javát szolgálják.

CREDO, kisszögű röntgenszórás mérésére alkalmas laboratóriumi nagyberendezés

Közönséges laboratóriumi berendezésekben nem tanulmányozható, biológiai rendszerek vizsgálatának céljára - a Közép-kelet-európai Régióban páratlan - nagyberendezést terveztek és építettek fel. A berendezéssel a szinkrotron mérőállomásoknál telepített berendezéseknél elérhető magas jel/zaj aránnyal jellemezhető nagy precizitású szórásgörbék felvétele vált lehetővé. A nanorendszerekről a 0.2 nm-től 300 nm-ig terjedő széles mérettartományban nyújt szerkezeti és morfológiai információkat a berendezés.

TiWO_x - aktív szén kompozit elektrokatalizátorok fejlesztése

Szol-gél módszerekkel állítottak elő TiWO_x – aktív szén kompozit alapú elektrokatalizátorokat. Megállapították, hogy az elektrokatalitikus tulajdonságokat alapvetően a vegyes oxid szerkezete határozza meg. Röntgendiffrakciós és *in situ* XPS mérésekkel nyomon követve a szol-gél szintézis utáni hőkezelési lépések során lejátszódó változásokat, sikerült képet alkotni a katalizátor kialakulásának folyamatáról. Az eredmények alapján megállapították, hogy a homogén rutil szerkezetű vegyes oxid keletkezésének előfeltétele, hogy rutil szerkezetű kristálygócok már a magas hőmérsékletű kezelés előtt jelen legyenek. A vegyes oxid megfelelő vezetőképességét és aktivitását a volfrám rutil-kristályrácsba való

teljes körű beépülése biztosítja, ami a szol-gél szintézis végtermékének magas hőmérsékletű inert gázban végzett hőkezelésével majd hidrogénben történő gyors redukációjával érhető el.

Metanol adszorpciója módosított TiO₂ egykristály felületen

A kísérletsorozatban metanol adszorpcióját hasonlították össze teljesen oxidált, ionbombázással redukált és nikkellel módosított TiO₂ (110) felületen. Az adszorpció folyamatát és az adszorbeátumok termikus viselkedését fotoelektron-spektroszkópiai módszerekkel követték. Megállapították, hogy nincs lényeges különbség a teljesen oxidált és az ionbombázással redukált TiO₂ szobahőmérsékletű metanol-adszorpciós tulajdonságai között. Az adszorbeátumok termikus deszorpciója során nem tapasztaltak a felületi specieszek kémiai átalakulására utaló jeleket. Nikkel jelenlétében már szobahőmérsékleten megjelenik és gyorsan növekszik egy szénhidrogénekre vagy grafitos szénre utaló komponens, ami magasabb hőmérsékleten is stabil marad. Az eredmény a metoxi-csoportok bomlásával (C-O kötés felszakadásával) és a keletkező széntartalmú termékek kondenzációjával, a felület kokszosodásával magyarázható. A nikkellel enkapulációjára utaló jeleket 400°C fölött tapasztaltak.

Szuperkondenzátorok fejlesztése

„A vertikálisan rendezett szénnanocső-rétegek, mint szuperkondenzátor elektródok” c. FP7 projekt keretén belül a partnerekkel együttműködve sikeresen fejlesztettek ki egy filmtranszferen alapuló elektródkészítési eljárást. Az így kialakított szuperkondenzátor tesztcella energiasűrűsége megközelíti a kereskedelemben jelenleg kapható aktívszén-alapú szuperkondenzátorok energiasűrűségét, míg teljesítménysűrűsége egy nagyságrenddel nagyobb a kereskedelmi referencia szuperkondenzátorénál.

„A szénzövetekből kialakított szuperkondenzátorok elektrokémiai jellemzése” c. KTIA pályázat keretében szuperkondenzátor cellákat, gombelemeket állítottak össze, és tanulmányozták azok elektrokémiai tulajdonságait. Az impedancia-, ciklikus voltammetria- és galvanosztatikusság mérésekből összeállított protokoll segítségével jellemezték a rendszerek viselkedését.

Lignocellulóz hasznosítás katalitikus eljárással

A kutatás a lignocellulóz biomasszából nyerhető levulinsav (4-oxopentánsav, a továbbiakban LA) nagy hozzáadott értékű termékekké történő heterogén katalitikus átalakítására irányult. Az LA két lépésben állítható elő. Először a lignocellulózt felépítő cellulóz és hemicellulóz szénhidrát polimereket cukrokká hidrolizálják, majd a kapott hexózokat savkatalizátor jelenlétében dehidratálják. Az LA reaktív funkciók csoportjainak köszönhetően többféle reakcióban átalakítható. Konzekutív katalitikus hidrogénezési és dehidratálódási lépésekben γ -valerolaktont (GVL), illetve GVL köztiterméken keresztül ipari alapanyagokat, például poliészter komponensként hasznosítható 1,4-pentándiol (1,4-PD), illetve üzemanyagként és oldószerként használható 2-metil-tetrahidrofuránt (2-MTHF) állítottak elő. A katalizátor sajátosságainak tudatos módosításával képesek voltak a GVL hidrokonzverzióját pentánsav és pentánsav származékok képződése irányába terelni.

Az eredményeket „A megújuló energiaforrások újszerű felhasználására és korszerű energiatárolási eszközök fejlesztésére alkalmas innovatív eljárások tudományos megalapozása” című támogatott KTIA AIK 12 pályázati program részeként érték el. A megújuló energia és nyersanyagforrás lignocellulóz hasznosítása világszerte és Magyarországon is kutatási fókuszterület. Hasznos termékekké alakításának hatékony technológiája nélkül, hosszabb távon nem képzelhető el fenntartható gazdaság.

Freonhelyettesítők légkörkémiája

Meghatározták az acetyl-fluorid ($\text{CH}_3\text{C}(\text{O})\text{F}$) OH-gyökkel végbemenő gázfázisú elemi reakciójának sebességi együtthatóját a hőmérséklet függvényében, valamint megadták a fotobomlási kvantumhatásfokát is. Megállapították, hogy a fluor-szubsztitúció erős negatív induktív hatást gyakorol a reaktivitásra, és megadták a hatás mértékére jellemző csoportadditivitási együttható értékét. A fotobomlás a C–C kötés felhasadásával megy végbe, és a kvantumhatásfoka lényegesen kisebb egynél, ami a fotofizikai kioltási folyamatok jelentőségét mutatja. A kísérleti eredményekkel igen jól egyeznek az elvégzett magas szintű kvantumkémiái és elméleti reakciókinetikai számítások eredményei. Az acetyl-fluorid a HFC-161 ($\text{CH}_3\text{CH}_2\text{F}$), egy új típusú, freonhelyettesítő légkondicionáló anyag légköri lebomlása során keletkezik. Eredményeik alapján megállapították, hogy az acetyl-fluoridnak kicsi az éghajlati terhelő hatása, káros anyag keletkezése nélkül gyorsan kimosódik a légkörből, így a HFC-161 valóban környezetbarát hűtőanyagként tekinthető. A kutatási eredmény hozzájárul a környezetre kevésbé ártalmas freonhelyettesítő légkondicionáló anyag, a HFC-161 hasznosításának elterjedéséhez.

A katalitikus NO_x ártalmatlanítás elméleti alapjai

Sűrűségfüggő-elméleti számítások és metadinamikai szimulációk segítségével meghatározták az NO_3^- ionok többlépcsős ($\text{NO}_3^- \rightarrow \text{NO}_2^- \rightarrow \text{NO}^-(\text{ads}) \rightarrow \text{N}(\text{ads})$) redukcióját mind normál, mind hibahelyes pirit (FeS_2) felszínen. Feltérképezték a szabadenergia-profilokat, és azt találták, hogy az egymást követő lépésekhez egyre nagyobb aktivációs energiák tartoznak, amiket azonban a hibahelyek jelenléte csökkent.

Kvantumkémiái és kvantumdinamikai számításokkal vizsgálták a dinamikus Stark-eltolódás szerepét intenzív femtoszekundumos lézerimpulzusok indukálta rezonánsan erősített multifotonos ionizáció esetén. Sikeresen értelmezték több kisebb molekula (pl. CH_2BrI , CH_2Cl , CS_2 , CF_3I) fotofragmens-fotoelektron koincidenca-spektrumát, és igazolták direkt és indirekt ionizációs mechanizmusok együttes jelenlétét a vizsgált rendszerekben.

Könyvtári és levéltári örökségre ható környezeti tényezők szerepének értékelése termoanalitikai módszerekkel

Bőr- és pergamenminták öregedését vizsgálták termoanalitikai módszerekkel, azzal a céllal, hogy a környezeti körülményeknek a könyvtárakban és a levéltárakban őrzött írásos történelmi anyagokra gyakorolt hatását tanulmányozzák. Az öregedési folyamatok megismerésére irányuló vizsgálatokban a különböző körülmények között mesterségesen öregített bőr- és pergamenminták, mint modellek segítségével sikerült kiváltani az értékes történelmi mintákat. Azt találták, hogy az enyhe lúgos kezelés jól modellezi a történelmi minták hosszú ideig tartó öregedését. Több olyan marker vegyületet azonosítottak (pl. aromás vegyületek, szén-dioxid), amelyek megjelennek mind a természetesen öregedő, mind a mesterségesen öregített mintákban. Megállapították továbbá, hogy az erősen öregedett történelmi minták hőbomlásának maximális sebessége (DTG_{max}) jóval kisebb, mint a friss bőr- és pergamenmintáké, tehát ez a paraméter is jól jelzi az öregedés előrehaladtát.

A PVC környezetileg előnyös módosításai

A poli(vinil-klorid) (PVC) rendkívül széleskörűen használt polimer. Ez azért lehetséges, mert tulajdonságai a különböző adalékanyagok segítségével széles intervallumban változtathatók. Az antioxidánsok a polimerek öregedését, oxidációját gátolják meg, így növelik a termék élettartamát. Napjainkban a polimer kémia területén is egyre inkább a környezetbarát

megoldásokra törekszenek, és kezdik felfedezni a természetes antioxidánsokat, mint polimer adalékanyagokat. Kutatásaik során egy természetes anyag, a kurkumin antioxidáns hatását vizsgálták a PVC degradációjára. A kereskedelmi forgalomban árult 2,6-di-terc-butil-4-metilfenollal (BHT) és a pentaeritritol-tetrakis(3-3,5-di-terc-butil-4-hidroxifenol)propionáttal (Irganox 1010) összevetve, a kurkumin hasonlóan hatékonyan bizonyult. A PVC alkalmazásának egy környezetileg előnyös területén korábban már igazolták, hogy a PVC-t termooxidatív kezelés során átalakítva elegyíthetővé vált a biodegradálható és biokompatibilis politejsavval. Megállapították, hogy a politejsav nem befolyásolja a PVC termooxidatív degradációját, vagyis akár a PVC módosítása és a politejsavval történő elegyítése is megvalósíthatóvá válik egyidejűleg.

A rangszámkülönbségek összegén alapuló eljárás (SRD) továbbfejlesztése

A rangszámkülönbségek (abszolút értékének) összegén alapuló eljárás (SRD) alkalmazási területe interdiszciplináris, a legkülönbözőbb problémák megoldására lehet használni, így kromatográfiás oszlopválasztás, laboratóriumok értékelése, mintavételi helyek kiválasztása, QSAR, QSRR modellek rangsorolása, kemometriai módszerek összehasonlítása, logP számítási módszerek, stb. Az eljárás nemcsak rangsorolásra, hanem csoportosításra, mintázat felismerésre is alkalmazható; statisztikailag korrekt próbákkal a csoportok közötti különbségről eldönthető, hogy szignifikáns-e.

Az eljárás (SRD) összekapcsolása ANOVÁ-val optimalizálási feladatok megoldására is lehetőséget ad (multicriteria optimization), ez pedig kísérlettervezés esetén, ipari problémák megoldásában jelentős költségcsökkentést tesz lehetővé. A környezetvédelemben alapvető fontosságú pl. a dízelolajok degradációjának megoldása. Az előző pontban említett módszerrel sikerült az optimális körülményeket kiválasztani. Az Árpád-kori ezüst pénzérmék elemösszetételének kemometriai módszerekkel történő értékelése egy sor összefüggésre is rávilágított, az érmék hasonlóságai és a csoportok közötti összefüggések feltárása nemcsak a történettudomány számára szolgáltatott érdekes adalékokat és bizonyítékokat, hanem a csoporton belüli alcsoportok feltárásának módszerével a kemometria tudománynak is.

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. Ismeretterjesztő programjaikkal a legfiatalabbaktól az idősekig minden korosztály számára betekintést engednek a tudomány világába. Középiskolások tehetséggondozását és pályaválasztását segítik.

Az intézet szervezte meg az MTA Természettudományi Kutatóközpont első „Kutatók Éjszakája” rendezvényét. A „fény” jegyében összeállított programon az új látványosi kutatóház 9 helyszínén, 30 foglalkozáson vehetett részt a több mint 800 regisztrált látogató. A várakozásokon felüli érdeklődést vonzó ismeretterjesztő előadásokon, látványos kísérleteken, koncerteken a kutatóközpont munkatársai bemutatták, hogy a kémia, a biológia és a pszichológia tudományterületein miképpen lehet a kutatás tárgya vagy eszköze a fény. Például a „Röntgenfény a nanoanyagokról”; „A fénymikroszkóptól a pásztázó tűszondás mikroszkópokig”; „A világító molekulák és a differenciálegyenletek szelleme”; „Túl a fényen és Világító nanoanyagok” című előadásokat tartottak az intézet munkatársai. Az intézet két laboratóriumát is meglátogathatták az érdeklődők, akik többféle mikroszkópot működtethettek. A legifjabb korosztály tagjai pedig a „Tudományos gyermekmegőrző”-ben játékosan ismerkedhettek a természettudományok alapjaival.

A Magyar Tudomány Ünnepehez csatlakozva a kutatóközpont rendezvényén a „Nano ma és holnap” szekcióban előadást tartottak a következő témákban: „A CREDO berendezés kivételes előnyei a gyógyászati felhasználású nanorészecskék szerkezeti jellemzésében”; „Nanopórusos szilikátok katalitikus és biológiai alkalmazása”; „Ultranagy-felbontású elektronmikroszkópia szerepe a nanogyémántok szerkezetének vizsgálatában”.

A középiskolás diákok részére szervezett programok célja a pályaválasztás segítése és a tehetséggondozás mellett a kutatói utánpótlás nevelése. 2014-ben hatodik alkalommal szervezte meg az intézet az „AKI Kíváncsi Kémikus” kutatótábort 27 tehetséges középiskolás részére. A diákok tizenhárom téma kutatásába kapcsolódhattak be, melyek közül kilencet az intézet munkatársai irányítottak. Ezek a következők voltak: „Hogyan épül fel a sejtmembrán?”; „Liposzómás gyógyszerhordozó rendszerek”; „A világító molekulák világa”; „Nanotechnológia”; „Fotokatalízis”; „Biokarbonsavak átalakítása hasznos vegyi anyagokká”; „Óriásmolekulák – a széleskörű lehetőségek világa”; „Rétegszilikát polimer nanokompozitok”; „Keményítő alapú polimerek”.

A Nők a Tudományban Egyesület kezdeményezésére 2014 áprilisában rendezték meg a Lányok Napját. Az intézetbe látogató diáklányok a jövő nehézvegyiparának alapanyagáról, a növényi eredetű biomasszáról és a fotokatalízisről hallhattak előadást és nézhettek meg laborbemutatót. 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.

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

Középiskolásoknak szóló programok keretében a székesfehérvári Teleki Blanka Gimnázium természettudományos szakköre számára nanotechnológiáról tartottak előadást, míg a tatai Eötvös József Gimnázium kémia fakultációs diákjai meglátogatták az intézetet, akik a műanyagok pirolitikus újrahasznosításával kapcsolatos interaktív laboratóriumi bemutatón vettek részt.

A múzeumkerti Tudományfesztivál több ezer diákot vonzott. Az intézet munkatársai a „Tüzelőanyag-cellák szerepe a megújuló energiák hasznosításában” és a „Megújuló energiaforrásból megújuló energiahordozó” címmel tartottak nagy érdeklődést kiváltó előadásokat, ezen kívül egy interaktív maketten bemutatták a tüzelőanyag-cellák működését.

Az intézet munkatársa kutató szakemberként részt vett a Tudásfeltöltés 2.0 tudományvizualizációs diákvetélkedő zsűrijének munkájában.

A legkisebbek, az óvodások és kisiskolások Kémcső Jenő és Spatula Sára kalandjainak részesei lehettek. Az intézet munkatársai tíz kémiai foglalkozást tartottak iskolákban, óvodákban, művelődési házakban és táborokban. A kutatóközpont munkatársainak gyermekei és unokái részére Mikulás műsorral egybekötött játékos „KÉMIKULÁS” kémiaórát tartottak az intézet fiatal kutatói.

Az intézet egyik munkatársa működteti a „Nanopaprika” tudományos közösségi hálózatot. Erről a tevékenységről „Tudományos közösségi hálózatok a nanotechnológia kutatóinak” címmel tartott meghívott előadást a Madeirai Egyetem Kémiai Intézetének 10. évfordulóján szervezett konferenciasorozaton.

A társadalom legszélesebb köréhez jutott el az a beszélgetés, amit az intézet munkatársával folytattak az Ózonnetwork televízió 2014. június 26-i adásában a hidrogén gazdaságról és a tüzelőanyag-cellákról (<http://videa.hu/videoek/nagyvilag/2014.06.26.-hidrogengazdasag-S21NepsCy9IS45yO>). A HVG EXTRA Jövő (2014/2) című kiadványában „Nanotechnológia a rendelőben” címmel az intézet munkatársának tollából ismeretterjesztő cikk jelent meg a nanotechnológia orvosi alkalmazásairól.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2014-ben

Hazai kapcsolatok

Az intézet hazai kapcsolatrendszeréhez az MTA kutatóhálózatának intézetei, közülük is elsősorban az MTA TTK intézetei, az egyetemek, egyéb intézmények és vállalatok tartoznak. A kutatóközpont Lágymányosra költözésével az Eötvös Loránd Tudományegyetem (ELTE) és a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem (BME) kampuszának közelsége révén könnyebbé vált a közös kutatómunka és a kutatók részvétele az egyetemi oktatásban. Az egyetemi hallgatók is élnek a lehetőséggel, hogy percek alatt átjutnak egyik intézményből a másikba, és nagyobb számban készítik az intézetben diákköri- és diplomamunkáikat.

Az ELTE-vel és a BME-vel az együttműködés szervezeti kereteit közös laboratóriumok adják. Az intézet Polimer Fizikai Kutatócsoportja a BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék közös szervezeti egysége, az ELTE Kémiai Intézetével pedig közösen üzemeltetik az ELTE Kémiai Épületében lévő Lézerspektroszkópiai Laboratóriumot.

Ezen kívül az ELTE-MTA Peptidkémiai Kutatócsoportjával együttműködnek a „Biomimetikus nanoszenzorok alkalmazása proteolitikus folyamatok követésére” c. OTKA projektben, valamint az intézet „Tejipari termékek újszerű minőségi vizsgálata” c. Magyarország-Szlovákia Határon Átnyúló Programjában.

A BME-vel közös OTKA pályázatban fluoreszcens szenzorvegyületeket fejlesztenek biomolekulák felismerésére. Az Energetikai Gépek és Rendszerek Tanszékkel a γ -valerolakton, mint potenciális bioüzemanyag motorikus vizsgálatát folytatták szikragyújtásos motorban.

Az intézet intenzív kapcsolatokat tart fent más hazai egyetemekkel is. Munkatársai a fentebb említett két egyetemen kívül oktatnak a Pannon- (PE), az Óbudai- és a Semmelweis Egyetemen (SOTE), ezen kívül közös kutatásokban is részt vesznek.

A PE Műszaki Informatikai Karának Műszaki Kémiai Intézetével közös professzori laboratóriumot működtetnek. A PE szerves kémikusaival folytatott együttműködés keretében elméleti kémiai módszerekkel megmutatták, hogy milyen tényezők határozzák meg a kísérletileg előállított sztereoszelektív katalizátorok szerkezetét és katalitikus aktivitását.

A SOTE-val kötött kutatási és oktatási együttműködés keretében orvosbiológiai szempontból is fontos gyógynövények kivonatainak elemtartalmait határozták meg. Eredményeik a speciál kollégiumi és a PhD képzésen keresztül közvetlenül beépülnek az oktatási anyagba. A SOTE Orvosi Biokémiai Intézet Hemosztázis Kutató Részlege az intézet „Biomimetikus nanoszenzorok alkalmazása proteolitikus folyamatok követésére” c. OTKA pályázatához enzimatis folyamatok vizsgálatával és in-vitro kísérletek előkészítésével járul hozzá. A SOTE-val közös másik OTKA pályázat keretében a „Fibrinolízis a gyulladás és atherosclerosis határterületén” témájú munkát folytatják.

Az Óbudai Egyetem PhD hallgatói intézeti témavezetéssel speciális foszfonsavakból önszerveződő nanorétegeket készítettek, és vizsgálták antikorróziós tulajdonságaikat, valamint természetes hidroxidikarbonsavak ciklodextrinnel kombinált poliésztereit állították elő, amelyek patogén baktériumok szaporodására gyakorolt hatását önmagukban és más komonomerekkel kombinálva vizsgálták.

Szent István Egyetemmel közös OTKA pályázatban atmoszférikus hidegplazma eljárással kezelt polimer felületek adhéziós és tribológiai tulajdonságait tanulmányozzák.

A Miskolci Egyetemmel együttműködve ásványi nyersanyagok elemösszetételét határozzák meg.

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

Az intézet a következő témákban működik együtt az SZKI-val: bioszenzor fejlesztés, kétmagvú Au(I) komplexek spektroszkópiai vizsgálata, királis szintézis- és elválasztási módszerek fejlesztése, polimerek jellemzése NMR módszerrel, reakcióutak felderítése, a humán epesavkötő fehérje szállító és célbajuttató funkciójának felderítése. A KPI-vel a következő területeken folyik közös munka: gyógyszerhatóanyag hordozóként alkalmazható vízdoldható makrociklusos vegyületek, sokcsatornás agyi elektródák fejlesztése. Ez utóbbi témában az MFA is közreműködik. További közösen művelt témák az MFA-val: biológiai határfelületi vizsgálatok és kémiailag szelektív gáz/gőzérzékelők kutatása. Az EI-vel és a KPI-vel preparált fehérjék szerkezetét határozzák meg, molekuláris sejtbiológiai folyamatokat értelmeznek.

Az intézet archeometriai kutatásainak sorában a Szépművészeti Múzeum részére antik márványszobrokat, a Magyar Nemzeti Múzeum, a Nemzeti Örökségvédelmi Központ megbízásából pedig ókori kerámia leleteket elemeztek ICP-OES és XRF technikákkal.

Az intézet kutatói nagy számban vesznek részt az MTA bizottságainak, munkabizottságainak és más tudományos testületeknek, valamint folyóiratok szerkesztőbizottságainak munkájában. Mintegy húsz magyarországi és számos külföldi kis- és középvállalat megbízásából az intézet kutatási és fejlesztési feladatokat, méréseket végzett. Nyolc nagyvállalattal - melyek közül öt külföldi, ill. multinacionális - áll kapcsolatban az intézet. A tőlük kapott feladatok jellemzően nagyobb volumenűek és gyakran egyben tudományos igényűek is. Az eredmények az anyagi bevétel mellett esetenként közös publikációkban vagy szabadalmakban mérhetők.

A következő hazai ipari partnerekkel dolgoztak együtt tudományos igényű projekteken:

A TVK Nyrt-vel közös munka poliolefinok szerkezet-tulajdonság összefüggéseinek feltárása és tulajdonságainak módosítása.

A PETABYTE Nonprofit Kft. megbízásából azt tanulmányozták, hogy hidegplazmás technológia alkalmazható-e szennyezett levegő tisztítására.

KwakLab Kutatóintézet Nonprofit Kft. megbízásából szennyezett levegő tisztítására használható katalizátorokat vizsgáltak, 15 katalizátor fizikai-kémiai jellemzésére került sor.

Az Inno-Comp Kft-vel kötött együttműködési szerződés keretében speciális göcképzőt tartalmazó nagy ütésállóságú random iPP kopolimer típust fejlesztettek ki.

Nemzetközi kapcsolatok

Az USA-beli Pacific Northwest National Laboratory (Richland, WA) kutatóival közösen zeolit alapú katalizátorokat vizsgálnak, NO szelektív redukciójában.

Az Európai Unió által finanszírozott regionális együttműködés keretében a CNR Plazmatechnológiai Intézettel (Potenza, Olaszország) módszert fejlesztettek ki megfelelő méretű, homogén ezüst nanorészecskék előállítására vizes oldatban folyadék lézer ablációs eljárással.

Gyümölcsöző együttműködésben a Bolgár Tudományos Akadémia kutatóival új típusú nanopórusos szilikátok alkalmazhatóságát tanulmányozták gyógyszer hatóanyag hordozó rendszerként és katalitikus célokra.

A HFC-161 (C₂H₅F) hűtőanyag légkörkémiáját tanulmányozták a Wuhan Egyetem (Kínai Népköztársaság) elméleti kémikusaival közösen. Az együttműködésben a magyar kutatók reakciókinetikai és fotokémiai kísérleteket végeztek.

Az OH-gyök és gyűrűs éterek reakcióit kutatták partnerségben a Karlsruhei Műszaki Egyetem (Németország) munkatársaival.

Molekuladinamika és ionizáció szabályozása erős ultrarövid lézerimpulzusokkal a témája az intézet és a Bécsi Egyetem (Ausztria) valamint a Stony Brook Egyetem (New York, USA) több publikációban megnyilvánuló együttműködésének.

A Milan Bicocca Egyetem (Milánó, Olaszország) kutatóival közösen az NO_3^- ionok többlépcsős redukcióját vizsgálták mind normál, mind hibahelyes pirit felszínen sűrűségfüggvény-elméleti számítások és metadinamikai szimulációk segítségével.

TÉT együttműködés keretében szerves sók és alkoholok reverzibilis reakcióit tanulmányozták a Leuphana Egyetem (Lüneburg, Németország) munkatársaival.

A Clariant Produkte GmbH-val (Heufeld, Németország) kötött kutatási szerződés keretében etilénre történő oxidatív dehidrogénezéséhez különböző adatelemzési módszerek segítségével keresték az ODH katalizátorok optimális összetételét.

Biomassza anyagok optimális hasznosítását megalapozó vizsgálatok folytak a trondheimi Norwegian University of Science and Technology (Norvégia) munkatársaival közösen. Feltárták a részlegesen elszenesített fa széndioxiddal történő elgázosításának sajátosságait.

A Stockholm University (Svédország) kezdeményezésére új típusú nanorendszerek szerkezetét jellemezték, atomi szinten tanulmányozták a nanorendszerek és fehérjék, lipidek, valamint környezeti molekulák kölcsönhatását.

A müncheni Műszaki Egyetem (Németország) kutatóival közösen nanorendszerek szerkezetét vizsgálták spektroszkópiai módszerekkel.

Kereskedelmi forgalomban kapható szilika nanorészecskék felületét módosították. Elsőként állítottak elő 29-Si dúsított szilika nanorészecskéket. A munkát az LGC Ltd (Teddington, Nagy-Britannia) megbízásából végezték.

MTA-CNRS együttműködés keretében molekulák önszerveződésével szabályozható nanorendszereket állítottak elő. Partnerintézmény az East Paris Institute of Chemistry and Materials Science (Franciaország).

Együttműködésben az Academic Medical Center, University of Amsterdam (Hollandia) munkatársaival elsőként határozták meg erythrocyta eredetű extracelluláris vezikulák méretét kisszögű röntgenszórással.

Az Európai Regionális Alap Magyar-Szlovák Határon Átnyúló Együttműködési Program keretében gyakorlati és tudományos szempontból is értékes együttműködésben a Comenius University in Bratislava (Szlovákia) kutatóival modern bioanalitikai eszközöket használtak tejipari termékek újszerű minőségi vizsgálatára.

Bar-Ilan Egyetem Kémiai Tanszék (Ramat Gan, Izrael) munkatársaival közösen üzemanyagcellák elektródjainál alkalmazható, Ni, Ni-Pd és Ni-Pt vékonyrétegeket alakítottak ki, és jellemezték azokat.

Már a második EU-projektben partnerük a drezdai Fraunhofer Institute for Material and Beam Technology (Németország), amelynek keretében a partner által előállított szuperkondenzátorokat vizsgálják az intézetben.

MÖB-DAAD együttműködés keretében az University of Ulm (Németország) kutatóival közösen az elektrokémiai kettősréteg természetét tanulmányozták ionos folyadékokban.

Akadémiák közötti kétoldalú együttműködés biztosította a támogatást a „Töltésátlépés egyedi molekulákon keresztül, a redoxi-mechanizmustól a molekulák elektromos vezetőségig” című projekt műveléséhez. Partnerintézmény: J. Heyrovsky Fizikai-kémiai Intézet (Prága, Cseh Köztársaság)

A Berni Egyetem (Svájc) kutatóival közösen kifejlesztett molekuláris elektronika mérés-technika segítségével lehetővé vált egyedi molekulák vezetőképességének nagy érzékenységű mérése.

A genovai Marine Science Intézet (Olaszország) munkatársaival nanoréteg-készítés és jellemzés témában működnek együtt.

Új, „zöld” korróziós inhibitorok fejlesztése: alkil-hidroxámsavak adszorpciójának és inhibíciós hatásának tanulmányozása réz és vas korróziójára a témája annak a TÉT egyezménynek, amit a Mohammed V Egyetemmel (Marokkó) kötöttek.

A líbiai Petroleum Institute-tal kötött megállapodás keretében az intézet munkatársai egyéves kurzust tartottak, aminek a témája az olaj- és gáziparban használatos vegyi anyagok voltak.

Az intézet munkatársai meghatározták a telítetlen csoportoknak a polietilén fény- és termikus oxidációjában betöltött szerepét. Partner intézmények: Clermont Université (Clermont-Ferrand, Franciaország) és Tiszai Vegyi Kombinát Nyrt.

Polietilén csövek viselkedését tanulmányozták extraktív körülmények között a Clariant Produkte (Svájc) és a TVK Nyrt. közreműködésével.

Új generációs szálerősítésű PP kompozitokat fejlesztettek ki. Megállapították, hogy a heterofázisos PP kopolimer tulajdonságait a polimer láncszerkezete befolyásolja, az elasztomer fázishoz köthető deformációs folyamatok a kopolimer összetételével szabályozhatóak. Együttműködő partnerintézmény a Borealis Polyolefine GmbH (Linz, Ausztria).

A University of Liege (Belgium) kutatóival rétegszilikát nanokompozitok deformációs mechanizmusát derítették fel.

Korszerű, környezetre ártalmatlan polimerek előállításával foglalkoztak a Szlovák Tudományos Akadémia Polimer Intézetével (Pozsony) közösen. Több új makromolekuláris adalékot állítottak elő, és sikeresen tesztelték azokat.

Gyümölcsöző együttműködésben a Poznani Műszaki Egyetem (Lengyelország) munkatársaival hibrid nanorendszereket jellemeztek inverz gázkromatográfiás és kemometriai módszerekkel.

Ugyancsak kemometriai módszereket használtak analitikai eljárások összehasonlítására a Belgrádi Egyetem (Szerbia) kutatóival közös munkában.

Három jelentős nemzetközi konferencia szervezésével járultak hozzá az intézet külkapcsolataihoz. Az MTA TTK épülete adott otthont az „International Conference on Bio-Friendly Polymers and Polymer Additives: from Scientific Aspects to Processing and Applications” konferenciának.

Szegeden rendezték a Royal Society of Chemistry égisze alatt kétévenként tartott konferenciasorozat részeként a „24. International Symposium of Gas Kinetics and Related Phenomena” c. konferenciát, melyen mintegy 110 külföldi és 20 hazai reakciókinetikus vett részt.

A BME Fizikai és Anyagtudományi Tanszékével közösen második alkalommal rendezték meg a „Bio-based Polymers and Composites” nemzetközi konferenciát, melyen több mint kétszázan vettek részt.

IV. A 2014-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Intézeti témavezetéssel nyertek el két OTKA pályázatot: a „Nanoszerkezetű polimer kotérhálók és gélek mint nanoreaktorok újszerű nanohibridek előállítására” című K 112094 jelű és a „Frekvenciafüggő kettősréteg-kapacitások” c. K 112034 jelű OTKA pályázat. Pályázatokat 2015-ben tudják megkezdeni.

2014 szeptemberétől dolgoznak a „Biopolimerek módosítása és funkcionálizálása” c. OKTA PD 112489 pályázaton. A pályázat kezdetétől eltelt idő alatt vizsgálták a biopolimerek természetes erősítőanyaggal készített kompozitjait, céljuk a szerkezet és tulajdonság közötti összefüggések, valamint a deformációs folyamatok felderítése volt. A természetes erősítőanyagok, mint például a faliszt tulajdonságait kémiai úton módosították. A kémiai módosítás megváltoztatta a társítóanyag és a biopolimer közötti kölcsönhatást, de befolyásolta a szerkezetét és így tulajdonságait is.

A gödöllői Szent István Egyetem témavezetésével veszi kezdetét az az OTKA pályázat, aminek témája atmoszférikus hidegplazma eljárással kezelt polimer-felületek adhéziós és tribológiai tulajdonságainak vizsgálata. Pályázat megkezdése 2015. január 1.

A Semmelweis Egyetem a témavezetője a „Fibrinolízis a gyulladás és atherosclerosis határterületén” c. OTKA pályázatnak, ami szintén 2015. január 1-én indul.

V. A 2014-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Demeter A: First Steps in Photophysics: I. Fluorescence Yield and Radiative Rate Coefficient of 9,10-Bis(phenylethynyl)anthracene in Paraffins. *J Phys Chem A*, 118 (43):9985–9993 (2014) <http://real.mtak.hu/18179/>
2. Firkala T, Forizs B, Drotar E, Tompos A, Toth AL, Varga-Josepovits K et al (3): Influence of the support crystal structure of WO₃/Au catalysts in CO oxidation. *Catalysis Letters*, 144 (5):831-836 (2014) <http://real.mtak.hu/16964/>
3. Hessz D, Hégely B, Kállay M, Vidoczy T, Kubinyi M: Solvation and protonation of Coumarin 102 in aqueous media: A fluorescence spectroscopic and theoretical study. *J Phys Chem A*, 118:5238-5247(2014) <http://real.mtak.hu/14257/>
4. Imre B, Renner K, Pukánszky B: Interactions, structure and properties in poly(lactic acid)/thermoplastic polymer blends. *Express Polym Lett*, 8(1):2-14 (2014) <http://real.mtak.hu/8446/>
5. Lónyi F, Solt HE, Pászti Z, Valyon J: Mechanism of NO SCR by methane over Co,H-ZSM-5 and Co,H-mordenite catalysts. *Appl Catal B: Environ*, 150-151:218-229 (2014) <http://real.mtak.hu/11398/>
6. Mestl G, Margitfalvi JL, Végvári L, Szijiártó GP, Tompos A: Combinatorial design and preparation of transition metal doped MoVTe catalysts for oxidation of propane to acrylic acid. *Applied Catalysis A – General*, 474:3-9 (2014) <http://real.mtak.hu/8575/>
7. Miskolczy Z, Biczók L: Sequential inclusion of two berberine cations in cucurbit[8]uril cavity: Kinetic and thermodynamic studies. *Phys Chem Chem Phys*, 16:20147-20156 (2014) <http://real.mtak.hu/15148/>
8. Németh P, Garvie LAJ, Aoki T, Dubrovinskaia N, Dubrovinsky L, Buseck PR: Lonsdaleite is faulted and twinned cubic diamond and does not exist as a discrete material. *Nat Commun*, 5 Article Number 5447 (2014) <http://real.mtak.hu/19878/>
9. Románszki L, Datsenko I, May Z, Telegdi J, Nyikos L, Sand W: Polystyrene films as barrier layers for corrosion protection of copper and copper alloys. *Bioelectrochemistry*, 97:7-14 (2014) <http://real.mtak.hu/11435/>
10. Shubhra QTH, Tóth J, Gyenis J, Feczko T: Poloxamers for surface modification of hydrophobic drug carriers and their effects on drug delivery. *Polym Rev*, 54:112-138 (2014) <http://real.mtak.hu/12813/>
11. Szanka A, Szarka Gy, Iván B: Poly(methyl methacrylate-co-2-hydroxyethyl methacrylate) four-arm star functional copolymers by quasilinging ATRP: equivalent synthetic routes by protected and nonprotected HEMA comonomers. *Journal of Macromolecular Science - Pure and Applied Chemistry*, 51:125-133 (2014) <http://real.mtak.hu/11351/>
12. Wacha A, Varga Z, Bóta A: CREDO: A new general-purpose laboratory instrument for small-angle x-ray scattering. *Journal of Applied Crystallography*, 47 (60-67):1749-1754 (2014) <http://real.mtak.hu/17335/>

MTA TERMÉSZETTUDOMÁNYI KUTATÓKÖZPONT
ENZIMOLÓGIAI INTÉZET

1117 Budapest, Magyar tudósok körútja 2; 1519 Budapest, Pf. 286.
telefon: (1) 382 6700
e-mail: buday.laszlo@ttk.mta.hu; honlap: www.ttk.mta.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2014-ben

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 fiziológiás és patofiziológiás folyamatok sejt és molekula szintű értelmezését, másrészt a szerkezeti biológia mellett folyamatosan bővül a kutatási tevékenység a komplex biológiai folyamatok megértését célzó rendszerbiológia irányába a proteomika és a bioinformatika lehetőségeinek kihasználásával. Így többek között vizsgálja a sejtekben zajló jelátviteli utakat, a rendezetlen fehérjék működését, a komplementrendszer aktiválódási mechanizmusait molekulaszervezeti alapon, a daganatos és neurodegeneratív betegségek kialakulásához vezető egyes folyamatokat, a transzmembrán fehérjék szerepét, valamint a DNS hibajavításban szerepet játszó enzimeket.

Az intézet fontos feladatának tekinti a nemzetközileg beágyazott alapkutatás mellett az oktatást. A munkatársak négy egyetemen tartanak előadásokat és gyakorlatokat mind az alapképzésben, mind a posztgraduális oktatásban. Az intézet ezzel egy időben hetven doktoranduszhallgató oktatását is ellátja, akik munkája nagymértékben hozzájárul az intézet eredményeihez.

Az intézet alapkutatási eredményeinek hasznosítására együttműködések jöttek és jönnek létre különböző kis- és nagyvállalatokkal. 2014-ben az intézet aktívan kooperált a Richter Gedeon Nyrt-vel, és szoros kapcsolatokat alakított ki számos kisvállalattal is (Vichem Chemie Kutató Kft., Targetex Kft., Femtonics, Applied Cell Technology Kft. stb.). Fontos feladatnak tekinti a magyar tudomány eredményeinek nemzetközi szinten történő képviseletét, amit nemzetközi pályázatok résztvevőiként és nemzetközi szervezetekben viselt tisztségek útján valósít meg.

II. A 2014-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

A *Jelátviteli és Funkcionális Genomika Kutatócsoport* 2014-ben tovább folytatta a megkezdett sikeres kísérleteket. A munkacsoport egyik része – *jelátvitel* – alapvetően két ún. állványfehérje családot vizsgál, ezek a Caskin és a Tks fehérjecsaládok. Rekombináns technikával előállítottak számos SH3 domént, ill. az ezek foszforilációjára képes tirozin kinázt. Az *in vitro* foszforilációt követően beállították a foszforilált SH3 domének HPLC-alapú kromatográfiás elválasztását. Jelenleg vizsgálják, hogy a fehérjefoszforiláció hogyan befolyásolja a partner prolin-gazdag peptidek kötődését. 2013-ban az általuk létrehozott Tks4 génhíányos egerből mesenchimális őssejteket izoláltak. Kimutatták, hogy a Tks4 génhíányos egerek őssejtjei nem, illetve rosszul képesek csont- és zsírszövet irányába differenciálódni. 2014-ben tovább jellemezték a Tks4 génhíányos egeret. A munkacsoport másik része – *funkcionális genomika* – a miosztatin fehérjével foglalkozott. A miosztatin növekedési faktor az izom- és zsírszövet szabályozása révén fontos szerepet játszik az izomerő fenntartásában. A K153R a leggyakoribb természetes miosztatin variáns. Különböző vizsgálatok során összefüggést találtak a kisebb izomerő, elhízásra való hajlam, fiatalabb korban jelentkező

szarkopénia és az R153 allél jelenléte között, extrém idős embereken végzett polimorfizmus vizsgálatok pedig azt mutatták, hogy a százévesek között az R153 allél szignifikánsan gyakoribb, mint a kontrollcsoportban. A munkacsoport kutatói előállították a vad típusú és a K153R mutáns miosztatin fehérjét, és megvizsgálták a mutáció hatását a miosztatin proteolitikus aktiválási folyamataira. Kimutatták, hogy a mutáció jelentősen meggyorsítja a promiosztatin furin által történő hasítását, így a fokozott miosztatin aktiválódás magyarázatot ad arra, hogy a K153R variánst hordozó egyéneknél miért csökken az izomerő és miért mutatnak elhízásra való hajlamot.

A *Lizofoszfolipid Receptor Kutatócsoport* meghatározta a kalmodulin-szfingozin komplex kristályszerkezetét, a kötődés paramétereit és a sfingozin-gátlás mechanizmusát a kalmodulin-függő enzimekre *in vitro*. Hazai együttműködésben (Simmelweis Egyetem) bizonyították a sfingozin gátlást a kalmodulin függő endoteliális NOS aktivitásra *ex vivo*. Klónozták és jellemezték a Pf-kalmodulint a malária kórokozójából. Nemzetközi együttműködésben (IMIM Hospital del Mar, Barcelona) azonosították a „MalariaBox” vegyületeiből a Pf- és humán-kalmodulin gátlószereit. Kvarckristály-mikromérleg, izotermális titrációs kalorimetria és fluoreszcens technikával jellemezték az EPAC1 DEP-domén, a gelsolin, Akt1, Grp1 és Nck1 PH-doménjeinek, a Caskin1, Abi2 és Grb2 SH3-domének, valamint az Nck1 SH2-domén lipiddkötésének mechanizmusát. Kvarckristály-mikromérleg technikával házon belüli együttműködésekben jellemezték a dUTPáz-Stl, valamint a flagelláris exportrendszer egyes fehérjeinek a kölcsönhatásait.

A *Sejtarchitektúra Kutatócsoport* korábban megmutatta, hogy a Zn^{2+} -kation elősegíti a TPPP/p25 dimerizációját, ami növeli a fehérje tubulint polimerizáltató hatását, a mikrotubulusok képződését. 2014-ben megmutatták, hogy a hatás sejtekben (CHO10 és CG-4 sejtek) is megnyilvánul, megemelkedik a TPPP/p25-szintje és kiterjedten dekorálja a mikrotubulusokat. A jelenség azzal magyarázható, hogy a Zn hatására bekövetkező konformációváltozás megvédi az eredetileg rendezetlen TPPP/p25-nek a proteaszóma rendszer általi lebontását. A hatás Zn^{2+} -kationra specifikus. A HDAC6 és SIRT2 hisztoneacetilázok befolyásolják a mikrotubuláris hálózat dinamikáját deacetiláz aktivitásuk révén. Korábban megmutatták, hogy a TPPP/p25 növeli a tubulinacetiláció mértékét, azáltal, hogy a HDAC6-hoz kötődve, gátolja azt. Most a deacetiláz inhibitorként ismert Trichostatin A (TSA) és AGK2 koncentrációfüggő hatását vizsgálták különböző rendszerekben. HeLa és CG-4 sejtekben a TSA jóval nagyobb gátló hatást mutatott, mint az AGK2. *In situ* farmakokinetikai mérések során passzív diffúziót, illetve szekrécióval kapcsolt diffúziót azonosítottak a két vegyületnél.

A *Membrán Fehérje Lendület Kutatócsoport* a Lendület pályázatban meghatározott kutatási terv utolsó szakaszában vizsgálta a klinikai drogrezisztencia hátterében húzódo molekuláris mechanizmusokat. Az ERC-pályázat kiegészítő támogatásával kiépített HTS-labor befejezte az MDR-szelektív vegyületek szkrínelését. Az öt éves kutatási folyamat eredeti célkitűzéseinek megfelelően sikerült olyan molekulákat azonosítaniuk, melyek mintegy 100-szor toxikusabbak, és 15-ször nagyobb szelektivitást mutatnak az eredeti vegyületeknél. A TTK-n belüli együttműködések keretében elemezték a legígéretesebb molekulák *in vitro* farmakológiai tulajdonságait, valamint az arra alkalmas vegyületeket formulálták és *in vivo* modellekben tesztelték. A Szegedi Tudományegyetemmel és az MTA TTK Szerves Kémiai Intézetével közösen új molekulákat szintetizáltak, a megismert szerkezet-hatás összefüggések felhasználásával. Megkezdték a Lendület pályázat keretében született hatásos molekulák szabadalmaztatását. Vizsgálták az MDR-szelektív molekulák hatását magyarázó keláció hátterét. Tanulmányozták az ABCB6 szerkezet-funkció összefüggéseit, valamint genotípus-

fenotípus összefüggéseit. A csoport tematikai bővülésének keretében megkezdték a daganatos és gyulladásoz folyamatokban szerepet játszó Organikus Anion Transzporterek jellemzését.

A *Fehérjeszerkezet Kutatócsoportnak* két hatóanyag-tervezéssel, egy szerkezetbecsléssel kapcsolatos és egy rendszerbiológiai cikke, valamint egy rendezetlen fehérjéről szóló könyvfejezete jelent meg 2014-ben.

A *Genom Stabilitás Lendület Kutatócsoport* 2014-es kutatásainak fő vonala a DNS-károsodás és a DNS-javító folyamatok hatásának vizsgálata az egész genom szintjén. A genomikai vizsgálatokhoz megalapoztak egy sejttenyészetes kísérleti rendszert, melyben egysejtből származó klónok teljes genomiális szekvenciájának meghatározásával pontos képet alkotnak egy adott DNS-károsító kezelés hatásáról. Emellett a DNS-javító folyamatok génjeinek kiütésével okozatlag meghatározhatják az adott mechanizmus szerepét a genomstabilitásban. A projektben idén a következő eredményeket érték el. Elsőként meghatározták a kísérleti csirke DT40 sejt vonal genomiális szekvenciáját a legmodernebb szekvenálási technológiával, és megmutatták, hogy tulajdonságai alkalmassá teszik kísérleti modellnek. Ezen eredmények 2014-ben közlésre is kerültek és továbbiak közlését készítették elő. Bioinformatikusokkal együttműködésben beindítottak, adaptáltak, és fejlesztettek olyan informatikai módszereket, melyekkel azonosíthatók a kezeletlen-kezelt mintapárok genomja közötti kis- és nagyléptékű különbségek. Megvizsgálták eddig öt, klinikumban használt kemoterápiás szer mutagenikus hatását. A DNS-javító gének közül eddig a BRCA1 tumor szuppresszor gén vizsgálata hozta a legérdekesebb eredményt. A gén mutációja, amelynek örökletes formái emlő- és petefészekrákra hajlamosítanak, váratlan eredményeik szerint látványosan megnöveli a genomban keletkező bázisszubsztitúciós hibák mennyiségét. A jelenség új magyarázatot kínál a gének a daganatok kialakulásában betöltött szerepére.

A *Rendezetlen Fehérje Kutatócsoport* az ezredforduló óta a rendezetlen fehérjék kutatásával foglalkozik, a megjelent publikációk igen magas összesített impaktfaktora 200 fölött van. A 2014-es évben publikált jelentősebb eredmények: bioinformatikai módszerekkel kimutatták a prolin aminosav szerepét a preformált szerkezeti elemek kialakulásában (koreai együttműködő partnerrel). Bizonyították a diszkrét molekula dinamika módszerének használhatóságát rendezetlen fehérjék szerkezeti sokaságának feltérképezésében. A kutatócsoport vezetője a szakterület világszinten egyik legismertebb képviselője, aki számos elméleti és összefoglaló cikkel járult hozzá a rendezetlen fehérjék tudományához. Egy új adatbázist és predikciós algoritmust is publikáltak (brüsszeli együttműködés). Évek óta folyik az együttműködés a Semmelweis Egyetem Gyógyszerhatástani Intézetével, ami a 2014-es évben két új eredményt hozott. Egyik az escitalopram hatóanyag, alvásra gyakorolt hatásával, a másik a narkolepszia kialakulásával kapcsolatos. A Pécsi Egyetem Orvostudományi Karának Biofizikai Intézetével közösen írt munkájukban egy teljes fehérjecsalád (ADF cofilinek) szerkezeti és funkcionális újraosztályozását kezdeményezték.

A natív ABCC6 fehérje pontos szubcelluláris lokalizációjának meghatározása elengedhetetlen az ABCC6 fehérje az élettanban és betegségekben betöltött szerepének megértéséhez.

Az *Aktív Transzportfehérjék Kutatócsoport* munkája során tranziensen expresszált 10 missense mutánst *in vivo* egér májban, és ennek vizsgálata során azt az eredményt kapták, hogy ezek közül négy 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. Kidolgoztak egy olyan állatmodellt (Abcc6^{-/-} egerek felhasználásával), amelyben gyors kalcifikációt tudnak kialakítani a szívizomban. Bemutatták, hogy ez a biológiai jelenség ABCC6-függő, mert a

humán ABCC6 májban történő tranziens expressziója nagymértékben csökkenti a meszesedést. Az ABCC6 mutánsok „irányítása” a plazmamembránba, 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. A transzlációs típusú kutatásaik eredményeként egy preklinikai állatmodellt hoztak létre, amely alkalmas a betegséget okozó mutánsok farmakológiai korrekciójának nyomon követésére, és a kalcifikációs betegségek jövőbeni esetleges gyógyításához nyújt újszerű lehetőségeket. Részt vettek abban a nemzetközi kutatásban, amely a kalcifikációt szabályozó metabolit, a pirofoszfát (PPi) és az ABCC6 kapcsolatát bizonyította. Azonosították az ABCG2 multidrog transzporter koleszterinnel kölcsönható szerkezeti motívumait. A csoport vezetője egyik szervezője volt a 2014. szeptemberben a Bethesda-ban (Md, USA) megrendezett Biennial PXE Research Meeting nemzetközi tudományos konferenciának. A csoportvezető (egy holland kutatóval megosztva) kapta a 2014. évi „PXE International Science Award” díjat.

A *Genom Metabolizmus Kutatócsoport* újszerű általános elveket azonosított enzimeken és receptorokon egyes ligandumok eltérő jellegű kötőhelyeire nézve. Ez az ismeret hasznos lehet malária-ellenes hatóanyagok tervezésében. A *Staphylococcus* törzsek fertőzőképességében fontos szerepet játszó fág-baktérium kölcsönhatások eddig nem ismert mechanizmusát írták le, ami a továbbiakban a bakteriális DNS-hiba felismerő és javító rendszerek fajspecifikus jellemzőinek orvosi biológiailag is fontos megismerését segíti majd elő.

A *Szerkezeti Biofizika Kutatócsoport in vitro* kísérletekkel kimutatta, hogy a komplementrendszer lektin útjának aktiválódásában részt vevő szerin proteázok (MASP-1, MASP-2, MASP-3) az eddig ismert homodimerek mellett, heterodimereket is alkothatnak. Amennyiben ilyen heterodimerek *in vivo* is jelen vannak a vérben, az módosíthatja az aktiválódási mechanizmusról eddig kialakult elméleteket. Ennek jelentősége lehet a lektin út túlzott aktiválódásával kapcsolatos betegségek (pl. szívinfarktus vagy szélütés során kialakuló iszkémia-reperfúziós sérülés, trombózis) kialakulásában és kezelésében. Kimutatták, hogy a mintázatfelismerő molekulákkal komplexben lévő MASP-1 képes aktiválni az endotél sejteket. A MASP-1 aktiváció hatására az endotélsejtek olyan citokineket termelnek (IL-6, IL-8), amelyek kemotaktikus hatást fejtenek ki a neutrofil granulocitákra. A MASP-1 tehát képes egy komplex antimikrobiális immunválaszt kiváltani a komplementrendszer és a neutrofil granulociták egyidejű aktiválásával. A tumorokban és gyulladásos folyamatokban meghatározó szerepet játszó kinázok és foszfodiészterázok fehérje-fehérje kölcsönhatásainak feltérképezésére irányuló munka során előállították az Aurora A és B, ROCK1 és ROCK2, PKA és Rassf1A fehérjéket bakteriális, ill. rovarsejt expressziós rendszerekben. A Rassf1A, ill. Aurora kinázok közötti fehérje-fehérje kölcsönhatások affinitását több módszerrel, köztük mikroskálás termoforézissel határozták meg, ill. a kinázok enzimaktivitását és gátolhatóságát jellemezték. A kísérleti munkához is kapcsolódva a jelátviteli folyamatok leírására alkalmas szerkezeti modelleket építettek kinázok és célfehérjék komplexeire. Korábban mások kimutatták, hogy a flagelláris exportrendszer oldható komponensei fontos szerepet játszanak a kisebb mennyiségben előforduló kései filamentumkomponensek exportkapuhoz történő szállításában. Feltételezték, hogy ez igaz a fő exportszubstrát, a flagellin esetében is. Ezzel ellentétben, a csoport kimutatta, hogy a flagelláris exportrendszer oldható komponensei nem vesznek részt a fő filamentumkomponens (a flagellin) exportkapuhoz történő szállításában.

A *Membránfehérje Bioinformatika Lendület Kutatócsoport* 2014-ben újonnan alakult, és a Lendület pályázatban meghatározott témákban folytatott kutatómunkát. Ennek kapcsán

jelentős eredményeket ért el a transzmembrán fehérjék topológiai adatainak összegyűjtésében, az adatok egységes formában való megjelenítésében (amelyek a <http://topdb.enzim.hu> oldalon érhetők el), és egy új típusú, a legmodernebb topológia becslő algoritmusok eredményét, valamint az összegyűjtött adatokat és a TOPDOM adatbázis adatait is figyelembe vevő becslő eljárás, a CCTOP eljárás kidolgozásában. A CCTOP algoritmus segítségével meghatározták az emberi genom által kódolt transzmembrán fehérjék topológiáját, ami a gyógyszertervezés szempontjából is rendkívül hasznos lehet. Az ezekből a munkákból készült cikkek a Nucleic Acids Research 2015-ös adatbázis különszámában jelennek meg, ill. egy cikket a PLoS ONE folyóirathoz küldtek el. A transzmembrán fehérjéket érintő munkákon kívül a Genom Stabilitás Lendület Kutatócsoporttal együttműködve részt vettek a csirke DT40 sejt vonal genom szekvencia meghatározásában, az erről szóló cikket a G3: Genes, Genoms, Genetics folyóiratban közzé tették.

A *Molekuláris Sejtbiológia Lendület Kutatócsoport* alapját az MTA Lendület Program támogatásával 2012-ben megalakult csapat képezi, melynek kutatási területe az ABC transzporterek biokémiai és sejtbiológiai tanulmányozása polarizált sejtekben. A csoport tagjai megmutatták, hogy a májsejtekben az ABCB11 fehérje sejt felszíni megjelenését az epesók az LKB1/AMPK kináz kaskádon keresztül szabályozzák, de a cAMP egy PKA-függő útvonalon is képes ezt regulálni (*PLoS ONE*). Kimutatták, hogy az ABCG4 fehérje funkcionális dimert alkot az ABCG1 fehérjével, és az ABCG1-hez hasonlóan apoptózist indukál sejtekben (*közlés alatt*). Egy könyvfejezet megírásával a csoport tagjai hozzájárultak az ABC fehérjékkel kapcsolatos jelenlegi kutatási trendek széleskörű ismertetéséhez (*ABC Transporters – 40 Years on*). A kutatócsoport a KTIA_AIK_12, illetve a KTIA VKSZ_12 (NAP_A) pályázatok elnyerésével lehetőséget kapott létszámának jelentős növelésére, valamint kutatási profiljának szélesítésére, a projektekben a csoport tagjai a humán pluripotens őssejtek jellemzését végzik, és modellrendszerekben (pl. idegrendszeri betegségmodellekben) történő felhasználásának lehetőségeit kutatják. Humán pluripotens őssejteket máj, ideg, szív és mezenchimális irányba differenciáltatva vizsgálták a különböző membránfehérjék (sejtkapcsolók és ABC transzporterek) expressziós szintjének változásait, és megmutatták, hogy az expressziós mintázat jellemző a sejt típusra és annak differenciáltsági állapotára (*PORE, Cytometry B Clin Cytom*). Leírtak egy olyan módszert, amellyel szívprogenitor sejteket tudtak előállítani humán pluripotens őssejtekből (*Tissue Eng*), valamint vizsgálták a fogágyból származó őssejtekben az ABCG2 expressziót (*Stem Cells Dev*). A NAP_A pályázat keretében kidolgozták a pluripotens őssejtek idegsejt irányú irányított differenciációjának módszertanát, ill. megkezdték az így kapott neurális progenitorok, valamint az érettebb idegi sejtek jellemzését. Egy széleskörű együttműködés keretében részt vettek a G-CaMP2 Ca²⁺-szenzort expresszáló transzgenikus patkányvonal részletes jellemzésében – a vese (*JASN*), a szív (*FASEB*) és a máj Ca²⁺ szignalizációja tekintetében. Nemzetközi együttműködés keretében vizsgálták a Ca²⁺ transzport fehérjék expresszió változásait, amelynek eredményeit reviewban foglalták össze (*Frontiers in Oncology*). A Ca²⁺ szignálok vizsgálati módszeréről egy metodikai munkát közöltek (*Methods Mol Biol*). Együttműködés keretében a kutatócsoport tagjai vizsgálták az embrionális őssejtekből származó endotél sejtek tulajdonságait (*Stem Cells Dev*).

A *Biomembrán Kutatócsoport* egyik témája a humán ABC transzporter fehérjék szerkezeti és funkcionális vizsgálata. Az ABCG2 multidrog transzporter fehérje fontos szerepet játszik a gyógyszerhatásokban és a xenobiotikumok elleni védelemben, ezért részletesen vizsgálták az őssejtek differenciálódásában, valamint a daganatok multidrog rezisztenciájában betöltött szerepét. A saját, szabadalmazott módszer alapján izolált, funkcionális ABCG2 fehérje alkalmazásával gyógyszerhatás mérésére alkalmas esszéket állítottak be, valamint részletesen

elemezték a gyógyszerek és a membrán-lipidek kölcsönhatásait a fehérje mutáns és polimorf változataival. A csoport folytatta a prion fehérjecsalád fiziológiai szerepének és a szivacsos agysorvadásban, ill. az Alzheimer-kórban betöltött szerepének vizsgálatát. A létrehozott modellrendszerekben összehasonlították mutáns prion fehérjék és a prion fehérjecsalád másik tagja, a shadoo fehérje hatásait. IIS típusú endonukleázok alkalmazásával olyan új PCR klónozó módszert dolgoztak ki, amely a molekuláris biológiai DNS-munkák során gyakran felmerülő problémákra kínál hatékony megoldást. A molekuláris genetikai kutatással foglalkozó részleg folytatta a DNS transzpozonok, ill. a miRNS-ek működésének megértésére irányuló vizsgálatait. Részletesen elemezték különböző eredetű DNS transzpozonok szabályozását emlős sejtekben (humán és patkány sejtvonalak és őssejtek), és kidolgoztak egy ezeken alapuló génbeviteli eljárást patkány embriókban. Ez utóbbi módszerhez kapcsolódva egy nemzetközi szabadalmat nyújtottak be. Új eredményeket írtak le az alternatív miRNS érési útvonalak, a mirtron útvonal és a 3'-izomiR-ek jellemzésével kapcsolatban.

A *Metabolikus Gyógyszerkölcsönhatások Kutatócsoport* kutatói a *CYP2C9* gén expressziójának szabályzásával és a csökkent génkifejeződés egyik lehetséges klinikai következményével kapcsolatban megállapították: A pro-oxidáns *t*-butil-hidrokinon fokozza a *CYP2C9* gén átíródását. Az indukciót a *CYP2C9* gén promoter régiójában lévő aktivátor protein 1-t kötő helyek között, a DNS kihurkolódásával létrejövő kölcsönhatás idézi elő. A *CYP2C9* génben előforduló funkcióvesztő mutációk meghatározása csak részinformációt szolgáltat az epilepsziás gyermekek valproát lebontó képességéről. Az epilepsziás rohamok során felszabaduló citokinek gátolják a valproát metabolizmusában meghatározó szerepet játszó *CYP2C9* expresszióját, ezért lényegesen nagyobb arányban fordulnak elő gyenge metabolizáló képességű betegek, mint azt a *CYP2C9* genotípusból becsülni lehetne. A kutatók a betegek *CYP2C9* státusa alapján javaslatot tettek az optimális vérszintet eredményező valproát adagolására.

A *Fehérje Kölcsönhatás Lendület Kutatócsoport* munkatársai megelőző év során publikáltak egy cikket, ami az egyik foszforiláción alapuló jelpálya működését tárta fel szerkezeti biokémiai módszerekkel. Egy német kutatócsoport pedig körülbelül ezzel egy időben tett egy szokatlan megfigyelést. A magyar csoport által vizsgált fehérje kináz működését a fehérje lebontást nem okozó típusú ubikvitinálás az izom sejtjeiben teljesen megváltoztatta. Német felkérésre a magyar csoport együttműködést kezdett a frankfurti egyetem klinikáján dolgozó kutatócsoporttal. 2014-ben a két csoport felderítette azt a molekuláris mechanizmust, melynek révén az ubikvitináláson és fehérjefoszforiláción alapuló enzimrendszerek egymás működését befolyásolni tudják, és ebben a konkrét esetben az izomfejlődést szabályozzák. A felfedezés lényege, hogy az ERK5 fehérje aktivitása azért változik meg ubikvitinálás hatására, mert ez meggátolja olyan jelátviteli komplexek kialakulását, amik az ERK5 foszforilációjáért felelősek. A közös német-magyar tanulmány jelentősége – a két rendszer együttműködésének biokémiai hátterét feltáró mechanizmus tisztázásán túl – abban is rejlik, hogy eredményeik megteremtik az alapot olyan új hatóanyagok fejlesztésére, melyeket az izomsorvadásos betegségek gyógyításában, ill. az izomszövet regenerálásában lehetne a jövőben alkalmazni.

A *Reprodukció Rendszerbiológiája Lendület Kutatócsoport* 2014. júliusban alakult meg. Az év második felében két posztdoktorral és két PhD hallgatóval bővült a csoport. Egy PhD hallgató állami ösztöndíjat és felvételt nyert az ELTE Doktori Iskolájába. A munkacsoport laboratóriumának felszerelése és beüzemelése folyamatos volt. A munkacsoport a megalakulástól fogva kollaborációs kutatásokat folytat a SE I.sz. Patológiai és Kísérleti Rákkutató Intézetével, a SE Kútvölgyi Klinikai Tömbjének Maternity Magánklinikájával, az ELTE TTK Immunológiai Tanszékével, a Wayne State University Szülészeti és

Nőgyógyászati Klinikájával (Detroit, MI, USA), valamint a National Institutes of Health Perinatology Research Branch-csel (Detroit, MI, USA). A munkacsoport mintagyűjtési- és kutatási tevékenysége az együttműködő laboratóriumokban kezdődött meg (ELTE, SE). Az eredményekből már három tudományos közleményt publikáltak (*Placenta*, *PLoS ONE*, *Frontiers in Immunology*). A *Placenta*, a szakterület vezető folyóirata novemberi számának borítójára a munkacsoport kollaborációs cikkét bemutató ábra került. Az eddigi kutatások főleg a terhességek 5-8%-ban kialakuló terhességi magas vérnyomás kialakulásának lehetséges útvonalaira és biomarker molekuláira fókuszáltak, így jelentős társadalmi, népegészségügyi és gazdasági kihatásuk lehet.

Az emlőrák kezelése során kulcsfontosságú, hogy új, klinikailag is releváns alcsoportokat lehessen felismerni.

Az *Onkológiai Biomarker Lendület Kutatócsoport* bioinformatikai elemzések alapján egy új gént (TTK) azonosított, amelyik a TP53 mutáns tumorokban egy új terápiás célpont lehet. A gén szerepét sejt kultúrák mintáiban is igazolták, az eredményeket publikálták (*Mol Oncol*). A petefészekrák kemoterápiája során a terápiával szembeni rezisztencia kialakulása jelentős klinikai probléma. Sejt kultúrák kísérletek során igazolták, hogy a RAS jelátviteli út egyik génje, a MEK1 kiemelkedő szereppel bír ezen folyamatok során. A MEK1 szerepét klinikai mintákban is igazolták génextpresszió (RT-PCR) és fehérje szintjén (IHC) is. A munka eredményeit egy tudományos közleményben hozták nyilvánosságra (*BMC Cancer*).

b) Tudomány és társadalom

A *Jelátviteli és Funkcionális Genomika Kutatócsoport* vezetője Lendület pályázat nyertes, így számos fórumon beszámolt kutatásairól, illetve népszerűsítette kutatási területét.

A *Fehérjeszerkezet Kutatócsoport* részt vett egy laikusok számára is szervezett, a magyar bioinformatikai kutatások eredményét bemutató konferencia megszervezésében, mely a Magyar Tudomány Ünnepe rendezvénysorozathoz kapcsolódott.

Az intézetben folyó kutatások társadalmi relevanciájának bemutatását célzó, nyilvános előadást tartott a *Genom Stabilitás Lendület Kutatócsoport* vezetője szintén a Magyar Tudomány Ünnepe előadássorozat keretében. Az előadás az Enzimológiai Intézetben folyó rákkutatást bemutató rövid előadássorozat részét képezte. A Duna Televízióban vetítésre került a kutatócsoport-vezető Lendület projektbeli munkáját bemutató interjú.

A *Rendezetlen Fehérje Kutatócsoport* tudományos főmunkatársa előadást tartott a Sashegyi Arany János Általános Iskola és Gimnázium által szervezett Öveges Szakmai Napon, ahol elsősorban természettudományos területen tanító tanárok számára tartott előadást a fehérje szerkeztudományban lezajlott paradigmaváltásról. A kutatócsoport több tagja, elsősorban a kutatónők fogadtak érdeklődő középiskolásokat a Lányok Napja rendezvény keretében 2014 tavaszán.

Az *Aktív Transzportfehérjék Kutatócsoport* vezetője több cikket publikált az orvos-biológiai kutatások problémáiról, ill. az OTKA „átalakításáról” az *Élet és Irodalom*-ban. Ez utóbbi témában a *Nature* 2014. december 18. számában kommentárja jelent meg.

A *Membránfehérje Bioinformatika Lendület Kutatócsoport* által végzett kutatások alap kutatások, ugyanakkor rendkívül fontosak a gyógyszerkutatás szempontjából, így közvetve járulnak hozzá az új hatékony gyógyszerek megalkotásához.

A *Molekuláris Sejtbiológia Lendület Kutatócsoport* egy kutatója interjúbeszélgetést folytatott a Mária Rádióban. A kutatócsoport tagjai az Agykutatás Hete alkalmából poszteren mutatták be a Nemzeti Agykutatási Program (NAP) fő célkitűzéseit Budapesten. Interjúbeszélgetés

hangzott el két munkatárssal az összejt-kutatásról (Klub Rádió, Szabadsáv). Az interjúbeszélgetést a csoport egyik kutatójával a 2014-es kémiai Nobel-díjról számos sajtóorgánum átvette és közölte.

A *Biomembrán Kutatócsoport* tagjai számos hazai konferencián, rádióadásban és TV-vitában vettek részt, laikusoknak szóló tudományos tájékoztatót tartottak általános iskolai tanulók számára, pl. a Telki Általános Iskolában „Ugráló génekkel a szívizom nyomában” címmel.

A *Metabolikus Gyógyszerkölsönhatások Kutatócsoport* tagjai napilapban megjelent cikkben tájékoztatták az érdeklőket a betegek gyógyszer-lebontó képességéhez igazított terápia lehetőségeiről, amely biztosítja az ésszerű, kevesebb nem kívánt mellékhatással és csökkent gyógyszerfogyasztással járó terápia kialakítását.

A *Fehérje Kölsönhatások Lendület Kutatócsoport* kutatói az év során beadtak egy pályázatot az MTA Szakmódszertani pályázatára „Kémiai biológia megjelenítése a középiskolai természettudományos oktatásban molekula modellek segítségével”.

A *Reprodukció Rendszerbiológiája Lendület Kutatócsoport* vezetője a Lendület pályázat elnyerésekor adott riportokkal segítette, hogy a laikusok is alapvető tudományos ismeretekhez juthassanak a kutatási területéről, és a kutatással nem foglalkozók érdeklődését is felkeltse a tudományos munka iránt. Ezen riportok a Magyar Televízióban, valamint a Kossuth és Lánchíd Rádiókban hangzottak el. Az ismeretterjesztő riportok felkerültek magyar és angol nyelven a Magyar Tudományos Akadémia honlapjára is.

Az *Onkológiai Biomarker Lendület Kutatócsoport* vezetője előadást tartott a „Nők az emlőrák ellen” társadalmi felvilágosító konferencián az emlőrák kezelése során alkalmazott genomikus technológiákról. A csoportvezető interjút adott az Origo, az Index és a Bors online magazinoknak az onkológiai betegségek kialakulásáról és az onkológiai kutatások folyamatáról. A csoportvezető előadást tartott a budai Irgalmasrendi Szakkollégium meghívására az onkológiai kutatások háttéréről. Az onkológiai betegségek kialakulásának háttéréről a csoportvezető interjút adott az EchoTV „Rákérdés” műsorában, valamint a TV2 „Tények” műsorában.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2014-ben

Hazai kapcsolatok

Téma: A DNS javító folyamatok hibái által okozott mutációs mintázatok azonosítása

Együttműködő partnerintézmény: ELTE Komplex Rendszerek Fizikája Tanszék

Egyezmény neve: tudományos együttműködés

Eredmények: Továbbfejlesztették és céljaikhoz adaptálták a sejtklónok genomszekvenálásából származó nagymennyiségű adat feldolgozási módszereit.

Közös publikációk száma: 1

Téma: Jelátviteli útvonalak szerepe az immuntolerancia és trophoblast invázió zavarainak kialakulásában: rendszerbiológiai megközelítés.

Együttműködő partnerintézmény: SE, Kútvölgyi Klinikai Tömb, Maternity Magánklinika

Egyezmény neve: MTA Lendület pályázat

Eredmények: A kollaboráció eredményeiből 2014. második félévében három tudományos közlemény jelent meg, valamint egy került beküldésre, és két PhD hallgató védési eljárása indult meg. A csoportvezető a Semmelweis Egyetem Doktori Iskolájában vezetett témát.

Közös publikációk száma: 3

Vállalati kutatás-fejlesztési kapcsolatok

Téma: Bioszimiláris monoklonális antitestek fejlesztése

Együttműködő partnerintézmény neve: Richter Gedeon Nyrt., ELTE, DE

Egyezmény neve: VKSZ pályázat kapcsán létrejött konzorciumi szerződés

Eredmények: Korszerű eljárások és alapanyagok felhasználásával az eredetihez nagymértékben hasonló biológikum gyógyszermolekulákat állítottak elő a hatóságok által előírt klinikai vizsgálatokhoz.

Téma: Transzgenikus patkány előállítás

Együttműködő partnerintézmény: ToxiCoop Zrt. toxikológiai és biotechnológia vállalkozás

Egyezmény neve (vagy a kapcsolat formája): Közös pályázat (KMR)

Eredmények: a közös fejlesztés eredményeképpen szabadalmi beadvány került benyújtásra és közös nemzetközi közlemények születtek.

Közös publikációk száma: 2

Nemzetközi kapcsolatok

Téma: A citoszkeleton sokoldalú funkciója

Együttműködő partnerintézmény: Faculté des Sciences de l'Université de Rouen, Franciaország

Egyezmény neve: tudományos együttműködés

Eredmények: Az elméleti munka keretében jellemezték a citoszkeleton sokoldalú funkcióit eukarióta sejtekben történő modellezés révén.

Közös publikációk száma: 3

Téma: Targeting the Achilles heel of cancer

Együttműködő partnerintézmény: CNRS-Université Lyon 1

Egyezmény neve : NIH-ANR pályázat

Eredmények: Átfogó review publikálása a Chemical Reviews c. folyóiratban.

Közös publikációk száma: 3

Téma: A kemoterápiás szerek mutagenikus hatása

Együttműködő partnerintézmény: Cancer Research UK London Research Institute, London

Egyezmény neve: tudományos együttműködés

Eredmények: Elkezdtek több kemoterápiás szer mutagenikus hatásának vizsgálatát sejtenyészetekben egész genom szekvenálással.

Közös publikációk száma: 1

Téma: A rendezetlen fehérjék kötőmotívumainak szerkezeti elemzése

Együttműködő partnerintézmény: Max F. Perutz Laboratories, Konrat Group, Bécs, Ausztria

Egyezmény neve: ANN-FWF OTKA együttműködés

Eredmények: Az osztrák FWF és a hazai OTKA támogatásával létrejött együttműködésben a rendezetlen fehérjék fő funkcionális egységeinek, a molekuláris felismerő motívumoknak a szerkezeti kialakulását vizsgálják. A hazai csoportban történnek a bioinformatikai és biokémiai kísérletek, míg Bécsben a biofizikai (elsősorban NMR) méréseket végzik.

Közös publikációk száma: 1

Téma: Biostruct-X

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

Egyezmény neve: FP7 Infrastructure

Eredmények: Jellemezték a prevetív DNS-javításban szerepet játszó enzimikus mechanizmusokat.

Közös publikációk száma: 1

Téma: Modellrendszerek PXE-re

Együttműködő partnerintézmény: Thomas Jefferson University, Philadelphia, USA

Egyezmény neve: NIH együttműködési támogatás, R01 közös pályázat

Eredmények: Új preklinikai állatmodellek az arteriális kalcifikációs betegségek vizsgálatára.

Közös publikációk száma: 2

Téma: MAP kináz jelátvitel szabályozása nem-proteolitikus ubikvitináció révén

Együttműködő partnerintézmény: Cell Death Signaling Group, Institute of Biochemistry II Goethe University Medical School, Frankfurt, Németország

Egyezmény neve: tudományos együttműködés

Eredmények: A két csoport munkája az eltérő tematikai és módszertani megközelítések révén jól kiegészítette egymást. Ennek eredményeként eddig két közös cikk született.

Téma: Jelátviteli útvonalak szerepe az immuntolerancia és trophoblast invázió zavarainak kialakulásában: rendszerbiológiai megközelítés

Együttműködő partnerintézmény neve: Wayne State University, Szülészeti és Nőgyógyászati Klinikája, Detroit, MI, USA

Egyezmény neve: MTA Lendület pályázat

Eredmények: Ezen kollaborációból 2014. második félévében három tudományos közlemény jelent meg, valamint egy továbbiit küldtek be közlésre. Két PhD hallgató védési eljárása indult meg. A csoportvezető 2014. decemberben a partnerintézményben végzett kutatómunkát.

Közös publikációk száma: 3

Téma: A rendezetlenség szerepe a rákban

Együttműködő partnerintézmény neve: Korea Research Council of Fundamental Science and Technology, Korea

Egyezmény neve: tudományos együttműködés

Eredményei: Bioinformatikai előszűréseket végeztek a vizsgált fehérjék szerkezeti sokaságával, rendezetlenségével kapcsolatban. A vizsgálni kívánt fehérjék DNS konstrukcióit elkészítették, klónozták és optimalizálták a fehérje expressziót.

Részvétel a tudományos közéletben

Az Enzimológiai Intézet kutatócsoport vezetői aktívan részt vesznek a hazai és nemzetközi közéletben, számos tudományos testület vezetőségi tagjai (Magyar Biokémiai Egyesület, Magyar Biofizikai Társaság, Magyar Bioinformatikai Társaság, Jelátvitel Szakosztály, Bioinformatika Osztályközi Állandó Bizottság stb.). Képviseletik magukat az Európai Molekuláris Biológiai Bizottságában, valamint közülük került ki a FEBS Advanced Course Committee elnöke. A kutatócsoport-vezetők számos szakfolyóirat szerkesztőségi tagjai, mint pl. FEBS Journal, FEBS Letters, Immunobiology, CPPS, Central European Journal of Physics, Biology Direct, The Open Applied Informatics Journal stb.

2014. október 8-10. között került megrendezésre Visegrádon a TOX'2014 konferencia a Magyar Toxikológusok Társasága és Magyar Kísérletes és Klinikai Farmakológiai Társaság szervezésében. Farmakokinetika és Gyógyszermetabolizmus Szimpóziumot 2014. április 23-

25. között rendeztek meg Galyatetőn. A Molekuláris Sejtbiológia Lendület Kutatócsoport tagjai megrendezték a 4. Gárdos György Szimpóziumot Mátraházán.

Felsőoktatási tevékenység

Az intézet fontos feladatának tekinti a nemzetközileg beágyazott alapkutatás mellett az oktatást. Munkatársaik négy egyetemen (ELTE, BME, Semmelweis Egyetem, Pázmány Péter Katolikus Egyetem) tartanak előadásokat, illetve gyakorlatokat mind az alapképzésben, mind posztgraduális oktatásban. Intézetük ezzel egy időben hetven doktorandusz-hallgató oktatását is ellátja, akik munkájukkal nagymértékben hozzájárulnak az intézet eredményeihez.

IV. A 2014-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Pályázat megnevezése (formája): KTIA VKSZ_12-1-2013-0001

Pályázati téma: Bioszimiláris monoklonáris antitestek fejlesztése

Támogatás mértéke összesen: 600 M Ft 2014-ben: 228, 5 M Ft

2014-ben végzett munka fontosabb eredményei: Korszerű eljárások és alapanyagok felhasználásával az eredetihez nagymértékben hasonlító biologikum gyógyszermolekulákat állítottak elő a hatóságok által előírt klinikai vizsgálatokhoz.

Pályázat megnevezése (formája): MTA Lendület pályázat (65567-8/2014)

Pályázati téma: Onkológiai biomarkerek kutatása

Támogatás mértéke: összesen: 247,6 M Ft; 2014-ben: 35,5 M Ft

2014-ben végzett munka fontosabb eredményei: Igazolták a MEK1 gén szerepét a petefészek-daganatok kemoterápiájával szembeni rezisztenciájának kialakulásában sejt kultúras kísérletek és klinikai minták vizsgálatával. Létrehoztak egy online elérhető rendszert, amely genotípusbeli változásokat tud klinikai kimenettel összekapcsolni (www.g-2-o.com).

Pályázat megnevezése (formája): MTA Lendület pályázat (LP2014-7/2014)

A pályázati téma megnevezése: Jelátviteli útvonalak szerepe az immuntolerancia és trophoblast invázió zavarainak kialakulásában: rendszerbiológiai megközelítés

Támogatás mértéke összesen, 299 M Ft, 2014/2015 évben 60 M Ft

Pályázat megnevezése (formája): Nemzeti Agykutatási Program - A alprogram (KTIA VKSZ_12, Feladat szám: 1.10)

Pályázati téma: Betegség-specifikus iPS sejtek előállításának előkészítése neurológiai betegségek modellezésére

Támogatás mértéke összesen: 210 M Ft; 2014-ben: 75 M Ft

2014-ben végzett munka fontosabb eredményei: Kialakították és felszerelték a humán pluripotens őssejtek tenyésztésére és idegi irányú differenciációjára alkalmas laboratóriumot, kialakították projekthez szükséges együttműködések, etikai engedélyt nyújtottak be, és megkezdték az érdemi kutatómunkát, melynek keretében részletesen jellemezték a neurális progenitorok sejtekből irányított differenciáltatással nyert leánysejteket.

Pályázat megnevezése (formája): Kétoldalú tudományos együttműködési pályázat – (KRCF-MTA)

Pályázati téma: A rendezetlenség szerepe a rákban

Támogatás mértéke összesen: 60 M Ft, 2014-ben: 20 M Ft

2014-ben végzett munka fontosabb eredményei: Bioinformatikai előszűréseket végeztek a vizsgált fehérjék szerkezeti sokaságával, rendezetlenségével kapcsolatban. A vizsgálni kívánt fehérjék DNS konstrukcióit elkészítették, klónozták és optimalizálták a fehérje expressziót.

Pályázat megnevezése (formája): OTKA (K112112)

Pályázati téma: Potenciálisan aktív DNS transzpozonok az emberi genomban: genomi paraziták vagy domesztikált rezidensek?

Támogatás mértéke összesen: 43,9 M Ft, 2014-ben: 0 Ft

A munka az emberi genomban található DNS transzpozonok domesztikációs folyamataira, azok evolúciós és génterápiás aspektusainak megismerésére irányul.

Pályázat kezdete: 2015. január 1.

Pályázat: OTKA kutatási pályázat (K-112144)

Pályázati téma: A TPPP/p25 szerepe az idegrendszer sejtvédő folyamataiban, az autofágiában, a proteozóma és aggreszóma rendszerekben. Egy peptidomimetikus foldamer, mint lehetséges szinukleuinopátia elleni gyógyszermolekula.

Támogatás mértéke összesen: 27,5 M Ft, 2014-ben: 0 Ft

Pályázat kezdete: 2015. január 1.

Pályázat megnevezés: ANN-FWF OTKA (111056) tudományos együttműködési pályázat

Pályázati téma: A rendezetlen fehérjék kötő motívumainak, lineáris epitopjainak és amiloidogén régióinak összehasonlító jellemzése

Támogatás mértéke összesen: 44 M Ft, 2014-ben: 11 M Ft

2014-ben végzett munka fontosabb eredményei: Bioinformatikai előszűrések az irodalomban ismert rendezetlen kötőmotívumok részletes vizsgálatával. A projekt során vizsgálni kívánt 10 célmotívum kiválasztása, szerkezetük, funkciójuk, kölcsönhatásuk részletes feltérképezése.

Pályázat megnevezése: OTKA (NN 114136)

Pályázati téma: PXE és hasonló meszesedési betegségek kutatási modelljei

Támogatás mértéke összesen: 32,692 M Ft, 2014-ben: 0 Ft

Pályázat kezdete: 2015. január 1.

V. A 2014-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Tompa P: Multiteric regulation by structural disorder in modular signaling proteins: An extension of the concept of allostery. *Chem Rev*, 114:6715-6732 (2014) <http://real.mtak.hu/19531/>
2. Szakacs G, Hall MD, Gottesman MM, Boumendjel A, Kachadourian R, Day BJ, Baubichon-Cortay H, Di Pietro A: Targeting the Achilles Heel of multidrug-resistant cancer by exploiting the fitness cost of resistance. *Chem Rev*, 114:5753-5774 (2014) <http://real.mtak.hu/15003/>
3. Tompa P, Davey NE, Gibson TJ, Babu MM: A million peptide motifs for the molecular biologist. *Mol Cell*, 55:161-169 (2014) <http://real.mtak.hu/19534/>
4. Nagy GN, Marton L, Contet A, Ozohanics O, Ardelean LM, Révész Á et al.(5, Vértessy BG): Composite aromatic boxes for enzymatic transformations of quaternary ammonium substrates. *Angew Chem Int Edit*, 53:13471-13476 (2014) <http://real.mtak.hu/18134/>
5. Szabó JE, Németh V, Papp-Kádár V, Nyíri K, Leveles I, Bendes ÁÁ et al. (9, Zagyva I, Róna G, Pálincás H, Besztercei B, Liliom K, Tóth J, Vértessy BG): Highly potent

- dUTPase inhibition by a bacterial repressor protein reveals a novel mechanism for gene expression control. *Nucleic Acids Res*, 42:11912-11920 (2014) <http://real.mtak.hu/18772/>
6. Szilagyi A, Zhang Y: Template-based structure modeling of protein-protein interactions. *Curr Opin Struc Biol*, 24:10-23 (2014) <http://real.mtak.hu/12915/>
 7. Róna G, Borsos M, Kobe B, Vértessy BG: Factors influencing nucleo-cytoplasmic trafficking: which matter? *Acta Crystallogr D*, 70:2777-2778 (2014) <http://real.mtak.hu/18086/>
 8. Pomozi V, Brampton C, Fülöp K, Chen L-H, Apana A, Li Q et al. (3, Váradi A): Analysis of Pseudoxanthoma Elasticum-Causing Missense Mutants of ABCC6 In Vivo; Pharmacological Correction of the Mislocalized Proteins. *J Invest Dermatol*, 134:946-953 (2014) <http://real.mtak.hu/12985/>

I. A kutatóhely fő feladatai 2014-ben

Elektrofiziológiai módszerekkel annak megállapítása, hogy a látás területén a nem-tudatos emlékezeti rendszer a tudatos észlelési élményekkel és a figyelmi feldolgozással rokon jelenségeket mutat, és kapcsolatba hozható preditív kódolási működésekkel.

Az életkorral együtt járó kognitív és affektív folyamatok kvantitatív, elsősorban elektrofiziológiai módszerekkel történő elemzése az öregedéssel kapcsolatos életminőség megfelelő színvonalának biztosításához.

Összehasonlító pszichofiziológiai kutatások végzése, különös tekintettel a biológiai rendszerek elektrofiziológiai és optikai módszerekkel való vizsgálatára és a modern módszertani eljárások bevezetésére.

A funkcionális farmakológiai kutatásoknak a fókuszált területekre történő összpontosítása. Új technológiai platformok – optofiziológia, transzgenikus modell organizmusok, nanoanyagok toxicitása – fejlesztése.

A kutya és az ember társas-viselkedési készségeinek háttérben feltételezhető neurohormonális és genetikai szabályozó tényezők vizsgálata.

A csecsemőkortól serdülőkorig tartó fejlődés során az epigenetikai módosulások, valamint az anyai viselkedés és a környezet hatása összefüggésének vizsgálata.

A győzelemmel és a veszteséssel való megküzdés életkori és személyiségbeli különbségeinek feltárása idegfiziológiai mutatók tükrében, a tehetségbeválás és a versengési attitűdök vizsgálata, a tanulással kapcsolatos erőfeszítés kulturális és akkulturációs folyamatainak feltárása, a digitális kor és az olvasás kapcsolatának vizsgálata és a humán tudományok és a hatalmi viszonyok összefüggéseinek a feltárása.

A társadalmi és a kis csoportokban lezajló szociálpszichológiai folyamatok kutatása, illetve olyan narratív elemző eljárások kidolgozása, amelyek révén ezek a folyamatok empirikusan elemezhetők.

II. A 2014-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

A többféle képpen hallható hangsorok vizsgálata fontos információkkal szolgál a hallási észlelés mechanizmusairól. Az ilyen hangsoroknál az észlelés elkerülhetetlenül váltakozik a lehetséges alternatívák között. Az észlelés váltakozásának időbeni lefolyását vizsgálva megállapították, hogy az személyenként eltérő struktúrát mutat, és ez a személyjellemező struktúra felismerhető akkor is, ha a két mérés között több mint egy év telt el. Stabil, a személyre jellemző észlelési tulajdonságok felfedezése lehetővé teszi, hogy kapcsolatot találjanak a központi idegrendszer egyéni különbségei és a személyiség fő jellemzői között, azaz a személyiségjellemezők idegrendszeri háttérének feltárását.

Az észlelés korszerű elméleteiben egyre nagyobb szerepet kapnak az előrejelző folyamatok. A hallási jelenetelemzés magyarázatára kialakított elméletek azonban mindeddig nem fordítottak kellő figyelmet erre az alapvető szempontokra. Elméleti modellt alakítottak ki hangforrások szétválasztására, mely prediktív folyamatokra épül, specifikálva a modell folyamatait és peremfeltételeit a számítógépes modellezés számára. Ez a modell megalapozza párhuzamosan beszélők hangjának számítógépes szétválasztását, mely sok lehetséges alkalmazási lehetőséget rejt magában, pl. hallókészülékek.

Az agyi elektromos működésekből kiemelhető eseményhez kötött potenciálváltozások elemzésével nyert adatok alapján arra következtettek, hogy a vizuális észlelésben automatikus, nem tudatos szinten is szerepet játszik egy olyan nem tudatos emlékezeti reprezentációs rendszer, mely előre jelzi a környezet szabályszerűségeit. Az emlékezeti rendszer tárol magasabb szintű perceptuális tulajdonságokat, szimmetria, arcok esetén az emóciók megjelenésén túl olyan szabályszerűségeket, mint a megjelenő arcok neme. Az emlékezeti rendszer működésére hatással van a tanulás, így hasonlóan a figyelmi feldolgozással, az ingerek jelentéstelisége is. Két független kísérletben, agyi elektromos válaszok elemzésével megmutatták, hogy a célirányos viselkedés szempontjából lényegtelen, ritka hallási ingerek mintegy 150 ms-on belül a feladat-optimális figyelmi beállítódás megszűnéséhez vezetnek. Ez az – eddigi elképzeléseknél jóval gyorsabban előálló – észlelőrendszeri változás állhat a hallási figyelmi pislogás jelenségének hátterében.

A rizikóvállalási sajátosságok, ezzel összefüggésben pedig a pozitív, illetve negatív visszajelzésekre adott agyi elektrofiziológiai válaszok életkorfüggő jellemzőinek elemzése a visszajelzések gyors és elaboratív kiértékelésének időskori csökkenésére engednek következtetni.

Megállapították, hogy a memóriakonzolidáció folyamatában az agy elektromos aktivitásának theta frekvenciasávú szinkronizációja játszik elsődlegesen fontos szerepet, mely a frontális területek és más idegrendszeri régiók között mérhető.

Igazolták, hogy az agy idős korban is megtartja plaszticitását. Kognitív tréning eredményeként olyan kiváltott potenciálkomponensek is megfigyelhetők voltak az EEG-ben, melyek eredetileg csak a fiataloknál voltak jelen. A változás hosszú távú, akár egy év múlva is mérhető volt, és javulást okozott olyan nem gyakorolt feladatokban is, melyek a tréninghelyzethez hasonló agyterületek aktivitását igénylik.

Az intézet egyik kiemelt témája a MEMS-technológián alapuló agyi elektromos érzékelők fejlesztése. Ezen a területen több új eredményt is elértek. Az agyi elektromos mérések jel-zaj viszonyának javításához szükséges a mérő elektródok impedanciájának csökkentése. Ennek érdekében platina elektrolitikus leválasztásával felületnövelő módszereket fejlesztettek ki. Az elektród fajlagos felülete (effektív felület/geometriai felület) csökkenthető az elektród impedanciájának csökkentésével. A felületnövekedés és így az impedanciacsökkenés mértékét *in vitro* és *in vivo* mérésekkel is igazolták. Mindkét esetben megállapították, hogy jelentős mértékű és tartós impedanciacsökkenés érhető el platina elektrolitikus leválasztásával. A meglévő technológiával készült elektródák impedanciacsökkentésén túl új, polimer alapú agyi multielektrodát is fejlesztettek. Az eszköz egy alsó poliimid rétegből, egy középső fém (TiOx + Pt) és egy felső SU-8 polimer rétegből áll. Az eszközből az egyes mikroelektrodok tükörszerűen állnak ki. Az új eszköz előnye, hogy nagy kihozattal, alacsony hibagyakorisággal, külön maszkoló réteg alkalmazása nélkül állítható elő. Az eszköz akut *in vivo* kísérletekben megfelelően működik.

A hippocampalis oszcillációk *in vitro* vizsgálata során kimutatták, hogy a hippocampus cornu ammonis 3 (CA3) régiója kétféle éles hullám-fodor komplexumot (sharp wave-ripple complex, SPW-R) tud generálni *in vitro* körülmények között. Míg az 1-es típusú SPW-R-t

negatív helyi mezőpotenciál-gradiens a piramidális rétegben és a közeli dendritekre korlátozó nyelő jellemzi az áramforrás-sűrűség diagramon, addig a 2-es típusú alatt pozitív helyi mezőpotenciál gradiens mérhető a piramidális rétegben, valamint mind az apikális, mind a bazális dendritéken megfigyelhető áramnyelő az áramforrás-sűrűség diagramon. A két különböző SPW-R alatt a piramis sejtek és interneuronok különböző populációi tüzelnek. A különböző SPW-R-ek kialakításában az interneuronok, ezek közül is a periszomatikus interneuronok játszanak vezető szerepet azért, hogy a CA3 piramis sejtek eltérő populációit aktiválják. Ezek alapján arra következtetnek, hogy a hippocampus képes dinamikusan változtatni a működését, amely sejt- és hálózatszintű alapja lehet az információ bemenet specifikus és aktivitásfüggő továbbításának.

A kiváltott membránpotenciál-változásokat gyors képalkotó eljárással követve, asztroglialis komponenst mutattak ki a terjedő neuronális aktivitásban, ami neuro-glia kapcsoltságot tanúsít. Hasonlóan, a neuronális kalcium oszcilláció dinamikájával csatolt szinkronizált asztroglialis kalcium tranzienseket és mechanizmusokat azonosítottak rekurrens epileptiform kisülések során.

Nanoörszemet alkalmazva monitorozták azonosított idegsejt axondomb membránjában elhelyezkedő egyedi nátrium ioncsatornák aktivitását. Először alkalmaztak kalcium-szenzor fehérjét expresszáló transzgen patkányt az *in vivo* idegi aktivitás modellezésére (előzmény TransRat projekt). Nanotoxicitás tanulmányozására, transzgen patkányból származó primér hepatocita és Kupffer fagocita sejteket tartalmazó ko-kultúra rendszert hoztak létre. A hepatocitákban és a fagocitákban észlelt kalcium tranziensek azt mutatták, hogy a sejtek aktivációja erősen függ a nanotoxicitás standardként alkalmazott poliamidoamin dendrimer koncentrációjától. A kalcium szignál és szimultán hepatobiliáris transzport *in vivo* tanulmányozására fluoreszcens epasav konjugátumokat terveztek és szintetizáltak.

Kiderült, hogy összefüggés van a kutya oxytocin receptorát kódoló gén különböző változatai és az ember felé irányuló viselkedési megnyilvánulások között. Továbbá igazolást nyert az is, hogy az ornyálkahártyán keresztül bejuttatott oxytocinnak szerepe van abban, hogy ambivalens helyzetekben pozitív elvárásokat alakítsanak ki a várható eseményekkel kapcsolatban. Agyi képalkotó eljárás (fMRI) alkalmazásával hasonlóságot sikerült kimutatni éber állapotú kutyákra és emberek fajtársa hangokra adott agyi válaszait tekintve. A poliszomnográfias módszer non-invazív alkalmazásával kimutatták, hogy a napi aktivitás specifikusan befolyásolja a kutyák alvási EEG-spektrumát.

Az anya-csecsemő kötődés környezeti és genetikai tényezőit vizsgáló kutatás eredménye, hogy a csecsemő szocio-émocionális fejlődése tekintetében előnytelen ún. atipikus anyai viselkedést befolyásolta egyrészt az anya COMT genotípusa, másrészt – ettől független hatásként – az anya által a gyermek első életéve során megélt stresszes életesemények mennyisége az anyai szorongáson keresztül. Az eredmény rávilágít arra, hogy a szülő számára a gondozásban komoly nehézséget jelentő környezeti tényezők az anya mentális egészségén keresztül gyakorolhatnak hatást a gyermekével való bánásmódra, és ennek hatása hozzáadódik az anya COMT genotípusának viselkedést befolyásoló hatásához.

Kimutatták, hogy a versenyeken kiemelkedő eredményeket elérő tehetségek adaptívabb versengési attitűdökkel, győzelemmel és veszteséssel való megküzdési stratégiákkal, nagyobb mentális erővel, magasabb teljesítménymotivációval és nagyobb jóindulatú perfekcionizmussal rendelkeznek, mint a versenyeken nem kiemelkedő eredményeket elérő versenyzők.

Szexuális kisebbségekkel kapcsolatos vizsgálataik során feltárták, hogy a Kádár-korszakban megélhető lesbikus identitást mindenekelőtt a rejtőzködés, az informális kapcsolati hálók és terek, továbbá a reprezentációk hiánya vette körül.

Megállapították, hogy a társadalmi konstrukcionista megközelítések és a foucault-i genealógia episztemológiai státusza és eljárás módja különbözik.

A pszichoanalízis intézményesülésének kezdeti éveit jellemző hatalmi viszonyok vizsgálata során rámutattak, hogy a vizsgált időszakban a bécsi és a budapesti pszichoanalitikus egyesületek tag-összetétele az adott egyesület elnökének szakmai és személyes kapcsolataitól és hatalmi pozíciójától függött.

Kidolgozták a nemzeti azonosulás mérésére alkalmas kérdőíves eljárást, és azonosították a kollektív áldozati szerep narratív markereit. A történelmi sérelmek nyomán fellépő kollektív áldozatszerep és a jelenbeli csoportközi konfliktusok közötti összefüggéseket vizsgálva megállapították, hogy minél központibb a múltbeli áldozatélmény a személy nemzeti identitásában, annál hajlamosabb az előítéletességre, a szélsőséges attitűdök képviselésére, a saját nemzethez való glorifikáló kapcsolódásra. A kutatócsoport munkatársai továbbá megállapították, hogy a rendszerigazolás és az igazságos világba vetett hit közötti összefüggések eltérően alakulnak a hazai, és a nyugat-európai országok mintáiban. A különbségeket az eltérő történelmi reprezentációk és más szociálpszichológiai változók magyarázzák.

Orosz és angol nyelvű szövegek automatikus tartalomelemzésével detektálták a Mars-500 nevű űranalóg szimulációban részt vevő nemzetközi legénység egyes tagjainak növekvő depressziós hajlamát; pozitív összefüggést mutattak ki a csoportkohézió és a földi irányítással szembeni érdekérvényesítés szintje között; valamint megállapították, hogy az ingerszegény időszakokban fellépő idői tudatosság csökkenése reverzibilis.

b) Tudomány és társadalom

A Kognitív Idegtudományi és Pszichológiai Intézet volt a fő szervezője a 2014-es Agykutatás Hetének. Demonstrációkkal és előadásokkal vezették be az érdeklődőket a pszichofiziológia tudományába, illetve a kutatók „élő könyvtárként” álltak rendelkezésre, bárki kérdezhetett őket kutatási területükről vagy egyéb, érdekes témákról.

Tájékoztatókat és bemutatókat tartottak a tudomány iránt érdeklődő laikusok számára a Kutatók Éjszakáján. Lehetőséget biztosítottak az érdeklődőknek, hogy megismerkedjenek a szemmozgás-követő berendezés működésével. A bemutató kísérletben a laikusok különböző érzelmeket mutató képeket kategorizáltak, majd a teszt végeztével megtekinthették, milyen szemmozgással tapogatták le az emberi arcok jellemzőit a kategóriáról való döntés során. Személyre szóló eredményüket is megkapták a helyesen kategorizált érzelmek arányáról.

Számos előadással vettek részt a Magyar Tudomány Ünnepeinek rendezvényein, illetve tudományos népszerűsítő előadásokat tartottak a Magyar Tudomány Ünnepe alkalmából megrendezett Családi Kutya Program Konferencián és a „TTK Tárt Kapukkal” programján.

A Lányok Napja rendezvénysorozatának keretében középiskolásoknak mutatták be az intézet pszichofiziológiai laborjaiban zajló kutatásokat.

Az alapvető szociálpszichológiai tudás (járókelő hatás és fejlődésfókuszú szemléletmód) átadása érdekében hozzájárultak ahhoz, hogy létrejöhessen egy konferencia és egy fesztivál ezekről a kérdésekről, és tanárok is kaphassanak tréninget ezeken a területeken.

Tudomány-népszerűsítő interjút adtak a Duna Televízió „Novum” című műsorában. Részt vettek a középiskolások számára rendezett tudományos nyári tábor „AKI Kíváncsi Kémikus” lebonyolításában. A Krisztallográfia Éve alkalmából írást jelentettek meg a „Biokémia” című folyóirat 2014. decemberi számában.

Számos előadást tartottak, rádióinterjút, online interjút adtak és kerekasztal-beszélgetéseken vettek részt, többek között a XVIII. Budapesti Pszichológiai Napokon, a Goethe Intézetben, a Magyar Csillagászati Egyesület rendezvényén, az Ipolysági Napokon, üzleti konferenciákon és továbbképzéseken (pl. IT Services, Német Kereskedelmi Kamara, Haszon Magazin).

Az ELTE Pszichodiák Alapítvány által szervezett Pszinapszis rendezvényen a magyar nemzeti identitás és a csoport-alapú érzelmek témájában folytatott kutatásairól, valamint az úrutazás pszichológiai vonatkozásairól tartottak előadást.

Kutatási eredményeikről a Természet Világa és az Élet és Tudomány című lapokban is beszámoltak.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2014-ben

Téma: Visual mismatch negativity and predictive coding

Együttműködő partnerintézmény: Translational Neuromodeling Unit, Institute for Biomedical Engineering, University of Zurich, ETH Zurich, Svájc, és Department of Pathological Physiology, Faculty of Medicine in Hradec Králové, Charles University in Prague, Hradec Králové, Cseh Köztársaság

Egyezmény neve: tudományos együttműködés

Eredmények: Teoretikus és módszertani összefoglalás a nem-tudatos vizuális emlékezet funkcionális vonatkozásairól és vizsgálati lehetőségeiről.

Közös publikációk száma: 1

Téma: GABA transzporter altípus specifikus vegyületek fejlesztése

Együttműködő partnerintézmény: University of Leuven, Belgium

Egyezmény neve: ERA-Chemistry

Eredmények: A 2014. évben lezárult projekt szakmai beszámolója „kitűnő” minősítést kapott. A neuroprotektív Glu/GABA mechanizmus gyógyászati célú kiaknázásának céljával 33 új spirobicyclusos származékot, ill. prekuzort állítottak elő és teszteltek, amelyek közül 4 altípus szelektívnek bizonyult.

Közös publikációk száma: 1 előkészületben

Téma: Psychology of tightness and looseness: Psychology in the street

Együttműködő partnerintézmény: University of Maryland, USA és Jacobs University, Bréma, Németország

Egyezmény neve: tudományos együttműködés

Eredmények: Megtörtént az adatgyűjtés. Ez részben megfigyelésekből állt (különböző nyilvános helyeken való viselkedés pl. könyvtár, vonatállomás, parkoló, üzletrészben olyan kísérletekből állt, amelyek normaáthágást jelentenek. Vizsgálták az utóbbiakra történő reakciókat.

Téma: Body image, appearance and self-presentation in the workplace: advantages and discrimination for embodied workers

Egyezmény neve: COST Action no. IS1210. Appearance Matters.

Eredmények: Az együttműködés decemberben indult, még a közös elméleti háttér kidolgozása van folyamatban.

Téma: Consumer Culture Values, Identity Processes, Mindfulness, and Well-being.

Együttműködő partnerintézmény: University of Sussex, Anglia

Egyezmény neve: Culture and Identity Research Network

Eredmények: A vizsgálat előkészítése folyik, a kérdőíveket fordították le.

IV. A 2014-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Pályázat: Nemzeti Agykutatási Program, „A” alprogram, IV. pillér (KTIA_13_NAP-A-IV/1)

Pályázati téma: MEMS érzékelők és beavatkozók vizsgálata agykutatási célokra.

A pályázati támogatás mértéke összesen: 60 M Ft, 2014-ben: 15 M Ft

A pályázat keretében 2014-ben végzett munka fontosabb eredményei:

A pályázat keretében új szilícium és polimer alapú agyi multielektrodokat fejlesztettek ki. Megvalósították a kifejlesztett eszközök integrálását a meglévő mérési környezethez. A meglévő eszközök impedanciájának csökkentését platina elektrolitikus leválasztásával valósították meg.

Pályázat: OTKA (K-112138)

Pályázati téma: Kutya és ember társas kognitív mechanizmusainak összehasonlító vizsgálata új módszerekkel

A pályázati támogatás mértéke összesen: 25,5 M Ft, 2014-ben: 0 Ft

A kutatás kezdő időpontja 2015.01.01.

Pályázat: OTKA (K-111789)

A pályázati téma megnevezése: The individual, situational and sociocultural determinants of psychologically and somatically healthy competition

A pályázati támogatás mértéke összesen: 40,6 M Ft, 2014-ben: 0 Ft

A kutatás kezdő időpontja 2015.01.01.

V. A 2014-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Kocsis Z, Winkler I, Szalárdy O, Bendixen A: Effects of multiple congruent cues on concurrent sound segregation during passive and active listening: An event-related potential (ERP) study. *Biological Psychology*, 100:20-33 (2014) <http://real.mtak.hu/12984>
2. Czigler I, Sulykos I, Kecskes-Kovacs K: Asymmetry of automatic change detection shown by the visual mismatch negativity: An additional feature is identified faster than missing features. *Cognitive Affective and Behavioral Neuroscience*, 14(1):278-285 (2014) <http://real.mtak.hu/19580/>
3. Horváth J: Probing the sensory effects of involuntary attention change by ERPs to auditory transients. *Psychophysiology*, 51(5):489-497 (2014) <http://real.mtak.hu/12933/>
4. Tóth B, Kardos Zs, File B, Boha R, Stam CJ, Molnár M: Frontal midline theta connectivity is related to efficiency of WM maintenance and is affected by aging. *Neurobiology of Learning and Memory*, 114:58-69 (2014) <http://real.mtak.hu/12910>
5. Márton G, Bakos I, Fekete Z, Ulbert I, Pongrácz A: Durability of high surface area platinum deposits on microelectrode arrays for acute neural recordings. *Journal of Materials Science-Materials in Medicine*, 25(3):931-940 (2014) <http://real.mtak.hu/10814/>
6. Keller CJ, Honey CJ, Entz L, Bickel S, Groppe DM, Toth E et al. (3, Ulbert I): Corticocortical evoked potentials reveal projectors and integrators in human brain networks. *Journal of Neuroscience*, 34(27):9152-9163 (2014) <http://real.mtak.hu/18752/>

7. Héja L: Astrocytic target mechanisms in epilepsy. *Current Medicinal Chemistry*, 21(6):755-763 (2014) <http://real.mtak.hu/11268/>
8. Kis A, Szakadát S, Kovács E, Gácsi M, Simor P, Gombos F et al. (3, Topál J): Development of a non-invasive polysomnography technique for dogs (*Canis familiaris*). *Physiology and Behavior*, 130:149-156 (2014) <http://real.mtak.hu/13152>
9. Andics A, Gácsi M, Faragó T, Kis A, Miklósi Á: Voice-sensitive regions in the dog and human brain are revealed by comparative fMRI. *Current Biology*, 24(5):574-578 (2014) <http://real.mtak.hu/21011/>
10. Becker M, Vignoles VL, Owe E, Easterbrook M, Brown R, Fülöp M, et al.: Cultural bases for self-evaluation: seeing oneself positively in different cultural contexts. *Personality and Social Psychology Bulletin*, 40(5):657-675 (2014) <http://real.mtak.hu/10268>
11. Forgas JP, Vincze O, László J (szerk.): *Social Cognition and Communication*. New York: Psychology Press, 368 (2014) (Sydney Symposium for Social Psychology, ISBN:978-1-84872-664-2, 978-1-84872-663-5) <http://real.mtak.hu/20194>

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/

I. A kutatóhely fő feladatai 2014-ben

2014-ben az intézet fő feladata továbbra is a nanoméretű funkcionális anyagok kutatása volt, mely során azok fizikai, kémiai és biológiai tulajdonságainak feltárását, valamint az ismeretek hasznosítása integrált nano/mikroeszközökben, szenzorokban és roncsolásmentes vizsgálati módszerek fejlesztését végezték.

A TTK központi rendelkezése értelmében az MFA-ban is átnevezték a kutatási egységeket kutatócsoportokra. A szervezeti sémát a korábbi 5 tudományos osztály mellett a Nanobioszenzorika Lendület kutatócsoporttal, mint önálló kutatási egységgel egészítették ki. Júliustól egy második 2D Nanoszerkezetek Lendület csoport is megkezdte működését az intézetben. Valamennyi kutatócsoport vezető vállalta szakmai felelőssége mellett az önálló anyagi gazdálkodási felelősséget is a kritikusan alulfinanszírozott mikroelektronikai terület (45 fő) vezetőjén kívül. Ezért utóbbtól a főigazgató megvonta vezetői pótlékját. Sajnos a beígért csoportszintű, aktualizált, pontos gazdasági kimutatások előállítására gyakorlatilag végig nem működött, ezen az MFA-nak szentelt kiemelt figyelem, a főigazgató által elrendelt belső ellenőrzés és a több hetes személyes kitelepülés sem segített. Csak szeptembertől látszott a központi adminisztrációban némi elmozdulás, ezért az MFA-ban továbbra is igyekeztek a korábbi, intézeti szintű koordinációban működni.

Az MFA harmadik éve nem tud az 1 Mrd Ft környéki alacsony bevételi szintről elmozdulni, ami az intézetközpontra szervezés előtt 1,5-1,8-szorosa volt a mai gazdálkodási teljesítménynek. Gazdálkodásukban a legkritikusabb a finanszírozó állami szervek szerződéses kötelezettségvállalásának akut nem teljesítése volt és maradt. Az ütemes teljesítés ellenére, amit a TTK-nak kellett előfinanszíroznia, a projektfinanszírozás esetenként több éves lemaradást mutat. Év végére ez az MFA esetében csaknem 300 milliós hazai állami K+F finanszírozói tartozást jelentett, ami a mai napig fennáll! Ez folyamatos beszerzés-visszatartást, személyi kifizetés csökkentést és rengeteg felesleges idegmunkát involvál, nem beszélve a kutatói motiváció tönkretételéről. A ciklusváltás az EU-ban, valamint a hazai kutatásfinanszírozás elhúzódó átszervezése - a maximális takarékoság mellett is - máig tartó csőd közeli helyzetet eredményezett.

Ennek ellenére születtek kimagasló szakmai teljesítmények az intézetben: a már említett új Lendület csoport indításán túl a grafén-kutatásban ez évben jelent meg az MFA első Nature publikációja. Munkatársaik elnyerték az MTA szabadalmi nívódíját, egy Akadémiai Ifjúsági Díjat, egy EUROSENSORS Fellow díjat, egy megyei Prima Díjat és számos egyéb kitüntetést. Egy kollégájukat a Magyar Művészeti Akadémia rendes tagjává választotta. Tudományos minősítés terén 4 intézetből indult MTA doktora cím és két PhD fokozatszerzés történt. Az MFA-team bekerült a Grafén Flagship Projektbe, egy ERANET egy EUREKA és egy ENIAC pályázatba. A gazdálkodási megszorítások ellenére megrendezték a REM konferenciát Budapesten, megszervezték az MFA-Napot, a középiskolás nyári tábort 25 Kárpát-medencei diák részvételével, kiosztották az MFA Díjakat, támogatták az Arany János Általános Iskola és Gimnáziumot és sikerült megmenteniük a Nanobuszt, ami metamorfózis után immár Sokszinű Fizika néven járja az országot.

Az MTA új vezetői kollégiumának júliusban megszületett döntése nyomán az MFA 2015. január 1-től kivált a TTK-ból és az MTA Energiakutató Központ részeként működik tovább.

II. A 2014-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

A *Nanoszerkezetek Kutatócsoport* és az azon belül alakult *2D Nanoelektronika "Lendület" Kutatócsoport* főként a 2D anyagok elektronszerkezetével kapcsolatos kutatásokra koncentrált. *Legjelentősebb eredményüket a Nature folyóiratban publikálták.* A világon először munkálták meg közel atomi pontossággal a kémiai leválasztás módszerével előállított (CVD) egyetlen atom vastag grafén lemezt meghatározott kristálytani irányok szerint. Kísérletileg jellemezték az így kialakított néhány nanométer széles szalagok elektronikus tulajdonságait és elméleti modellezéssel alátámasztva az eredményeket, elsőként igazoltak egy több mint 20 éves jóslatot, amely szerint a nem mágneses grafén, mágnesesen polarizált él-állapotokra tehet szert, ha megadott kristálytani irányok szerint, atomi pontosságú éleket alakítanak ki benne. Kísérletileg megmutatták, hogy a karosszék élű grafén nanoszalagok a tiltott sávjuk szerint valóban az elmélet által megjósolt három csoportba sorolhatók, míg a cikkcakk élű nanoszalagok, ha 7 nanométernél keskenyebbek, antiferromágnesesen rendezett élek alakulnak ki bennük és tiltott sáv jellemzi az elektronszerkezetüket. Ha ennél szélesebbek, akkor az élek ferromágneses rendeződést mutatnak és a szalagban nem jelentkezik tiltott sáv. A mágnesesen rendezett élű grafén szalagok alkalmasak lehetnek elektromos térrel vezérelhető spintronikai eszközök kifejlesztésére.

Kimutatták, hogy a kémiai úton leválasztott (CVD) grafén szemcséi közötti szemcsehatárok szerkezetük szerint lehetnek: egyenesek és rendezettek, rendezettek és „kígyózók”, illetve rendezetlenek, ez utóbbiakban nem marad meg a szénatomok hármasszög koordinációja. Az első két típus hasonló módon befolyásolja az elektronok áthaladását, ezzel szemben a rendezetlen szemcsehatárok drasztikusan kisebb elektron-transzmisszióval rendelkeznek a bennük előforduló kettős koordinációjú szénatomok miatt. A szemcsehatárok pontos ismerete meghatározó jelentőségű a CVD grafén gyakorlati alkalmazása szempontjából.

Az egyetlen atom vastag grafén lemez elektronikus tulajdonságai hangolhatók a rétegben fellépő mechanikai feszültség által. Megmutatták, hogy a grafén hullámossága és a réteg feszültsége kontrollált módon befolyásolható, ha a grafén réteget nanorészecskékből álló rétegre helyezik át. A hullámosság és a feszültség tovább alakítható hőkezelések alkalmazásával.

A biológiai eredetű és bioinspirált fotonikus nanoarchitektúrák kémiaiileg szelektív gőz-érzékelésre való alkalmazása során először mutatták meg, hogy az optikai válaszjel függ a szenzorként alkalmazott lepkeszárny hőmérsékletétől, illetve a szárnyfelszín atomi rétegleválasztással (ALD) történő módosításától. Először mutatták ki, hogy a lepkék szín-ingerterében kiértékelve kilenc testanyag jelleggörbéit, az anyag-specifikus trajektóriák majdnem egybevágnak egy tisztán matematika módszer, a főkomponens analízis módszer által adott eredményekkel. Az eredmények új lehetőségeket nyitnak a kis fogyasztású, „viselhető” szenzorok kialakítása felé.

A *Mikrotechnológiai Kutatócsoport* fő feladata multidiszciplináris szenzorkutatás, új érzékelési elveken alapuló funkcionális nano- és mikroérzékelők megvalósítása, validálása és a kapcsolódó technológiák kidolgozása. A kutatómunka technológiai tisztaterekben, szerelő és mérő-, minősítő laborokban folyik. Fontos feladatuk a KKV-k és az egyetemi oktatás segítése,

a kutatási infrastruktúra felhasználása szakmai gyakorlatok, önálló laborfeladatok, BSc és MSc diplomamunkák támogatására Open Access Laboratory jelleggel.

A mikro-elektromechanikai érzékelők (MEMS) kutatása:

- Az INCITE Eniac projekt (2014-2017) keretében minimálinvazív beavatkozást lehetővé tevő sebészeti robotok érzékelési tulajdonságainak fejlesztése, mikro erőmérő szenzorok kutatása és alkalmazása a testbe behatoló endoszkópos műszerek megfelelő helyein.
- Hazai KMR projekt keretében ipari partnerekkel közösen egy új mérési eljárást dolgoztak ki talajvízben oldott szénhidrogének, elsősorban benzin és gázolaj 100 ppm alatti koncentrációjának kimutatására és folyamatos monitorozására. A mérőberendezés tesztpédányait sikeresen telepítették ipari környezetben, mérő kutakban.
- A General Electric vezette, lezárult KMR projekt keretében energiapozitív, intelligens LED világítótesteket, napelemparkot, energiataroló akkumulátorokat, időjárásállomást és felhő alapú számítógépes vezérlést tartalmazó közvilágítási rendszer kifejlesztésében és megvalósításában vettek részt a csillebérci telephelyen.

Mikrofluidikai szerkezetek kutatása és bioszenzorika (BioMEMS):

- Új, SU8 polimerben, ionsugaras direkt írással kialakított 3D mikrostruktúrák hatását vizsgálták vérben keringő tumorsejtek megkötésére, kiszűrésére (OTKA CK 83821).
- Végeselem szimulációkkal optimalizálták a megfelelő keverőstruktúrák kialakítását mikrofluidikai csatornáknak.
- Kapilláris erőkkel működő folyadéktovábbító struktúrákat hoztak létre és optimalizáltak mikrofluidikai környezetben.
- Polimer-mikrofluidikai csatornarendszerbe integrálható plazmakeltésre alkalmas struktúrákat fejlesztettek ki. A plazma bekapcsolásával lokálisan, tervezett módon változtatják csatornafalak hidrofil/hidrofób tulajdonságait. Igazolták, hogy a lokális plazmakeltés innovatív alkalmazása lehet a Lab-on-a-chip környezetben egy miniatűr emissziós spektrométer.

Mikroelektróda rendszerek idegtudományi (NeuroMEMS) alkalmazásra:

- Optogenetikai kutatásokhoz létrehoztak egy olyan mélyagyi Si-elektróda struktúrát, amivel nem csak a lokális idegszöveti elektromos aktivitás vizsgálata, hanem a becsatolt fényvel lokális optikai gerjesztés is megvalósítható.
- Az agykérgi idegi funkciókhoz vizsgálatokhoz polimer alapú flexibilis elektródarendszert dolgoztak ki, működését kooperáció keretében validálták.

Nano-elektromechanikai (NEMS) eszközök:

- ZnO nanoszál alapú, nagysűrűségű 3D újlenyomat érzékelők kutatása során a PIEZOMAT FP7 projekt keretében vizsgálták a CVD eljárással kialakított hordozóréteg szerkezetének hatását a nanométeres kristálystruktúrák morfológiájára a hidrotermális ZnO növesztésben.
- ZnO nanoszálakból mechanikailag vezérelhető vékonyréteg tranzisztor szerkezeteket hoztak létre, és analizálták fizikai és elektromos tulajdonságaikat.
- Egyedi TiO₂ nanoszálak kontaktálásának technológiai megoldását dolgozták ki, amivel mérhetővé tették az alacsony dimenziójú, egyetlen nanoszál szerkezet elektromos viselkedését. Ez a lépés utat nyit a nanoszálak szenzorikai alkalmazása felé.

A *Fotonikai Kutatócsoport* elsősorban roncsolásmentes mágneses és optikai (ellipszometria) anyagvizsgálati módszerek fejlesztésével, kolloidkémiai úton előállított nanorészecskék plazmonikai tulajdonságainak kutatásával és alkalmazásával kapcsolatos feladatok megoldására fókuszál.

- Nagy szilárdságú, többes fázisú ún. TRIP (transformation-induced-plasticity) acélok vizsgálatával roncsolásmentes mágneses mérés technikával (Magnetic Adaptive Testing,

MAT) jó korrelációt mutattak ki a mechanikai keményedés és a mágneses paraméterek között, azaz a roncsolásmentes módszerükkel jól nyomon követhető az anyag kifáradása. A módszerrel ciklikus mechanikai igénybevételnek kitett alacsony széntartalmú, grafitnal adalékolt acél kifáradását is vizsgálták és jó egyezést kaptak a mágneses paraméterek és a mintadarab várható élettartama között.

- Az EU FP7-es (Ultra-versatile Nanoparticle Integration into Organized Nanoclusters, UNION) projekt keretében gömb alakú, valamint alak és felületi kémia anizometriával rendelkező nanorészecskék kontrollált aggregációját vizsgálták előre meghatározott konfiguráció szerinti összekapcsolódás elérése céljából. A funkcionálizálható arany nanostruktúrák és Stöber szilika részecskék rendezett filmjei fehérjemegkötés szempontjából és plazmontulajdonságainak köszönhetően lesznek előnyösek szenzorikai, illetve optoelektronikai alkalmazásokban.
- Plazmonikus hibrid napelemekben a nanostrukturált hátsó elektródán létrejövő intenzív közelteret használták hibrid napelem szerves komponense fényelnyelésének fokozására kínai és ukrán együttműködésben.
- Fotonikai szerkezetek karakterisztikus méret-meghatározására is igazolták az elmúlt években tökéletesített, spektrális abszorpción alapuló ellipszométeres mélységi profilírozás alkalmasságát megfelelő optikai modellek alkalmazásával.
- Ellipszometriai megoldások integrálásával az ún. „Fourier scatterometry” továbbfejlesztésére tettek javaslatot. A fázisinformáció kinyerése nagyban növelné a módszer felbontóképességét és pontosságát.
- A pontforrásból pin-hole kamerába leképező, nemzetközi szabadalmakkal védett szélesszögű, térképező spektroszkópiai ellipszométerük témájában sikerrel zárult a KMR-12 „Ipari méretű vékonyréteg optikai térképezésre szolgáló berendezés fejlesztése” című projektjük.
- Folytatták a 2 EU-s („SEA4KET” és ENIAC-2012-2 “E450DL”) projektet nagy nemzetközi konzorciumokban és megépítették a 2 pontforrásból pin-hole kamerába képező szélesszögű, térképező spektroszkópiai ellipszométer egy-egy prototípusát 45-60 cm-es és 60-90 cm-es mintákhoz. Az eredményekről egy év leforgása alatt 6 meghívott előadást tartottak rangos nemzetközi konferenciákon.

Az intézetben kifejlesztett, nemzetközi szabadalmakkal védett szélesszögű ellipszométer fejlesztéséért a kutatócsoport vezetőjét 2014-ben Akadémiai Szabadalmi Nívódíjjal jutalmazták.

A Komplex Rendszerek Kutatócsoport fő kutatási területe a nem-egyensúlyi rendszerek statisztikus fizikai elemzése. A legeredményesebb kutatási témák a sokszereplős evolúciós játékelméleti modellek köré csoportosíthatók.

- Az evolúciós potenciáljátékok terén a potenciál származtatásával kapcsolatos vizsgálataik kiderítették, hogy a 2×2 -es ill. 3×3 -as nyereménymátrixszal leírt kölcsönhatások tulajdonságaik alapján négy osztályba sorolható elemi összetevőkre bonthatók. Három elemi játéksaládnál könnyű meghatározni a potenciált, a negyedik osztályba tartozó ciklikus játékok megakadályozzák a potenciál létezését. A *ciklikus játékok* (pl. kő-papír-olló vagy érmepárosítás) korábban felszínre került tulajdonságairól összefoglalót írtak.
- Felismerték, hogy a sztochasztikus szinkronizált stratégia-frissítés (térbeli ciklikus kölcsönhatás mellett) eddig nem tanulmányozott, oszcilláló mintázatképződéseket képes leírni. Bonyolultabb mintázatképződés jellemzi ugyanezt a modellt, ha kő-papír-olló játékkal írják le a kölcsönhatást. A megfigyelt jelenségek értelmezését nagymértékben segítették az Ising-modellek és a stratégiatársulások tanulmányozásában megszerzett korábbi tapasztalatok.

- Rámutatottak, hogy a dinamikai folyamatok statisztikus fizikai vizsgálata véletlen gráfokon érdemben hasznosítható az agy kutatásban, ill. a társadalmi és biológiai jelenségek értelmezésénél. A lassan csillapodó (Griffiths fázis) ill. villanásos jelenségeknél így tisztázható a hálózat topológiai tulajdonságainak a hatása.
- Népzenei elemzések egyre jobban összefonódnak a genetikai és nyelvi rokonság számszerű elemzésével. Új elem a teljes dallamtér legjellegzetesebb dallamai eloszlásának/átfedésének vizsgálata a zenei ősnyelv azonosítására és az ennek alapján kibontakozó rokonság kimutatására.

A Vékonyrétegfizikai Kutatócsoport három fő tradicionális kutatási területe:

1. a polikristályos rétegek szerkezetének kialakulása, melyhez modelleket alkotnak, ismereteiket a kis súrlódású és kopásálló anyagok, kemény bevonatok, mágneses rétegek, kerámiák, biokompatibilis implantátumok és nanokompozit anyagok területén hasznosítják;
 2. a félvezető rétegek, heteroátmenetek és kontaktusaik kutatása;
 3. a főként elektron diffrakción alapuló metodikai fejlesztések.
- Magnetron porlasztással előállított $Ti_{0,41}Al_{0,57}Y_{0,02}N$ ötvözet bevonatokban egyidejűleg van jelen a köbös c-TiN és a hexagonális w-AlN fázis, és a növekedés folyamán egy bizonyos rétegvastagságnál mind az oszlopok dőlésszöge, mind a textúra jellege annak ellenére megváltozik, hogy a Ti/Al arány állandó értéken marad. A Ti(Al)N <001> textúra eltűnik, és határozottá válik a c-Ti(Al)N<111> textúra, az oszlopok pedig kidőlnek a gözsugár irányába. Ez az adatok erősen korlátozott mozgékonyágával értelmezhető a w-Al(Ti)N epitaxiális nanokompozit felületén.
 - Megállapították, hogy a 10-30 at% Mn tartalmú Cu-Mn ötvözetrétegek fizikai tulajdonságaikban megfelelnek az IC alkalmazás legfontosabb követelményeinek: termikusan stabilak 300°C-ig, keménységük mintegy 9 GPa. Ugyanakkor a barrier réteg spontán kialakulása magasabb Mn tartalomnál előnyösebb.
 - Orvosi implantátumok felületi tulajdonságait módosították és vizsgálták a TiC réteggel bevont Ti6Al4V és CoCrMo implantátum anyagok korrózióállóságát. Ismét kimutatták, hogy a tojáshejéből előállított nanoszerkezetű HAp (hidroxipatit) jobb csontpótló anyag, mint a kagylóhéjból készített.
 - Nanométeres mintázatú mágneses adathordozókhoz nanokristályos tartalmú amorf alumínium-oxid rétegeket állítottak elő, majd mintáztak meg impulzusüzemű excimer lézerrel. Szilika nanogömbök Langmuir-Blodgett (LB) filmjében az egyedi gömblencsék fókuszálták a lézer fényét, ezzel szabályos nanogödör-hálózat alakítható ki a mintázandó felületen.
 - Hordozóra helyezett grafén jelentős geometriai torzulást szenved, ami moiré-szuperrácsok kialakulásához vezet. Atomi szintű szimulációkkal igazolták, hogy a megfigyelt 1,5 nm periodicitás 10 fokos elfordulási szögnek felel meg és megmutatták, hogy a grafén a Cu(111) felületen milyen rotációs szögnél tud kisimulni.
 - Az Auger-laborban a néhány rétegű grafén vastagságának mérésére dolgoztak ki módszert a hordozó jelének mérésének és csillapodásának figyelembevételével.
 - Továbbfejlesztették szemcsehatárok HRTEM vizsgálatára írt szoftverüket, amely már alkalmas a szemcsehatárok vetületének meghatározására.
 - Vízepergető szililezett bevonatokat fejlesztettek, amik kiválóan bizonyultak fémek korrózió védelmére.
 - Szén nanocsövekkel adagolt Si_3N_4 kompozitot ultra-kisszögű neutronsórással vizsgálva direkt visszacsatolást nyertek a különböző szinterelési módszerek hatásáról a nanoszerkezetek eloszlására.

- A nagyteljesítményű GaN elektronikához jó hővezetésű rétegek kellenek. Ezért kidolgozták az eszközökre utólag CVD-vel növesztett gyémánt technológiát, és megmutatták, hogy elektronsugárral mintázott grafén/SiC hordozóra lehet jó minőségű nitrid tranzisztor szerkezetet növeszteni.
- Nikkel indukált amorf szilícium kristályosodásánál megfigyelték, hogy az első növekedési front előtt is kialakultak NiSi₂ szemcsék. Ez bizonyítja, hogy a NiSi₂ fázis kristályosodása egy kritikus Ni koncentráció elérése után indul meg.
- Módszert dolgoztak ki, amely szétválasztja az elektron diffrakció inkoherens járulékait.

Nanobioszenzorika Lendület I. Kutatócsoport kutatási profilja jelölésmentes optikai bioszenzorok kutatás-fejlesztése és alkalmazása, a vizsgált biológiai-biofizikai folyamatok modellezése széleskörű hazai és nemzetközi együttműködésben. Kutatásaik több vonalon folynak: műszeres fejlesztés, sejtek által termelt mikrovezikulák monitorozása, flagellin alapú funkcionális rétegek fejlesztése, emberi eredetű rákos és immunsejtek adhéziós vizsgálatai, elméleti modellfejlesztés. A csoport 2012 júliusában alakult, 2014-ben Lendület jelentésüket mindegyik bíráló, „kiváló” minősítésűre értékelte.

- Az Epic BenchTop (Epic BT) nagy áteresztőképességű jelölésmentes optikai bioszenzor érzékenységét vizsgálták a Corninggal együttműködésben, a módszert komplementer technikák segítségével kalibrálták be.
- HeLa sejteken elvégzett adhéziós vizsgálatokkal élő sejtek kitapadását monitorozzák nagy pontosságú, zajmentes kinetikai méréssel, ami nemzetközi újdonság, új irányt jelöl ki a jelölésmentes bioszenzorikában.
- A világon elsőként rögzítették a kitapadási dinamikának az integrin ligandumok felületi távolságától való függését 10-100 nm-es távolságskálán (teljes letapadás- nincs kitapadás).
- Úttörő eredményük az integrin és liganduma kötési erősségének az élő sejten belüli meghatározása invazív hatások teljes kiiktatása mellett.
- A szenzorfejlesztés és a hozzá tartozó mikrofluidikai rendszerek kialakítása területén kiemelkedő eredményük a kétoldalas ragasztó-bázisú, lézer megmunkálással kapott olcsó és gyors előállítású mikrofluidikai eszköz transzparens elő-és hátlappal.
- A rákos sejtek, illetve az emberi monociták kitapadásának nagy pontosságú kvantitatív karakterizálása nemzetközileg is új eredményekre vezetett, mivel a sejtek kitapadása nagy fontossággal bír a rákos góccok terjedésében és a megfelelő immunválasz kialakításában is. Eredményeik alkalmazásra találhatnak a gyógyászatban, betegségek gyors és hatékony kimutatásában, újszerű sejtadhéziót gátló vagy elősegítő hatóanyagok kifejlesztésében.
- Új kutatási irány az *egyedi sejtek analízise*, ami jelenleg még beláthatatlan, új távlatokkal gazdagíthatja a biológiai és orvosi kutatásokat elősegítve pl. a tumoros elváltozások hatékonyabb kezelését is.

2014-ben a kutatócsoport vezetőjének ERC Consolidator Grant pályázata “támogatható” A kategóriába került, de forráshiány miatt nem nyert támogatást Brüsszelben.

b) Tudomány és társadalom

Az utánpótlás biztosítása érdekében egyetemi oktatásban való személyes részvétel mellett

- Az MFA 2014-ben is megrendezte 25 Kárpát-medencei magyar középiskolás kisdíjakkal immár hetedik 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.
- A Nyári iskola egyik diákja Gréczi László Ádám még 2014-ben a NOVOFER Alapítvány Gábor Dénes Ösztöndíjában részesült, egy másik diákja a B. Kiss Bálint a Magyar Innovációs Szövetség versenyén ért el első helyet.

- Az MFA által létrehozott Nanobusz 2013 végétől Sokszínű Fizika busz néven működik. 2014-ben számos helyszínen szerepelt óriási sikerrel a tudomány népszerűsítésben és ismeretterjesztésben. A buszt és kísérő előadásait több mint 1000 diák látogatta meg.
- Az MFA Nyílt Napok az érdeklődő adófizetőknek biztosítanak lehetőséget az intézet kutatómunkájába való betekintésre.
- Második alkalommal kapcsolódott be az MFA 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 elérhető a Web-Schöninger nevű, Interneten át használható HCSD szimulációs programcsomag, aminek oktatási célokra való felhasználása ingyenes.
- A www.nanobiosensors.com oldalon a nanoméretű (biológiai) objektumok optikai label-free érzékelésének fejlesztéséről kapnak információt a látogatók.
- Az intézet kutatási eredményeit az év során négy kommunikációban ismertették az MTA honlapján és egyéb sajtóorgánumokban tekintélyes visszhanggal.
- 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.
- Az MFA külső finanszírozás nélkül fenntartotta és működtette az Integrált Mikro/Nanorendszerek Nemzeti Technológiai Platform (IMNTP) irodáját a szakmai közvélemény tájékoztatására, ill. pályázati tevékenysége összehangolására.
- Folyatódta a középiskolákban az evolúciós játékelméletet és a fotonikus nanoszerkezeteket bemutató ismeretterjesztő előadások.
- Hódmezővásárhelyen a Németh László Gimnáziumban akadémikusunkról Gyulai Józsefről elnevezett korszerű természettudományos labort alakítottak ki.
- A Sashegyi Arany János Általános Iskola és Gimnázium részére adományoztak és beüzemelték egy pásztázó elektronmikroszkópot, és előadásokat tartottak az intézményben.

Szabadalmak

2014-ben megadott hazai szabadalmak:

1. „Pinhole kamerát alkalmazó leképző optikai vizsgáló berendezés (reflektométer, polariméter, ellipszométer)” Horváth Zoltán György, Juhász György, Fried Miklós, Major Csaba, Petrik Péter, Lajstromszám: 229699, Ügyszám: P0700366, Benyújtás éve: 2007., Közzététel éve: 2014
2. “Mérési elrendezés és eljárás vízfelületen megjelenő folyékony szénhidrogén-származékok detektálására” Serényi Miklós, Makai János, Bársony István, Kulinyi Sándor: NSZO: G01N 21/41, G01N 21/00, G01N 21/55, G01N 21/88, G01N 33/18 Lajstromszám: 229751, Ügyszám: P0800190, Benyújtás éve: 2008. Közzététel éve: 2014

2014-ben megadott nemzetközi szabadalom:

„Imaging optical inspection setup and method for inspecting a planar reflecting surface of a sample” Horváth Zoltán György, Juhász György, Fried Miklós, Major Csaba, Petrik Péter
 NSZO: G01N21/00, G01N21/55, Patent ID: 5472096, Reference number: PCT/HU2008/000058, Year of submission: 2008. Reference number of submission: JP-2010-508914. Publication year: 2014, Submitted to: Japan

2014-ben megadott értékesített szabadalom (licence átadás): -

2014-ben bejelentett hazai szabadalom:

1. Sáfrán György, Tóth Attila Lajos, Illés Levente: „*Mikrostély* tartó transzmissziós elektronmikroszkópos minták fókuszált ionsugaras megmunkálására” c. szabadalmi bejelentés (P1000683)
2. Márton Gergely, Fekete Zoltán, Kiss Marcell, Ulbert István, Pongrácz Anita: „Kombinált elektródrendszerrel kialakított berendezés és eljárás sejten belüli és sejten kívüli potenciálváltozások érzékelésére” c. szabadalmi bejelentés (P1400148)

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2014-ben

Hazai kapcsolatok

Az MFA oktatási kapcsolatainak eredményessége:

Az MFA-ban hat emeritus és egy 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, ill. tőrsztagjai. 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 2014-ben ketten szereztek PhD fokozatot. 2014-ben 38 PhD ösztöndíjas hallgató, illetve MTA fiatal kutatói álláshelyen foglalkoztatott fiatal folytatta PhD kutatásait az MFA-ban. További 24 MSc és 18 BSc dolgozat, valamint 10 TDK munka témavezetését is vállalták. Diákjaik 2014-ben három TDK első helyet (egyikük ehhez kapcsolódóan a Pro Progressio Alapítvány különdíját is elhozta), továbbá két 2. helyet is elnyertek. Valamennyien bejutottak az OTDK versenyére. Rajtuk kívül munkatársaik 6 középiskolás diákot mentoráltak és készítettek fel tudományos és innovációs versenyekre.

A Várpalotai Képesség- és Tehetségfejlesztő Magániskola tanulója, az MFA Nyári iskola korábbi diákja "Apa Board ARM mikroprocesszor kísérletező és tanulási eszköz" munkájával megnyerte a Magyar Innovációs Szövetség ifjúsági versenyét, és részt vehetett a "26. EU Contest for Young Scientists" versenyen. Több előadást tartott és rádió illetve TV megjelenése volt.

A beszámolási évben egy aktív és 3 korábbi munkatársuk védte meg MTA doktora címét. Ezzel az MFA munkatársak minősítettsége kiemelkedő szintet ért el. Egyik munkatársukat a Magyar Művészeti Akadémia rendes tagjává választotta.

Részvétel a hazai tudományos közéletben:

Az MFA kutatói adtak két aktív MTA levelező tagot, két fő MTA doktorképviselőt, egy-egy tagot a Matematikai és Természettudományi Szakbizottságban; májusig az MTA Vagyonkezelő Testületben. Az MFA munkatársai közül kerül ki az MTA Elektronikai Eszközök és Technológiai Bizottság elnöke és 7 tagja, az MTA Szilárdtestfizikai Bizottság négy tagja, az MTA Anyagtudományi és Technológiai Bizottság 3 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 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 Loránd Fizikai Társulat Felügyelő Bizottság tag
Eötvös Loránd Fizikai Társulat Vákuumfizikai technológiai és Alkalmazásai Szakcsoportban tag, vezetőségi tag és elnök
Eötvös Loránd 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 több tagja, elnökségi tagja és titkára
Magyar Biofizikai Társaság vezetőségi tagja
Magyar Elektronmikroszkópos Társaság Kuratórium, titkár
Magyar Mikroszkópos Társaság elnöke.
Magyar Innovációs Szövetség választmányának tagja
Magyar Mérnökakadémia két tagja
Magyar Mikroszkópos Társaság, több tagja, két vezetőségi tagja és az elnöke
Magyar Művészeti Akadémia Népművészeti Kollégium – kollégiumi tag.
Magyar Nemzeti Bank – MNB Értéktörvények 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 két tagja
MTA Elektronikus Eszközök és Technológiák Bizottságának több tagja és elnöke
MTA Felületkémiai és Nanoszerkezetek Munkabizottság, több tagja és titkára
MTA Felületkémiai és Nanoszerkezeti Munkabizottság, tag
MTA Fizikai Osztály Doktori Bizottság, elnökhelyettes és 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 Zsúri elnök
OTKA Informatikai és Villamosmérnöki zsúri, tag
OTKA képviselője a Materials-ERA-NET Steering Board-ban
OTKA Kollégium tagja
Pannon Egyetem Egyetemi Doktori és Habilitációs Tanács tagja
Pannon Egyetem Kari Tanács tagja
Pannon Egyetem MIK Molekuláris- és Nanotechnológiai Doktori Iskola törzstagja és vezetője
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
Doktoranduszok Országos Szövetsége, Biológiai és Kémiai Tudományok Osztálya, tag
Koreai-Magyar Társaság, tag
MAB Akkreditációs Látogató Bizottság (BME), tag
SZTE, Finomkerámia szakosztály, tag

Hazai konferencia szervezések:

Lányok Napja 2014? április 24., szervező
MECO 40 Konferencia, Esztergom szervezés
Magyar Mikroszkópos Társulat 2014-es Siófoki konferenciája, szervezőbizottsági tag
2014 KRCF-HAS International Workshop on Graphene and 2D Materials, Budapest, 2014 jún. 29-20, szervező
Műszaki Kémiai Napok 2014; Veszprém, 2014. május 14-16., szervező és elnök

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 Alaputatási Tudományos Tanács közötti egyezmény keretében;
Rendszeres munkakapcsolat a londoni Brown University-vel, Prof. Jeremy Ramsden, az MFA tanácsadója.
K+F együttműködés a svájci Creoptix S. A. céggel

Részvétel 2014-es nemzetközi konferenciák szervezésében:

European Microbeam Analysis Society 11th Regional Workshop (Leoben, Ausztria, 2014. szept. 21-24), International Scientific Committee
7th International Meeting on Recent Developments in the Study of Radiation Effects in Matter, 2014. július 9-12, <http://www.ionbeamcentre.co.uk/REM7/>, főszervező
16th International Conference on Thin Films (ICTF 16), Dubrovnik, 2014.10.13-16, International Organizing Committee tagok
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
Living Light 2014: Uniting biology and photonics -- A memorial meeting in honour of Prof Jean-Pol Vigneron, International Advisory Board tagja
THERMINIC 2014, Berlin– programbizottsági tag
EUROSENSORS 2014, Brescia, - programbizottsági tag, session chair
IEEE SENSORS 2014, Valencia – programbizottsági tag, session chair
SSL China 2014, Gunangzhou, session moderator
Workshop Ellipsometry 2014, a Programbizottság tagja

Részvétel 2015-ös és azt követő nemzetközi konferenciák előkészítésében:

EuroSIME 2015.04.19-22, Budapest, hazai szervező és chair
Transducers 2015, Anchorage - programbizottsági tag
EUROSENSORS 2016, Budapest – chairman, elnyert pályázat előkészítése
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/>
CompleNet 2015 New York, USA March 25-27, 2015 konferencia, programbizottsági tag
International Conference on Sensors and Networks (ICSN) 2015, Technical Program Committee Member

Külföldi céges együttműködések:

Tateyama Kagaku, Toyama, Japan
Creoptix GmbH (www.creoptix.com) – témavezető
Radosys
Rikola Ltd.
TOPTIKA (München)
MAHLE Motorkomponenten GmbH
Goodyear Co.
Philips Research

Intézményi együttműködések

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, IMTEK, a Max Planck és Fraunhofer intézetek sora, Akita Research Center, stb.) mellett 2014-ben is olyan ipari cégekkel dolgoztak együtt, mint THALES, Mahle, Philips Research, TOPTIKA, GE Hungary, Tateyama, Picosun Oy, Weszta-T, Semilab, BHE Bonn Hungary stb.

Az intézet a beszámolási évben egy-egy olasz, ukrán és japán MTA kétoldalú egyezményes kapcsolatot ápol. TÉT támogatással egy-egy kínai, görög, német, román és két-két francia és indiai kapcsolatuk volt.

Nemzetközi szervezeti, szerkesztőbizottsági tagságok

Nemzetközi folyóiratok szerkesztőbizottsági tagságai:

IEEE Sensors Journal, associate editor
PLoS ONE, associate editor
Nanopages, associate editor
Frontiers in Sensors, associate editor
Hindawi, Journal of Sensors (open access)
Open Engineering
„Anyagok világa” elektronikus folyóirat

Nemzetközi tagságok

European Microbeam Analysis Society, tagja és tiszteletbeli tagja
IUVSTA hazai képviselő, IUVSTA Nemz. Bizottság több tagja, a vékonyréteg divízió vezetőségének tagja, a Biointerfaces steering committee tagja, a Nanometer Structures Divízió delegáltja és a Nanoszerkezetek divízió magyar vezetője
EUROSENSORS International Steering Committee, tag
ENIAC Scientific Council, tag
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
American Ceramic Society, tag
European Ceramic Society, tag
European Physical Society, 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 és az International Steering Committee szavazó tagja.
IEEE tag
International Solid-state Lighting Alliance, Advisory Board tagja
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 2014-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Hazai pályázatok

1 új Lendület I. pályázat - *Újszerű 2D Anyagok Nanomegmunkálása*
OTKA: tárgyévből 4 nyertes pályázat, ebből kettő 2015-ben kezdődik
Bolyai Kutatói Ösztöndíjból összesen 7 fut 2014-ben, egy új nyertes
TÉT: 4 új nyertes TÉT (ebből 3 2015-ben indul) és 3 MTA bilaterális pályázat nyert

1 Medinprot témapályázat

Külföldi pályázatok

- 1 nyertes FP7 pályázat a Graphene Flagshiphez csatlakozott
- 1 ENIAC JTI nyert - Intelligens katéterek fejlett rendszerekben, műtéti beavatkozásokhoz (INCITE) vegyesen KTIA és ENIAC finanszírozással
- 1 M-ERA.NET - Grafén-kerámia kompozitok vizes közegű tribológiai alkalmazásokra (GRACE) – nemzetközi konzorcium OTKA finanszírozással
- 1 EUREKA - Új típusú integrált, széles körben használható légszennyezőanyag érzékelőtechnológia fejlesztése (PAMIAQ) nemzetközi projekt KTIA finanszírozással

Díjak, címek, fokozatok:

- Magyar Művészeti Akadémia rendes tag
- Pannon Egyetem Doctor Honoris Causa
- Akadémiai Szabadalmi Nívódíj
- Veszprém Megyei Prima Díj amagyar tudomány kategóriában
- MBFT érem a Magyar Biofizikai Társaságtól
- REM ezüst életmű emlékérem
- Eurosensors Fellow 2014
- “Excellence in Reviewing” elismerés a Physica A-tól
- “Outstanding Referee” cím az APS-től
- Applied Surface Science Outstanding Reviewer Award
- Ferenczi György Emlékdíj a "Félvezető mikrorendszerek és mikroszenzorok fejlesztéséért és alkalmazásáért – elsősorban biológiai és orvostudományi alkalmazásokra."
- ISA SSL „Global Showcase 100” díj a „LED lighting System For Plant Cultivation”-ért (MFA, megosztva a Tateyama Kagaku céggel és az MTA Agrártudományi Kutatóközponttal)
- MTA doktora cím, PhD fokozatszerzés
- Akadémiai Ifjúsági díj
- MTA Posztdoktori Támogatás
- Bolyai János Kutatói Ösztöndíj
- Oklevél a BME-től kiváló TDK témavezetői munkáért
- MFA Intézeti Díj
- MFA Ifjúsági Díj
- Kiváló Tudománytámogatásért - MFA Díj

V. A 2014-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Magda GZs, Jin XZ, Hagymási I, Vancsó P, Osváth Z, Nemes-Incze P, Hwang CY, Biro LP, Tapasztó L: Room-temperature magnetic order on zigzag edges of narrow graphene nanoribbons. Nature: International Weekly Journal of Science, 514: 608-611 (2014) <http://real.mtak.hu/17898>
2. Koos AA, Murdock AT, Nemes-Incze P, Nicholls RJ, Pollard AJ, Spencer SJ, Shard AG, Roy D, Biro LP, Grobert N: Effects of temperature and ammonia flow rate on the chemical vapour deposition growth of nitrogen-doped graphene. Physical Chemistry Chemical Physics, 16(36): 19446-19452 (2014) <http://real.mtak.hu/18896>
3. Szolnoki A: The power of games. Physics of Life Reviews, 11(4): 589-590 (2014) <http://real.mtak.hu/20113>

4. Orgovan N, Patko D, Hos C, Kurunczi S, Szabo B, Ramsden JJ, Horvath R: Sample handling in surface sensitive chemical and biological sensing: a practical review of basic fluidics and analyte transport. *Advances in Colloid and Interface Science*, 211: 1-16 (2014) <http://real.mtak.hu/14431>
5. Süle P, Szendró M, Hwang C, Tapasztó L: Rotation misorientated graphene moire superlattices on Cu(111): classical molecular dynamics simulations and scanning tunneling microscopy studies. *Carbon*, 77: 1082-1089 (2014) <http://real.mtak.hu/14393>
6. Orgovan N, Peter B, Bősze Sz, Ramsden JJ, Szabó B, Horvath R: Dependence of cancer cell adhesion kinetics on integrin ligand surface density measured by a high-throughput label-free resonant waveguide grating biosensor. *Scientific Reports*, 4: Paper 4034. 8 (2014) <http://real.mtak.hu/10797>
7. Fogarassy Zs, Rummeli MH, Gorantla S, Bachmatiuk A, Dobrik G, Kamarás K, Biró LP, Havancsák K, Lábár JL: Dominantly epitaxial growth of graphene on Ni (111) substrate. *Applied Surface Science*, 314: 490-499 (2014) <http://real.mtak.hu/14016>
8. L Kotis, S Gurban, B Pecz, M Menyhard, R Yakimova: Determination of the thickness distribution of a graphene layer grown on a 2" SiC wafer by means of Auger electron spectroscopy depth profiling. *Applied Surface Science*, 316: 301-307 (2014) <http://real.mtak.hu/14406>
9. Szabó Gy, Varga L, Borsos I: Evolutionary matching-pennies game on bipartite regular networks. *Physical Review E - Statistical, Nonlinear and Soft Matter Physics*, 89:(4) Paper 042820. 7 (2014) <http://real.mtak.hu/12719>
10. Oláh N, Veres M, Sulyok A, Menyhárd M, Gubicza J, Balázsi K: Examination of nanocrystalline TiC/amorphous C deposited thin films. *Journal of the European Ceramic Society*, 34(14): 3421-3425 (2014) <http://real.mtak.hu/9200>
11. Gergely-Fülöp E, Zámbó D, Deák A: Thermal stability of mesoporous silica-coated gold nanorods with different aspect ratios. *Atmerials Chemistry and Physics*, 148(3): 909-913 (2014) <http://real.mtak.hu/15092>
12. Fekete Z, Horváth Á, Bérces Zs, Pongrácz A: Black poly-silicon: a nanostructured seed layer for sensor applications. *Sensors and Actuators A-Physical*, 216: 277-286 (2014) <http://real.mtak.hu/14283>
13. Baji Zs, Lábadi Z, Molnár Gy, Pécz B, Vad K, Horváth ZE, Szabó PJ, Nagata T, Volk J: Highly conductive epitaxial ZnO layers deposited by atomic layer deposition. *Thin Solid Films*, 562: 485-489 (2014) <http://real.mtak.hu/13307>
14. Fürjes P, Holczer EG, Tóth E, Iván K, Fekete Z, Bernier D, Dortu F, Giannone D: PDMS microfluidics developed for polymer based photonic biosensors *Microsystem Technologies*. In press: (2014) <http://real.mtak.hu/12718>
15. Biró F, Dücsö C, Hajnal Z, Riesz F, Pap AE, Bársony I: Thermo-mechanical design and characterization of low dissipation micro-hotplates operated above 500 °C. *Microelectronics Journal*, 45(12): 1822-1828 (2014) <http://real.mtak.hu/13638>
16. Fodor B, Cayrel F, Agocs E, Alquier D, Fried M, Petrik P: Characterization of in-depth cavity distribution after thermal annealing of helium-implanted silicon and gallium nitride. *Thin Solid Films*, 571(Part 3): 567–572 (2014) <http://real.mtak.hu/13728>

MTA TERMÉSZETTUDOMÁNYI KUTATÓKÖZPONT
SZERVES KÉMIAI INTÉZET

1117 Budapest, Magyar tudósok körútja 2; 1519 Budapest, Pf. 286.
telefon: (1) 382 6400
e-mail: soos.tibor@ttk.mta.hu; honlap: www.ttk.mta.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2014-ben

A 2012-ben korábbi akadémiai kutatóintézetek csoportjaiból létrejött Szerves Kémiai Intézet célja a korábbi különböző kutatási irányok összehangolása, és a kutatócsoportok közötti együttműködés hatékonyabbá tétele volt. A 2014-es évben külön kihívást jelentett a kutatóintézet új kutatóházba történő átköltözése, az új környezetben a kutatómunka megkezdése és a nagyműszerek üzembe állítása. Jelenleg, e két kihívásra adott sikeres válaszként, a kutatóintézet az új kutatóházban végzi kutatómunkáját, elsősorban a szintetikus szerves kémia területén, amely a különböző csoportok céljai alapján a gyógyszerkémiahoz, az organokatalízishez, a kémiai biológiához és a szupramolekuláris kémiához kapcsolódik. Továbbá a kutatóintézet munkájában az előállított vegyületek jellemzésében és a kémiai reaktivitások értelmezésében nagy szerepet töltenek be a szerkezeti kémiával (NMR, MS, röntgen kristallográfia) és elméleti kémiával foglalkozó csoportok. A kutatóintézetben zajló alap és alkalmazott kutatás mellett az intézet munkatársai nagy hangsúlyt fektetnek az oktatói munkára is, aktívan részt vesznek a szomszéd egyetemeken zajló elméleti és gyakorlati oktatásokban is.

II. A 2014-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

A *Gyógyszerkémiai Kutatócsoportban* 2014-ben jelentős felfedezést tettek a ritkának számító myoproliferatív betegségek gyógyításában ígéretes Janus arcú kináz (JAK2) szelektív vegyület felfedezésével. A vegyület felfedezését számítógépes szimuláció során, *in silico*, végzett számítások előzték meg, ezek alapján állították elő a vegyületet, amelynek biológiai hatását is megvizsgálták. A biológiai mérések eredménye igazolta a számítások helyességét. Így nem csak egy lehetséges vegyülethez jutottak, de a számítási módszer helyességét is sikerült igazolniuk.

Az EGIS gyógyszergyárral együttműködve, több generikus szerkezet fejlesztését végezték el sikeresen.

Az *Organokatalízis Lendület Kutatócsoport* kutatói az organokatalízis mélyebb megértéséhez az alkalmazások keresése mellett a folyamatok mechanizmusát is vizsgálták az SZKI Elméleti Kémiai Kutatócsoportjával együttműködésben. A kutatások egyik általánosítható és rendkívül érdekes eredménye, az átmeneti állapotok fragmens alapú elméleti vizsgálata során jött létre. Kiderült, hogy a katalízis szempontjából fontos lépésben a protonálódott bifunkcionális organokatalizátor három hidrogénhid-kötésen keresztül szervezi és stabilizálja a létrejövő „anionos komplexet”. Azaz a bifunkcionális organokatalizátoroknak az átmeneti állapothoz egy merev, az enzimek oxianion zsebéhez hasonló szerkezetű formát kell felvenniük. Ez a felismerés nyújthat segítséget újabb organokatalizátorok tervezéséhez, az eddig nem túl hatékony kémiai átalakítások hatékonyabbá tételéhez. Az elért eredmények a *Chemistry – An European Journal* hasábjain jelentek meg.

A bifunkcionalitás nemcsak az organokatalizátorok terén segítheti elő a hatékonyabb katalizist, hanem a Frustrált Lewis Párok (FLP) esetében is. Ezért ilyen katalizátorok előállításával próbálták meg növelni az FLP-k hatékonyságát. Az intramolekuláris, bifunkcionális FLP-k előállítása során egy érdekes, a sztérikus feszültséget csökkentő átrendeződési reakciót figyeltek meg, egy ún. diotróp átrendeződést. Ezt a ritka átrendeződési reakciót és működésének elméleti vizsgálatát a Synlett folyóiratban közölték.

A kutatások során nemcsak fémmentes katalitikus módszereket vizsgálnak, hanem a reakciók feldolgozását megkönnyítő fázisjelölési módszereket is. Ezen kutatások egy nem várt felfedezése volt az ún. szuperstabil palládium(0) katalizátor, amely nagy stabilitást mutatott a keresztkapcsolási reakciók körülményei között. Ez a típusú katalizátor, mind amellet, hogy rendkívül stabil, katalitikusan is aktív Suzuki-típusú reakciókban, illetve aromás vegyületek CH-aktiválási reakciójában is. A stabilitás megértéséhez a komplex szerkezetét elméleti kémiai módszerekkel és spektroszkópiai módszerekkel vizsgálták. Az eredményekből készült dolgozatokat a European Journal of Organic Chemistry közlésre elfogadta.

Átfogó közleményt jelentettek meg a Chemical Society Reviews-ban, amiben azt a kérdéskört vizsgálták, hogyan térképezi fel a szerves kémikus a kémiai teret. Hogyan segíti a mindennapi kutatást a kémiai intuíció.

A Kémiai Biológia Lendület Kutatócsoport sikerrel valósította meg újabb, fluorogén jelzővegyületek előállítását. Ezek fotofizikai paraméterei lehetővé tették a látható hullámhossztartományban való gerjesztést, ugyanakkor megőrizték a fluorogén és a mega Stokes tulajdonságot. Az előállított vegyületek alkalmazhatóságát élő rendszerek jelzésével tesztelték. Megállapították, hogy alacsony háttér-fluoreszcenciával rendelkeznek és akár a sejtlízis körülményei közt is alkalmazhatók. Eredményeiket a Bioconjugate Chemistry-ben publikálták.

Sikerrel valósították meg hidrofil *transz*-ciklookténok előállítását. Kinetikai vizsgálatok alapján megállapították, hogy a hidrofil jelleg növelése nem befolyásolta számottevően a reaktivitást tetrazinokkal végrehajtott, inverz elektronigényű Diels-Alder reakciókban. Jelenleg az ilyen bioortogonális funkciócsoporttal ellátott lizinszármazékok szintézise és genetikai bevitelének vizsgálata folyik. Sikeres beépülést követően e nem természetes aminosav modulok szelektív jelölését tervezik.

Három, különböző szubsztituensekkel ellátott tetrazinszármazékot állítottak elő és vizsgálták ezek reaktivitását különböző dienofilekkel (etil-vinil éter, ciklooktin, *transz*-ciklooktén). Megállapították, hogy a tetrazinok reaktivitása nemcsak az elektronikus hatásoktól (LUMO-energia), hanem a sztérikus faktoroktól is nagymértékben függ. Jelenleg az egyik, legstabilabb tetrazinszármazék nukleotidba való beépítése folyik.

Monobenzociklookténnal módosított nukleozidot (dU-COMBO) sikeresen építettek be oligonukleotidokba szilárd fázisú szintetikus eljárással. Vizsgálták az így bioortogonalizált nukleinsavak jelölési lehetőségeit. Eredményeiket a Chemical Communications folyóiratban publikálták.

Együttműködés keretében vizsgálták genetikailag módosított baktériumok által expresszált amfifil fehérjék önszerveződő képességét. Megállapították, hogy a fehérjék a kifejeződésüket követően organellum-szerű kompartmentumokat alkotnak. Annak a lehetőségét, hogy e mesterséges organellumok vajon módosíthatók-e szelektíven, úgy vizsgálták, hogy az amfifil fehérjék poláris részét genetikailag azidtartalmú aminosavval módosították. Az így kifejeződött, majd önszerveződött fehérjéket ezt követően a kutatócsoport korábban kifejlesztett monobenzociklooktinnal (COMBO) funkcionizált rodaminnal szelektíven

jelölték, bizonyítva, hogy lehetséges e vezikulumok további, szelektív manipulációja. Eredményeiket Nature Materials-ban publikálták.

Különbéle bifunkciós cisztein-specifikus kémiai hírvivőket állítottak elő, melyek alkalmazásával, sikerrel valósítottak meg modellpeptidek ciszteinen keresztüli fluoreszcens jelzését fluorogén vegyületekkel. Az eredményeket a Tetrahedron-ban közölték.

A rákellenes hatású, kinazolinokarbolin-vázás evodiamin CD-spektroszkópiás vizsgálata feltárta a molekulaszervezet sajátos konformációs mozgékonyágát, amelynek szerepe igazolást nyert az evodiamin-szérumfehérje és evodiamin-ciklodextrin kötődési kölcsönhatásokban. Az evodiamin konformációs sajátosságainak megismerését kvantumkémiai számítások tették teljesebbé. Így jellemezni lehetett a szérum albuminhoz sztereoselektíven kötődő enantiomerek szerkezetét. A rokon alkaloid rutekarpin evodiaminénál jóval erősebb szérumfehérje kötődése merev, síkalkatú szerkezetére, illetve dimerizációs hajlamára volt visszavezethető. Az eredményt a Phys. Chem. Chem. Phys. folyóiratban publikálták.

Termális stabilitáson alapuló fluoreszcenciás vizsgálati módszert dolgoztak ki egy – a skizofrénia patomechanizmusában szerepet játszó – enzim inhibitorainak biofizikai vizsgálatára.

Megoldották az amfoter karakterű (danzil-aminosavak), királis szerves kismolekulák (szerotoninreceptor-antagonista, valamint új fejlesztésű Terada-Akiyama- és Mauroka-típusú katalizátorok) sztereoselektív elválasztását. A komplexképződést többek között új fejlesztésű, bázikus sajátosságú ciklodextrin szelektorokkal is jellemezték együttműködésben a Cyclolab Kft-vel.

Specifikus, szabad tiolcsoportot jelölő festék kötődését vizsgálták modellfehérjéken kapilláris elektroforézis módszerrel.

Az *Elméleti Kémiai Kutatócsoport* munkatársai DFT-számítások segítségével jellemezték a Jyvaszkyla Egyetemen újonnan kifejlesztett Pd-katalizált keresztkapcsolási reakció mechanizmusát. A reakcióban az indolszármazékok és β -ketoészterek között történik dehidrogenatív C-C kapcsolás két egymást követő katalitikus ciklus révén. A számítások alapján sikerült mindkét ciklusban azonosítani a legfontosabb elemi lépéseket. Néhány közti-terméket kísérletileg is jellemezték. Az eredmények alapján megállapítható, hogy a ketoészter dehidrogénezése a PCET (proton-coupled electron transfer) mechanizmus szerint történik, míg a C-C kapcsolás kulcslépése a CH-aktiválás, melyet a fémhez koordinálódó TFA-ligandum idéz elő. A mechanizmusra vonatkozó új ismeretek további szintetikus fejlesztéseket tesznek lehetővé ezen a területen.

Számítások segítségével értelmezték egy új, ezüst-katalizált, furánváz-képződést igénylő szintetikus út mechanizmusát. Sikeresen elkülönítették egy gyökös és egy ionos szakaszt. Meggyőzően bizonyították a jelenlévő ezüst kettős szerepét: *reaktáns* a gyökös szakaszban és *katalizátor* az ionos lépésekben. Eredményeik egyrészt igazolták a korábbi kísérleti megfigyeléseket, de további új kísérleteket is inspiráltak. Eredményeiket a Chem. Eur. J. folyóirat „Hot Paper” megjelöléssel adta közre.

A *Szupramolekuláris Kémiai Lendület Kutatócsoport* kutatói újszerű tervezési elveket fogalmaztak meg és alkalmaztak a külső fizikai (mechanikai, termikus, optikai) és kémiai (oldószer, vendégmolekula, anion) hatásra lumineszcens színváltozással válaszoló anyagok előállítására. Felismerték, hogy az Au(I) ionokból és difoszfín ligandumokból (L) felépíthető, konformációs flexibilitással rendelkező $[Au_2L_2]^{2+}$ egységek felhasználhatók külső stimulusra

válaszoló lumineszcens anyagok előállításában. Megmutatták, hogy az $[\text{Au}_2\text{L}_2]^{2+}$ kationokból és X^- anionokból felépített fázisváltó anyagok, a külső fizikai és kémiai hatások által előidézett dinamikus szerkezeti változások (kristályos/amorf) következtében megváltoztatják a szilárdfázisú lumineszcenciájukat. Kidolgoztak egy hatékony, oldószerrel támogatott mechanokémiai módszert az anion- és fázisfüggő lumineszcens tulajdonságokat mutató kristályos és amorf $[\text{Au}_2\text{L}_2](\text{X})_2$ vegyületek előállítására. Megmutatták, hogy az általuk kidolgozott új mechanokémiai módszer eredményesen alkalmazható a külső hatásokra válaszoló, értékes lumineszcens tulajdonságokkal rendelkező fémtartalmú komplexek gyors és hatékony előállítására. A külső hatásokra válaszoló szupramolekuláris arany(I) komplexek körében elért eredményeket rövid összefoglaló tanulmányban ismertették az Eur. J. Inorg Chem.-ben.

Az *MS Proteomika Kutatócsoport* 2014. évben mintaelőkészítési és tömegspektrometriai mérési módszerek folyamatos fejlesztését végezte. Két tudományos közlemény jelent meg a (vérplazma) fehérjék dúsítására, elválasztására szolgáló módszerek fejlesztéséről és ezek proteomikai, valamint glikoproteomikai jelentőségéről és lehetséges alkalmazásairól.

A glikozilációs mintázatok kiértékelésére használt szoftverüket továbbfejlesztették, az értékelések során felmerült kérdéseknek megfelelően.

Különböző tüdő- és daganatos betegségek esetében újonnan meghatározták 20 vérplazma fehérje helyspecifikus glikozilációs mintázatát. Klinikai mintákon végzett kísérletek keretében összefüggéseket kerestek az egyes betegcsoportok és a meghatározott glikozilációs mintázatok között. Nemzetközi együttműködésből származó minták esetében elsőként vizsgálták a sugárterápia hatását a humán vérplazmafehérjék glikozilációs mintázatára és a helyspecifikus glikozilációs mintázatok szignifikáns megváltozását tapasztalták.

Az *MS Metabolomika Kutatócsoport* kutatói üzembe helyezték az új tömegspektrométert. Sikerült a berendezéshez egy mikro HPLC-rendszert is vásárolni a Richter pályázat támogatásával.

Ennek beüzemelésével párhuzamosan megkezdtek a szteroidok mennyiségi meghatározására irányuló kutatásokat. Módszert állítottak be stresszhormonok mennyiségi meghatározására hajból, nyálból, illetve vérből. A nyálból történő kortizolmérést sikeresen alkalmazták egy katasztrófavédelmi egység önkéntesein. A baicalin mennyiségi meghatározására irányuló módszerfejlesztés során egy igen érdekes új jelenséget figyeltek meg.

Az *NMR Kutatócsoport* kutatói 2014-ben publikálták az intracelluláris lipidkötő fehérjék családjába tartozó humán epesavkötő fehérje ternáris komplexének NMR oldatfázisú koordinátáit (PDB: 2MM3). NMR-relaxációs mérések segítségével meghatározták az *apo* fehérjében zajló konformációs átmenet kinetikai és termodinamikai paramétereit, és javaslatot tettek a kis populációban jelenlevő gerjesztett állapot szerkezetére. Eredményeiket a *Biochemistry* című folyóiratban publikálták.

Az MTA TTK KPI Funkcionális Farmakológiai Kutatócsoportjával közösen szisztematikus analízisnek vetették alá a G-fehérje kapcsolt és más homooligomer receptor altípusokat, és a *Prog. Biophys. Mol. Biol.* c. folyóiratban tanulmányt közöltek az aszimmetrikus perturbációk szerepéről a jelátviteli folyamatokban.

2014-et az ENSZ a Krisztallográfia Nemzetközi Évének nyilvánította. Ebben az évben a brit Royal Society of Chemistry krisztallográfiai folyóirata, a *Crystal Engineering Communication* különszámot jelentetett meg *Structural Macrocyclic Supramolecular Chemistry* címmel. A *Kémiai Krisztallográfia Kutatócsoport* kutatóit felkérte a szerkesztő egy átfogó jellegű cikk megírására. A publikációt kiemelt, „highlight” cikknek minősítették, s ezt a tényt a címlapon is jelezték.

b) Tudomány és társadalom

Aktívan részt vettek az ELTE által szervezett tudománynépszerűsítő *Alkímia Ma* előadássorozat demonstrációs kísérleteiben. A Kutatók Éjszakája, valamint a Magyar Tudomány Ünnepe rendezvénysorozatban előadásokkal és érdekes kémiai kísérleti bemutatókkal vettek részt. Az intézet tíz kutatója vett részt a kutatóközpont által hagyományosan megrendezésre kerülő, AKI kíváncsi kémikus középiskolai tudománynépszerűsítő táborban.

A Kölcsey Ferenc Gimnázium „Szakmai napja” programjának keretében látogatást szerveztek az érdeklődő tanulóknak, amelynek keretében a diákok bepillanthattak a kutatói munka szépségeibe.

A proteomikai kutatásokkal kapcsolatos módszereket és eredményeket az együttműködő egyetemek hallgatói körében laboratóriumi gyakorlatokon népszerűsítették.

Általános- és középiskolások számára tartottak előadásokat a kutatói pálya népszerűsítése, illetve az intézetben folyó kutatások bemutatása céljából.

A krisztallográfia nemzetközi évéről a Magyar Kémikusok Lapjában, valamint a Fizikai Szemlében több ismeretterjesztő cikket is publikáltak 2014-ben.

A kutatóintézetben működik a Cambridge Krisztallográfiai Adatbázis Magyar Nemzeti Központja.

Az intézet aktívan részt vesz a felsőoktatásban. Az intézet kutatói speciálkollégiumot tartanak, és laboratóriumi gyakorlatokat vezetnek mind az ELTE-n, mind a BME-n. Részt vesznek a Doktori Iskolák munkájában is.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2014-ben

Hazai kapcsolatok

Téma: $\alpha 2C$ receptor agonista kutatása

Együttműködő partnerintézmény: Richter Gedeon NyRt., Budapest

Egyezmény neve (kapcsolat formája): kutatási együttműködés

Eredmények, ill. az együttműködés értékelése:

A $\alpha 2C$ receptoron hatásos agonista fragmenst fedeztek fel.

Közös publikációk száma: 1 megjelent.

Téma: Fluorogén jelzővegyületek szintézise és tervezése

Együttműködő partnerintézmény: BME, Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

Egyezmény neve: kutatási együttműködés

Eredmények, ill. együttműködés értékelése:

A kísérleti (szintetikus) eredmények alapján sikerült egy jól alkalmazható elméleti modellt felállítani, amelynek segítségével a jövőben hasonló vegyületek tervezhetők.

Közös publikációk száma: 1 megjelent, 1 előkészületben.

Téma: Cisztein specifikus vinil szulfon kémiai hírvivők szintézise és alkalmazása

Együttműködő partnerintézmény: MTA-ELTE Peptidkémiai Kutatócsoport

Egyezmény neve (kapcsolat formája): kutatási együttműködés

Eredmények, ill. együttműködés értékelése:

A csoportban előállított vinil szulfon származékokat sikerrel tesztelték peptidok ciszteinén át történő jelölésében.

Közös publikációk száma: 1 megjelent.

Téma címe: Szteroid hormonok mennyiségi meghatározása
Együttműködő partnerintézmény: SOTE II. Belgyógyászati Klinika
Egyezmény neve: Lendület Kutatócsoporttal létrejött tudományos együttműködés
Eredmények, ill. együttműködés értékelése:
Sikeres módszerbeállítások történtek vérből, illetve nyálból történő szintmérésekre. Az új készülék érzékenysége lehetővé tette korábban elérhetetlennek tűnő koncentrációk mérését.
Közös publikációk száma: 1 előkészületben

Téma címe: Stresszhormonok mennyiségi meghatározása hajból
Együttműködő partnerintézmény: Szegedi Tudományegyetem Pszichiátriai Klinika
Egyezmény neve: tudományos együttműködés
Eredmények, ill. együttműködés értékelése:
Módszert dolgoztak ki és eredményesen alkalmazták a haj kortizolszintjének mérésére.
Közös publikációk száma: 1 megjelent.

Téma: Módosított természetes alapú polimerek folyadék és szilárd fázisú NMR analízise
Együttműködő partnerintézmény: BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék
Egyezmény neve (kapcsolat formája): tudományos együttműködés
Eredmények, ill. együttműködés értékelése:
Politejsav maleinsavval történő ojtásának vizsgálatát végezték el.
Közös publikációk száma: 1 benyújtott

Téma: Hidrogélek kölcsönhatása biológiai szempontból jelentős vegyületekkel
Együttműködő partnerintézmény: BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék
Egyezmény neve (kapcsolat formája): OTKA K101861
Eredmények, ill. együttműködés értékelése:
Hidrogél mátrixban hatóanyag és a mátrix közti kölcsönhatásokat vizsgálták folyadék és szilárd fázisú NMR módszerekkel, valamint termoanalitikai optikai spektroszkópiai mérésekkel.
Közös publikációk száma: 1 megjelent, 1 benyújtott

Téma: Makromolekuláris hatóanyag-hordozó mátrixok és szilárd fázisú készítmények vizsgálata szilárd fázisú NMR spektroszkópiával
Együttműködő partnerintézmény: Szegedi Tudományegyetem, Gyógyszertechnológiai Intézet
Egyezmény neve (kapcsolat formája): tudományos együttműködés
Eredmények, ill. együttműködés értékelése (néhány sorban):
Polimer alapú mátrixban szerves és szervetlen hatóanyagok szerkezetét vizsgálták szilárd fázisú NMR-módszerekkel.

Téma: Racém és enantiomer tiszta vegyületek szerkezetének vizsgálata
Együttműködő partnerintézmény: BME, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, valamint Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Egyezmény neve (kapcsolat formája): kutatási együttműködés
Eredmények, ill. együttműködés értékelése:
S és racém 2-(2-nitro-1-phenylethyl)-1,3-diphenyl-propane-1,3-dione szerkezetének és olvadási fázisdiagramjának meghatározása. Az N-Boc-transz-3-hidroxi-4-fenilpirrolidin enzim katalizált rezolválásának kidolgozása. 1-n-propoxi-3-metil-3-foszfólen 1-oxid rezolválása diasztereomer-komplex képzéssel, valamint savas és semleges Ca^{2+} sókkal.
Közös publikációk száma: 4

Téma: Szerves királis építőelemek fejlesztése

Együttműködő partnerintézmény: Servier Gyógyszerkémiai Kutatóintézet Zrt., Budapest

Egyezmény neve (kapcsolat formája): kutatási együttműködés

Eredmények, ill. az együttműködés értékelése:

Az együttműködés keretében a kifejlesztett módszerek segítségével királis építőelemeket hoztak létre, amelyek az együttműködő partner gyógyszerkémiai kutatásaiba illeszkedtek.

Téma: Alkylálás - mezoionos vegyületek új családja

Együttműködő partnerintézmény: EGIS, Budapest

Egyezmény neve (kapcsolat formája): vállalati kutatás-fejlesztési kapcsolat

Eredmények, ill. együttműködés értékelése:

A 2H-1,2,3-benzotiadiazin 1,1-dioxid és az aromás gyűrűn szubsztituált származékainak alkylálása mindkét nitrogénatomon is megtörténhet. Mezoionos vegyületek sorozatát állították elő. A két nitrogéntermék oldhatóságának különbsége miatt a célvegyület szelektíven izolálható kromatográfiás elválasztás nélkül.

Közös publikációk száma: 1

Téma: Olefin metatézis reakciókat elősegítő Mo- és W-katalizátorok fejlesztése

Együttműködő partnerintézmény: Ximo AG

Egyezmény neve (kapcsolat formája): szerződéses együttműködés

Eredmények, ill. együttműködés értékelése:

A projekt keretében elméleti módszerek segítségével újonnan tervezett katalizátorok (Schrock-féle molibdén- és volfrám-komplexek) reaktivitását vizsgálták.

Nemzetközi kapcsolatok

Téma: Extending the Concept of Frustrated Lewis Pairs to Transition Metals

Együttműködő partnerintézmény: Ecole Polytechnique federal de Lausanne, Svájc

Egyezmény neve (kapcsolat formája): SCIE X (A Scientific Exchange Programme)

Eredmények, ill. együttműködés értékelése (néhány sorban):

Az együttműködés keretében a Frustrált Lewis Párok kémiáját vizsgálták olyan rendszerekben, amelyekben a bázis szerepét valamilyen átmenetifém (kobalt, nikkell) komplex töltötte be.

Téma: Új bifunkcionális organokatalizátorok fejlesztése

Együttműködő partnerintézmény: Syngenta AG, Basel, Svájc

Egyezmény neve (kapcsolat formája): kutatási együttműködés

Eredmények, ill. együttműködés értékelése:

Az együttműködő partner kémiai problémáira tíz új organokatalizátort fejlesztettek ki.

Téma: Multiple labeling of DNA and RNA with NIR fluorophores by means of (bio)orthogonal approaches

Együttműködő partnerintézmény: Karlsruhe Institute of Technology, Karlsruhe, Németország

Egyezmény neve: ERA-Chemistry

Eredmények, ill. együttműködés értékelése:

Az intézetben kifejlesztett bioortogonális reagenseket az együttműködő partner oligonukleotidokban teszteli. Az együttműködés keretében mindkét fél részéről történt látogatás és ennek keretében előadásra és munkamegbeszélésre került sor.

Közös publikációk száma: 1 megjelent.

Téma címe: Construction and labeling of artificial organelles

Együttműködő partnerintézmény: Freiburg University, Freiburg, Németország

Egyezmény neve (kapcsolat formája): kutatási együttműködés

Eredmények, ill. együttműködés értékelése:

Az intézetben kifejlesztett fluoreszcens bioortogonális reagenseket az együttműködő partner mesterséges sejtszervecskék jelölésére használta fel. A magyar fél ellátogatott Freiburgba, ahol előadást tartott, és munkamegbeszélésre került sor. A német partner viszonzta a látogatást.

Közös publikációk száma: 1 megjelent

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

Együttműködő partnerintézmény: European Molecular Biology Laboratory, Heidelberg, Németország

Egyezmény neve (kapcsolat formája): kutatási együttműködés

Eredmények, ill. együttműködés értékelése:

Az 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 megjelent

Téma címe: NMDA receptorok fluoreszcens jelölése bioortogonális jelzővegyületekkel

Együttműködő partnerintézmény: Ecole Normale Superior, Párizs, Franciaország

Egyezmény neve (kapcsolat formája): kutatási együttműködés

Eredmények, ill. együttműködés értékelése:

A kifejlesztett bioortogonális reagenseket az együttműködő partner genetikailag módosított NMDA- receptorok jelölésére alkalmazza. Egy magyar kutató fél ellátogatott Párizsba, ahol előadást tartott és a munka folytatását készítette elő.

Téma: Elméleti módszerek fejlesztése enzimkatalizált reakciók átmeneti állapotainak modellezésére

Együttműködő partnerintézmény: University of Oxford, Egyesült Királyság

Egyezmény neve (kapcsolat formája): kutatási együttműködés

Eredmények, ill. együttműködés értékelése:

Az átmeneti állapotok molekula-mechanikai modellezésében alkalmazható új elméleti módszereket fejlesztettek ki. Az együttműködés keretében sor került egy 7 hónapos tanulmányútra.

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

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

Egyezmény neve (kapcsolat formája): MTA és Ukrán Tudományos Akadémia kétoldalú együttműködés

Eredmények, ill. együttműködés értékelése:

Több gyógyszer együttes alkalmazásakor figyelembe kell venni ezek lehetséges káros kölcsönhatásait is. E kölcsönhatások tesztelésére gyorsan és hatékonyan alkalmazhatók a molekuláris és szupramolekuláris modellrendszereken végzett kísérletek, és ezzel csökkenthető az élő szervezeteken végzendő kísérletek száma is.

Tömegspektrometriás kísérleteik során kimutatták, hogy egy modellmembrán és a gyógszermolekulák nemkovalens szupramolekuláris komplexeket képeznek. Valószínűsítik, hogy molekuláris szinten ezen alapul a gyógyszer és a biomembrán közötti kölcsönhatás. Egy

hármass rendszerben olyan stabil komplex jelenlétét mutatták ki, amely felelős lehet a gyógyszernek a membránra gyakorolt hatásáért.

Közös publikációk száma: 1

Téma: Szubsztituált kaprolaktámok konformációs vizsgálata

Együttműködő partnerintézmény: Chemistry Research Laboratory, Department of Chemistry, University of Oxford, Egyesült Királyság

Egyezmény neve (kapcsolat formája): kutatási együttműködés

Eredmények, ill. együttműködés értékelése:

Felderítették különböző szisztematikusan szubsztituált kaprolaktámok oldat (NMR) és szilárd fázisú (egy kristály röntgendiffrakció) szerkezetét.

Közös publikációk száma: 1

Téma: Az intermolekuláris kölcsönhatások finomhangolása, izostrukturalitás, polimorfia

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

Egyezmény neve (kapcsolat formája): kutatási együttműködés

Eredmények, ill. együttműködés értékelése:

Sztérikus és elektrosztatikus kölcsönhatások feltérképezésének segítségével a másodlagos kölcsönhatások finomhangolása valósult meg.

Közös publikációk száma: 2

Téma címe: Lítium-foszfor kölcsönhatás: az ionostól a semleges formáig

Együttműködő partnerintézmény: Karlsruhe Institute of Technology, Karlsruhe, Németország

Egyezmény neve (kapcsolat formája): kutatási együttműködés

Eredmények, ill. együttműködés értékelése:

A lítium-foszfor kölcsönhatás vizsgálatára egy vegyületsorozatot sikerült előállítaniuk, melyek fokozatos átmenetet mutatnak az ionostól a semleges kötésig. Ezt szerkezetvizsgálattal igazolták.

Közös publikációk száma: 1

IV. A 2014-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Pályázat: Nemzeti Agykutatási Program / Gyógyszerkutatási pillér

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

A pályázati támogatás mértéke: Összesen: 225 M Ft, 2014-ben: 90 M Ft.

A pályázat keretében 2014-ben végzett munka fontosabb eredményei:

Szűrési paraméterek kidolgozása, validálása és a projekt első évére vállalt CNS-fragmentskönyvtár sikeres létrehozása.

Pályázat: OTKA (K-111862)

Pályázati téma: Vegyes kvantum mechanikai/molekula mechanika módszer fejlesztése és alkalmazása biokémiai rendszerekre

A pályázati támogatás mértéke összesen: 24,67 M Ft

Pályázat kezdete: 2015. február 2.

Pályázat: Posztdoktori OTKA pályázat (PD 112268)

Pályázati téma: Az organokatalízis alkalmazása indol alkaloidok szintézisében

A pályázati támogatás mértéke: 8,98 M Ft, 2014-ben: 3,42 M Ft.

A pályázat keretében 2014-ban végzett munka fontosabb eredményei:

Első lépésként az előállítani kívánt természetes vegyületek családjából választották ki a legígéretesebbet és vázolták fel a lehetséges szintézisutakat. A szintézisút első lépéseit megvalósították.

Pályázat: Kutatói OTKA pályázat (K 112028)

Pályázati téma: Organokatalitikus ciklusok elméleti tanulmányozása

A pályázati támogatás mértéke: Összesen: 24,3 M Ft, 2014-ben: 0 Ft

A projekt kezdete: 2015. január 1.

Pályázat: OTKA (K109006)

Pályázati téma: A biomolekuláris tömegspektrometria folyamatainak elméleti jellemzése

A pályázati támogatás mértéke: 27,88 M Ft; 2014-ben: 6,97 M Ft

A pályázat keretében 2014-ben végzett munka fontosabb eredményei:

A biomolekuláris tömegspektrometriában az alapfolyamatok elméleti alapjairól csak kezdetleges információk vannak, ezeknek mély és alapos megismerése a mérési technikák optimalizálását segítheti elő. A biomolekulák tömegspektrometriai energetikai folyamatainak vizsgálatához szükséges mérési technikák kidolgozását és a főbb mérési paraméterek beállítását végezték el modellvegyületek (peptidek, benzilpiridínium sók) segítségével.

Pályázat: Versenyképességi és Kiválósági Szerződések pályázat

Pályázati téma: Bioszimiláris monoklonális antitestek fejlesztése

A pályázat azonosítószáma: szerz. szám: VKSZ-12-1-2013-0001

A pályázati támogatás mértéke MTA TTK összesen: 600 M Ft, 2014-ben: 18,4 M Ft

A pályázat keretében 2014-ben végzett munka fontosabb eredményei:

A monoklonális antitestek fehérje alapú gyógyszerek, amelyek szerkezetvizsgálatának lényeges eleme a glikozilációs mintázatok vizsgálata. A monoklonális antitestek helyspecifikus glikozilációs mintázatának meghatározása azonban napjainkban még nem rutinszerű, ezért szükség van megfelelő analitikai módszerek kidolgozására. A 2014-es év során az MS Proteomika Kutatócsoport kidolgozott egy minta-előkészítési és tömegspektrometriai mérési protokollt, amellyel meghatározható a monoklonális antitestek helyspecifikus glikozilációs mintázata. A kidolgozott protokoll segítségével terápiában alkalmazott monoklonális antitestek glikozilációs mintázatának meghatározását végzik.

Pályázat: VKSZ-12 pályázat (Richter Gedeon NyRt)

Pályázati téma: Fermentációs folyamatok során keletkező vegyületek meghatározása

A pályázati támogatás mértéke: 30 M Ft; 2014-ben: 12,7 M Ft

A pályázat keretében 2014-ben végzett munka fontosabb eredményei:

Módszert dolgoztak ki fermentlevek aminosavkomponenseinek mennyiségi meghatározására, és a módszert gyakorlatban alkalmazták.

Pályázat: MEDinPROT Fehérjetudományi Kiválósági Együttműködési Program

Pályázati téma: A humán epesavkötő fehérje szállító és célba juttató funkciójának felderítése integrált biofizikai megközelítéssel

A pályázati támogatás mértéke: 1,32 M Ft

A projekt kezdete: 2015. január 1.

V. A 2014-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Hopkins AL, Keserű GyM, Leeson PD, Rees DC, Reynolds ChH: The role of ligand efficiency metrics in drug discovery. *Nature Reviews Drug Discovery*, 13:105-121 (2014) <http://real.mtak.hu/12783/>
2. Keserű GyM, Soós T, Kappe CO: Anthropogenic reaction parameters - the missing link between chemical intuition and the available chemical space. *Chemical Society Reviews*, 43:5387-5399 (2014) <http://real.mtak.hu/21267/>
3. Kótai B, Kardos Gy, Hamza A, Farkas V, Pápai I, Soós T: On the mechanism of bifunctional squaramide-catalyzed organocatalytic michael addition; protonated catalyst as an oxyanion hole. *Chemistry-A European Journal*, 20:5631 (2014) <http://real.mtak.hu/17696/>
4. Stubinitzky C, Cserép GB, Bätzner E, Kele P, Wagenknecht HA: 2'-Deoxyuridine conjugated with a reactive monobenzocyclooctyne as a DNA building block for copper-free click-type postsynthetic modification of DNA. *Chem Commun*, 50:11218-11221 (2014) <http://real.mtak.hu/20473/>
5. Stirling A, Nair N, Ujaque G, Lledos A: Challenges in modelling homogeneous catalysis: New answers from Ab Initio molecular dynamics to the controversy on the Wacker process. *Chem. Soc. Rev.*, 43:4940-4952 (2014) <http://real.mtak.hu/21704/>
6. Leskinen MV, Madarász Á, Yip KT, Vuorinen A, Pápai I, Neuvonen AJ, Pihko PM: Cross-dehydrogenative couplings between indoles and β -Keto esters: Ligand-assisted ligand tautomerization and dehydrogenation via a proton-assisted electron transfer to Pd(II). *J. Am. Chem. Soc.*, 136:6453-6462 (2014) <http://real.mtak.hu/12762/>
7. Chalupský J, Rokob TA, Kurashige Y, Yanai T, Solomon EI, Rulíšek L, Srnc M: Reactivity of the binuclear non-heme iron active site of $\Delta 9$ desaturase studied by large-scale multireference Ab Initio calculations. *J. Am. Chem. Soc.*, 136: 15977-15991 (2014) <http://real.mtak.hu/20537/>
8. Jobbágy C, Deák A: Stimuli-responsive dynamic gold complexes. *Eur J Inorg Chem*, 2014 spec.issue: (27) 4434-4449 (2014) <http://real.mtak.hu/13721/>
9. Nagy GN, Marton L, Contet A, Ozohanics O, Ardelean LM, Révész Á et al. (5): Composite Aromatic Boxes for Enzymatic Transformations of Quaternary Ammonium Substrates. *Angew Chem Int Edit*, 53(49):13471-13476 (2014) 10.1002/anie.201408246 <http://real.mtak.hu/18134/>
10. Horváth G, Egyed O, Toke O: Temperature dependence of backbone dynamics in human ileal bile acid-binding protein: Implications for the mechanism of ligand binding. *Biochemistry*, 53(31):5186-5198 (2014) <http://real.mtak.hu/21827/>
11. Maksay G, Toke O: Asymmetric perturbations of signalling oligomers. *Prog Biophys Mol Bio*, 114:153-169 (2014) <http://real.mtak.hu/21828/>
12. Berényi S, Mihály J, Wacha A, Tőke O, Bóta A: A mechanistic view of lipid membrane disrupting effect of PAMAM dendrimers. *Colloid Surface B*, 118:164-171 (2014) <http://real.mtak.hu/14325/>
13. Adams RW, Byrne L, Kiraly P, Foroozandeh M, Paudel L, Nilsson M et al. (2): Diastereomeric ratio determination by high sensitivity band-selective pure shift NMR spectroscopy. *Chem Commun*, 50:2512-2514 (2014)

14. Bombicz P, Gruber T, Fischer C, Weber E, Kálmán A: Fine tuning of crystal architecture by intermolecular interactions: Synthon engineering. CrystEngComm, 16:3646-3654 (2014) <http://real.mtak.hu/13041/>
15. Gruber T, Thompson AM, Odell B, Bombicz P, Schofield CJ: Conformational studies on substituted ϵ -caprolactams by X-ray crystallography and NMR spectroscopy. New Journal of Chemistry, 38:5905-5917 (2014) <http://real.mtak.hu/20715/>

**AZ MTA TERMÉSZETTUDOMÁNYI KUTATÓKÖZPONT FŐBB MUTATÓI ÉS
PÉNZÜGYI ADATAI 2014-BEN**

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2014-ben

A kutatóhely neve: MTA Természettudományi Kutatóközpont

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlagléttség ¹ :	654	Ebből kutató ² :	433
PhD, kandidátus:	216	MTA doktora:	48
		Rendes tag és levelező tag:	8
A kutatóhelyhez kötődő akadémikusok száma ³ :			16
35 év alatti, kutatóhelyi állományban levő kutatók száma ⁴ :			197
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			468
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			465
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			26
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			12
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			375
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			353
Könyv, atlasz	magyarul: 1	idegen nyelven:	1
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 5	idegen nyelven:	26
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ⁷ :	1535,01	Összes független hivatkozás száma (2013):	16958
Összes hivatkozás száma (2013) ⁸ :			20027
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2014-BEN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 22	MTA doktora:	6
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	6	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	5
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			271
		poszterek száma:	281
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	74	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	64
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :	48		
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			109
Témavezetések száma: TDK munka:	88	Diplomamunka (BSc):	106
Diplomamunka (MSc):	121	PhD:	240
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :	4 298 707	E Ft	
Fiatal kutatói álláshelyen fogl. sz. ¹⁶ :	53	Teljes saját bevétel:	2 249 539 E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		2820	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			85
	A tárgyévre vonatkozó támogatás és bevétel:	447 596	E Ft
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:			41
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	836 715	E Ft
Az év folyamán az összes uniós forrásból támogatott témák száma:			221
	A tárgyévre vonatkozó bevétel ¹⁷ :	639 977	E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:		E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :		772 847	E Ft

VI/A. A kutatóhely részletezett pénzügyi adatai 2014-ben

A kutatóhely neve: MTA Természettudományi Kutatóközpont

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege:	4 298 707	E Ft
Az időszak folyamán a teljes saját bevétel összege:	2 249 539	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		E Ft
OTKA - a tárgyévre vonatkozó támogatás:	447 596	E Ft
OTKA - a tárgyévre vonatkozó bevétel:		E Ft
Innovációs Alapból - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	836 715	E Ft
ÚMFT - a tárgyévre vonatkozó bevétel:		E Ft
Egyéb hazai pályázatok - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	295 711	E Ft
EU-s pályázatok - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	344 266	E Ft
Egyéb külföldi pályázatok - a tárgyévre vonatkozó bevétel:		E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozásoktól származó bevétel - kutatásra:	294 089	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozásoktól származó bevétel - egyéb:	39 632	E Ft
A tárgyévre vonatkozó egyéb kutatási bevétel:	439 126	E Ft
A tárgyévre vonatkozó egyéb nem kutatási bevétel:		E Ft

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2014-ben

A kutatóhely neve: MTA TTK központ vezetése alá tartozó csoportok

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	30	Ebből kutató ² :	21
PhD, kandidátus:	12	MTA doktora: 4	Rendes tag és levelező tag: 2
A kutatóhelyhez kötődő akadémikusok száma ³ :			4
35 év alatti, kutatóhelyi állományban levő kutatók száma ⁴ :			11

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			20
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			20
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			13
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			12
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	0

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	43,73	Összes független hivatkozás száma (2013):	0
Összes hivatkozás száma (2013) ⁸ :			0

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2014-BEN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 4	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 :			18
		poszterek száma:	14
Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 6		Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	4
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :	4		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			8
Témavezetések száma: TDK munka: 3		Diplomamunka (BSc):	6
Diplomamunka (MSc): 5		PhD:	15

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2014-ben

A kutatóhely neve: MTA TTK Anyag- és Környezetkémiai Intézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	136	Ebből kutató ² :	110
PhD, kandidátus:	61	MTA doktora:	9
		Rendes tag és levelező tag:	2
A kutatóhelyhez kötődő akadémikusok száma ³ :			3
35 év alatti, kutatóhelyi állományban levő kutatók száma ⁴ :			50

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			138
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			138
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			10
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			10
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			107
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			106
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 1	idegen nyelven:	2

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	340,74	Összes független hivatkozás száma (2013):	4479
Összes hivatkozás száma (2013) ⁸ :			5332

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2014-BEN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD:	8	MTA doktora:	1
---	------	---	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

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

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			65
		poszterek száma:	84
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	20	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	18
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :	0		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			27
Témavezetések száma: TDK munka:	24	Diplomamunka (BSc):	20
Diplomamunka (MSc):	24	PhD:	40

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2014-ben

A kutatóhely neve: MTA TTK Enzimológiai Intézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	141	Ebből kutató ² :	115
PhD, kandidátus:	50	MTA doktora:	7
		Rendes tag és levelező tag:	2
A kutatóhelyhez kötődő akadémikusok száma ³ :			4
35 év alatti, kutatóhelyi állományban levő kutatók száma ⁴ :			66

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			83
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			83
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			1
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			68
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			61
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	0

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	485,88	Összes független hivatkozás száma (2013):	3581
Összes hivatkozás száma (2013) ⁸ :			4215

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2014-BEN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 6	MTA doktora:	1
---	--------	--------------	---

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 :			53
		posztterek száma:	62
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	10	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	24
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :	6		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			26
Témavezetések száma: TDK munka:	27	Diplomamunka (BSc):	14
Diplomamunka (MSc):	28	PhD:	70

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2014-ben

A kutatóhely neve: MTA TTK Kognitív Idegtudományi és Pszichológiai Intézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség: 74	Ebből kutató ² :	53
PhD, kandidátus: 22	MTA doktora: 10	Rendes tag és levelező tag:
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :		0
35 év alatti, intézeti állományban levő kutatók száma ⁴ :		27

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :		84
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :		82
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:		11
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:		1
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:		55
mindezekből recenzió, kritika	magyarul: 0	idegen nyelven: 1
Megjelent könyv/monográfia, atlasz	magyarul: 1	idegen nyelven: 0
könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 1	idegen nyelven: 9
Könyv szerkesztése ⁷	magyarul: 1	idegen nyelven: 1
Folyóirat, vagy sorozatszerkesztés	magyarul: 0	idegen nyelven: 0

3. IDÉZETTSÉGI MUTATÓK (2013)

Összes hivatkozás száma ⁸ : 3585	Összes független hivatkozások száma:	2941
---	--------------------------------------	------

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2014-BEN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 1	MTA doktora:	2
---	--------	--------------	---

5. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Tud. előadások száma nemzetközi rendezvényen ¹⁰ :	42	hazai:	59
Nyilvános esemény megrendezése:	10	kulturális rendezvények:	5
Tanácsadói tevékenységek száma ¹¹ :			8
Nemzetközi tudományos bizottsági tagság:	12	hazai:	11
Nemzetközi folyóirat szerkesztőségi tagság:	10	hazai:	12

6. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹² :		24	
Témavezetések száma: TDK munka:	9	Diplomamunka (BSc):	40
Diplomamunka (MSc):	22	PhD:	54

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2014-ben

A kutatóhely neve: MTA TTK Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Intézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	125	Ebből kutató ² :	82
PhD, kandidátus:	46	MTA doktora:	15
		Rendes tag és levelező tag:	2
A kutatóhelyhez kötődő akadémikusok száma ³ :			3
35 év alatti, kutatóhelyi állományban levő kutatók száma ⁴ :			23

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :	118		
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :	117		
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:	4		
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:	1		
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:	105		
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció	97		
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	1
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	1

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	306,69	Összes független hivatkozás száma (2013):	3634
Összes hivatkozás száma (2013) ⁸ :			4221

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2014-BEN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD:	2	MTA doktora:	1
---	------	---	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	2	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	1
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :	69		
	posztterek száma:	58	
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	19	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	6
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :	0		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :	5		
Témavezetések száma: TDK munka:	10	Diplomamunka (BSc):	15
Diplomamunka (MSc):	24	PhD:	38

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2014-ben

A kutatóhely neve: MTA TTK Szerves Kémiai Intézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	68	Ebből kutató ² :	52
PhD, kandidátus:	25	MTA doktora: 3	Rendes tag és levelező tag:
A kutatóhelyhez kötődő akadémikusok száma ³ :			2
35 év alatti, kutatóhelyi állományban levő kutatók száma ⁴ :			30

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :	57		
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :	57		
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:	2		
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:	1		
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:	54		
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció	54		
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	0

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	276,9	Összes független hivatkozás száma (2013):	2233
Összes hivatkozás száma (2013) ⁸ :			2614

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2014-BEN

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

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 :	24
posztterek száma:	22
Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 7	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság: 2
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :	30

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :	19
Témavezetések száma: TDK munka: 15	Diplomamunka (BSc): 11
Diplomamunka (MSc): 18	PhD: 23