

**A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
KUTATÓHELYEINEK
2016. ÉVI TUDOMÁNYOS EREDMÉNYEI**

I.

Matematika és természettudományok

**Budapest
2017**

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

Jenes Barnabás főosztályvezető

Kárpáti Mária
Koroknai Levente
Redler László

Idei Miklós

TARTALOMJEGYZÉK

Tartalomjegyzék.....	3
Előszó.....	6
A táblázatokkal kapcsolatos megjegyzések.....	10
Matematikai és természettudományi kutatóközpontok és kutatóintézetek.....	12
MTA Atommagkutató Intézet.....	13
Az MTA Atommagkutató Intézet főbb mutatói és pénzügyi adatai 2016-ban.....	27
MTA Csillagászati és Földtudományi Kutatóközpont.....	30
Földrajztudományi Intézet.....	32
Földtani és Geokémiai Intézet.....	42
Geodéziai és Geofizikai Intézet.....	52
Konkoly Thege Miklós Csillagászati Intézet.....	62
Az MTA Csillagászati és Földtudományi Kutatóközpont főbb mutatói és pénzügyi adatai 2016-ban.....	72
MTA Energiatudományi Kutatóközpont.....	79
Atomenergia-kutató Intézet.....	80
Energia- és Környezetbiztonsági Intézet.....	91
Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Intézet.....	103
Az MTA Energiatudományi Kutatóközpont főbb mutatói és pénzügyi adatai 2016-ban.....	117
MTA Rényi Alfréd Matematikai Kutatóintézet.....	123
Az MTA Rényi Alfréd Matematikai Kutatóintézet főbb mutatói és pénzügyi adatai 2016-ban.....	141
MTA Számítástechnikai és Automatizálási Kutatóintézet.....	144
Az MTA Számítástechnikai és Automatizálási Kutatóintézet főbb mutatói és pénzügyi adatai 2016-ban.....	160
MTA Természettudományi Kutatóközpont.....	163
Anyag- és Környezetkémiai Intézet.....	168
Enzimológiai Intézet.....	184
Kognitív Idegtudományi és Pszichológiai Intézet.....	204
Szerves Kémiai Intézet.....	212
Az MTA Természettudományi Kutatóközpont főbb mutatói és pénzügyi adatai 2016-ban..	221
MTA Wigner Fizikai Kutatóközpont.....	229
Részecske és Magfizikai Intézet.....	235
Szilárdtest-fizikai és Optikai Intézet.....	252
Az MTA Wigner Fizikai Kutatóközpont főbb mutatói és pénzügyi adatai 2016-ban.....	268

Matematikai és természettudományi támogatott kutatócsoportok	273
MTA–BME Gépek és Járművek Dinamikája Kutatócsoport.....	274
MTA-BME Informatikai Rendszerek Kutatócsoport.....	277
MTA-BME Irányítástechnikai Kutatócsoport.....	280
MTA–BME Kompozittechnológiai Kutatócsoport	283
MTA–BME Kondenzált Anyagok Fizikája Kutatócsoport.....	286
MTA-BME Műszaki Analitikai Kémiai Kutatócsoport.....	289
MTA-BME Szerves Kémiai Technológia Kutatócsoport	292
MTA-BME Sztochasztika Kutatócsoport	295
MTA-BME Vízgazdálkodási Kutatócsoport.....	298
MTA-DE Egyenletek, Függvények, Görbék Kutatócsoport	301
MTA-DE Homogén Katalízis és Reakciómechanizmusok Kutatócsoport	303
MTA–DE Részecskefizikai Kutatócsoport	306
MTA-ELTE Egerváry Jenő Kombinatorikus Optimalizálási Kutatócsoport.....	309
MTA–ELTE Elméleti Fizikai Kutatócsoport	312
MTA-ELTE Fehérjemodellező Kutatócsoport.....	316
MTA–ELTE Geológiai, Geofizikai és Űrtudományi Kutatócsoport	319
MTA-ELTE Geometriai és Algebrai Kombinatorika Kutatócsoport.....	322
MTA-ELTE Komplex Kémiai Rendszerek Kutatócsoport.....	325
MTA-ELTE Numerikus Analízis és Nagy Hálózatok Kutatócsoport.....	328
MTA-ELTE Peptidkémiai Kutatócsoport	332
MTA–ELTE Statisztikus és Biológiai Fizika Kutatócsoport.....	335
MTA–ELTE Vulkanológiai Kutatócsoport.....	338
MTA–ME Anyagtudományi Kutatócsoport.....	341
MTA–ME Műszaki Földtudományi Kutatócsoport	344
MTA–MTM–ELTE Paleontológiai Kutatócsoport.....	347
MTA–PE Levegőkémiai Kutatócsoport.....	350
MTA-PTE Molekuláris Kölcsönhatások az Elválasztás-Tudományban Kutatócsoport	353
MTA–PTE Nagyintenzitású Terahertzes Kutatócsoport.....	356
MTA-PTE Szelektív Kémiai Szintézisek Kutatócsoport	359
MTA-SZTE Analízis és Sztochasztika Kutatócsoport.....	362
MTA-SZTE Bioszervetlen Kémiai Kutatócsoport.....	365
MTA–SZTE Fotoakusztikus Kutatócsoport.....	368
MTA-SZTE Mesterséges Intelligencia Kutatócsoport.....	371
MTA-SZTE Reakciókinetikai és Felületkémiai Kutatócsoport	374
MTA-SZTE Sztereokémiai Kutatócsoport.....	377
MTA-SZTE Szupramolekuláris és Nanoszerkezetű Anyagok Kutatócsoport.....	380

A matematikai és természettudományi támogatott kutatócsoportok főbb mutatói és pénzügyi adatai 2016-ban	383
Matematikai és természettudományi egyetemi Lendület kutatócsoportok	420
MTA–BME Lendület Egzotikus KvantumFázis Kutatócsoport	421
MTA-BME Lendület Emberi Egyensúlyozás Kutatócsoport	424
MTA-BME Lendület Jövő Internet Kutatócsoport	425
MTA-BME Lendület Kémiai Nanoérzékelők Kutatócsoport	428
MTA-BME Lendület Kiber-fizikai Rendszerek Kutatócsoport.....	431
MTA-BME Lendület Kvantumkémiai Kutatócsoport	434
MTA-BME Lendület Magneto-optikai Spektroszkópia Kutatócsoport.....	437
MTA-BME Lendület Spintronikai Kutatócsoport	440
MTA–BME Lendület Statisztikus Térelméleti Kutatócsoport.....	443
MTA-DE Lendület Funkcionálanalízis Kutatócsoport	446
MTA–ELTE Lendület Biofizikai Kutatócsoport	449
MTA-ELTE Lendület CMS Részecske- és Magfizikai Kutatócsoport.....	451
MTA–ELTE Lendület Dinoszaurusz Kutatócsoport.....	454
MTA–ELTE Lendület EIRSA Asztrofizikai Kutatócsoport	457
MTA–ELTE Lendület Forró Univerzum Kutatócsoport	459
MTA-ELTE Lendület Katalízis és Szerves Szintézisek Kutatócsoport.....	461
MTA-ELTE Lendület Kémiai Szerkezet/Reaktivitás Kutatócsoport.....	464
MTA–ELTE Lendület Rácstérelméleti Kutatócsoport	467
MTA-PE Lendület Transzlációs Glikomika Kutatócsoport.....	470
MTA–SZTE Lendület Foldamer Kutatócsoport	473
MTA-SZTE Lendület Fotoelektrokémiai Kutatócsoport.....	475
MTA-SZTE Lendület Pórusos Nanokompozitok Kutatócsoport.....	478
A matematikai és természettudományi Lendület-kutatócsoportok főbb mutatói és pénzügyi adatai 2016-ban	481

ELŐSZÓ

A Magyar Tudományos Akadémiáról szóló 1994. évi XL. törvény szerint a kutatóintézet-hálózat évente – az egyes tudományterületeknek megfelelően (matematika és természettudományok, élettudományok, bölcsészet- és társadalomtudományok) három kötetben – közzéteszi az elért eredményeket, amelyeket adatokkal támaszt alá valamint ismerteti az elvégzett kutatások háttérét és körülményeit is.

2016 több kutatóintézet számára a költözés éve volt, ugyanis elkészült az MTA Humán Tudományok Kutatóháza, amely új otthont ad az MTA Bölcsészettudományi Kutatóközpont öt és az MTA Társadalomtudományi Kutatóközpont valamennyi intézete számára, illetve rövidesen szintén ide költözik a MTA Közgazdaság- és Regionális Tudományi Kutatóközpont két intézete is.

Martonvásáron új Agrár-innovációs Centrum létesül, amely magába foglalja a Magyar Tudományos Akadémia Agrártudományi Kutatóközpontjának új kutatótömbjét is. Az új centrumba, a Mezőgazdasági Intézet mellé költözik majd az MTA ATK jelenleg más telephelyen működő MTA Talajtani és Agrokémiai Intézete valamint az MTA Növényvédelmi Intézete is. Az épület felépítését 6 milliárd forinttal, a kutatási berendezéseket 3 milliárd forinttal támogatja a Kormány. A beruházás részét képezi a további 800 millió forint támogatásból megvalósuló látogatóközpont és a környezetében található Brunsvík-kert rekonstrukciója is. 2016-ban az MTA ATK keretein belül megalakult a teljes projekt lebonyolításáért felelős szervezeti egység és aláírták a Projekталapító Dokumentumot is. Megtörtént a teljes projektterület geodéziai felmérése, és a park projekt által érintett területén található értékes, megóvandó növények kijelölése, valamint a Kutatótömb épületére vonatkozó nyílt tervpályázati felhívás előkészítése.

2016-ban döntés született arról, hogy megújul az MTA Kísérleti Orvostudományi Kutatóintézete is és 3,5 milliárd forintos kormány-támogatással új kutatóház épül a jelenlegi korszerűtlen épület helyett. A beruházás az MTA kormánytámogatásokat saját forrással kiegészítő programjának része, amelynek eredményeként a jelenleg költségesen működtethető ingatlanokban elhelyezett intézetek korszerű és kutatásra tervezett épületekben folytathatják a munkát. A KOKI új épületébe a tervek szerint 2019 év végén költözhetnek a kutatók.

Az MTA 2016-ban kutatóhálózatában a kiemelkedő tudományos tevékenység feltételeit biztosító kutatási infrastruktúra-fejlesztést 1504,7 millió forinttal támogatta. Ebből 100 millió forintnál magasabb összegű támogatásban nyolc MTA intézmény részesült: az MTA Atommagkutató Intézet, az MTA Csillagászati és Földtudományi Kutatóközpont, az MTA Energiatudományi Kutatóközpont, az MTA Ökológiai Kutatóközpont, az MTA Számítástechnikai és Automatizálási Kutatóintézet, az MTA Szegedi Biológiai Kutatóközpont, az MTA Természettudományi Kutatóközpont és az MTA Wigner Fizikai Kutatóközpont.

A 2012-től működő új kutatóközpontok közül nyolc esetében, ezen kívül az Atommagkutató Intézetben az intézményvezetők vezetői megbízása lejárt 2015 decemberében. Az MTA elnöke – az akadémiai és közalkalmazotti törvény szerint – kiírta a pályázatokat a vezetői tisztségek betöltésére. 2016 januárjától négy kutatóközpontban az addigi főigazgató folytathatta tevékenységét. Új vezető került további négy kutatóközpont és az Atommagkutató Intézet élére.

2016-2017-ben került sor az akadémiai kutatóhálózat 2010-2015 közötti szakmai tevékenységének tudományos értékelésére, amelyről az Akadémiai Kutatóintézetek Tanácsa hozott határozatot még 2014 novemberében. Az akadémiai intézetek részletes értékelését a szűkebb szakterületek, diszciplínák képviselőiből álló 29 szakértői testület, valamint e testületek anyagaira támaszkodva három tudományterületi testület végezte. A mintegy kétszáz felkért értékelő tudós teljes értékelési munkája 2016 júniusától 2017 februárjáig tartott.

A szakmai felülvizsgálat alapvető célja volt, hogy az értékelés az egyes intézeteket korábbi teljesítményükhöz viszonyítsa, megvizsgálja és megállapítsa a hazai tudományosságon belüli helyüket, illetve felmérje az adott szakma nemzetközi trendjéhez viszonyított pozíciójukat. A kutatóintézet-hálózat 2012 óta új struktúrában működik, így a felülvizsgálat alkalmat adott az átalakítás előtti időszak utolsó két év, és az azóta eltelt négy év tevékenységének és feltételrendszerének összehasonlítására is. A kutatóhálózati értékelés hozzá kíván járulni ahhoz is, hogy az MTA megtehesse a szükséges egyeztetéseket kutatóhelyeinek középtávú tudományos kutatási, fejlesztési és innovációs stratégiájáról, és ehhez kellő humán- és pénzügyi forrásokat rendeljen a szakmai felülvizsgálat eredményeire és tanulságaira alapozva. A tudományterületi testületek egyetértettek abban, hogy nem tartják szükségesnek és indokoltnak a 2012 évi szerkezeti átalakítással létrejött jelenlegi kutatóhálózati struktúra lényegi (MTA-törvényt érintő) megváltoztatását. Az értékelési munka tapasztalatai alapján közös javaslatokat fogalmaztak meg a jövőre vonatkozóan.

Az MTA 2016. évi Közgyűlése határozatban kérte fel az MTA elnökét, hogy az akadémiai kutatóhálózatban 2012-ben történt átalakítások hatásának elemzésére bizzon meg egy kilenctagú bizottságot. A Bizottság a rendelkezésre álló kutatóhálózati szakmai és pénzügyi beszámolók alapján értékelte az átalakítás eredményeit, illetve javaslatot tett az esetleges korrekciókra a kutatóhálózat működésének hatékonyabbá tétele érdekében. A Bizottság 2016. július 5-e és 2017. január 10-e között hat alkalommal tartott ülést, amelyeken áttekintette a rendelkezésére bocsátott háttéranyagokat. Ezt követően kérdőíves formában kérte ki a főigazgatók, az intézetigazgatók, illetve kutatóközpontként 5-6, reprezentatíván kiválasztott kutatócsoport-vezető véleményét. A megkérdezettek elsősorban a működéssel, a kutatási körülményekkel, az intézeti tanácsokkal, a döntési folyamatokkal kapcsolatban fejtették ki véleményüket. A Bizottság számos megállapítást és javaslatot fogalmazott meg a kutatóhálózat átalakításának hatásaival kapcsolatban, hogy a kutatóhelyek hatékonyabban, a vezetési- és gazdasági problémák csökkentésével folytathassák tevékenységüket.

A két testület – a kutatóhálózat hosszú távú tevékenységének átfogó szakmai felülvizsgálatát végző, illetve az intézethálózat átalakításának elemzésére létrehozott szakértői bizottság – elnökei és képviselői az MTA elnökének felkérésére közösen tárgyalták meg a tevékenységük eredményeképpen született javaslatokat és fogalmaztak meg közös ajánlásokat az Akadémia elnöke és az Elnökség számára.

Az MTA intézményeiben foglalkoztatottak átlagléttszáma 2016-ban 5 517 fő volt, ez 2,5 %-kal magasabb, mint a 2015. évi adat. A kutatók (beleértve a támogatott kutatócsoportok kutatóit is) száma 3 350 fő, ez 9%-kal magasabb a 2015. évinél. Az elmúlt években jelentősen fiatalodott az Akadémia kutatói állománya, amelyhez hozzájárultak a fiatalabb generációt támogató kutatási pályázatok is.

Az MTA fejezet 2016 évi jóváhagyott költségvetési támogatása 37 393,2 millió Ft volt – ami főként a Humán Tudományok Kutatóháza beruházási támogatásának csökkenése miatt – 6%-kal alacsonyabb volt az előző évinél. Ebből a költségvetési szervek (intézmények) támogatása

27 254,8 millió Ft, a fejezeti kezelésű támogatás összege 10 138,4 millió Ft volt. 2016-ban a tervezett bevétel 18 801,6 millió Ft volt, azonban a tényleges saját bevétel 57 693,3 millió Ft, ami ötödével magasabb az előző évinél.

A tavalyi év kiemelkedően sikeres volt a magyar kutatók – köztük az MTA szakemberei – számára az Európai Kutatási Tanács (ERC) pályázatain. A kutatói kiválóság egyik mércéjének számító pályázaton 2016-ban 12 hazai kutató nyert támogatást, egyenként mintegy 1,5-3,5 millió euró összegben. A program 2007. évi indulása óta ez a legjobb magyar eredmény. A nyertesek közül kilencen az akadémiai kutatóhálózatban dolgoznak, hatan az MTA Lendület programjának korábbi nyertesei. Az eredmények a Lendület program és a célzott rásegítő támogatások hatékonyságát támasztják alá a magyar kutatók pályázati sikereinek tükrében.

A magyar kutatók voltak a legsikeresebbek 2016-ban az EU Horizont 2020 legnagyobb presztízsű együttműködési pályázatán, a „Teaming” kutatási kiválósági programban. A 27 országból 169 pályázat érkezett be, 10 nyertest hirdettek ki, köztük két konzorciumot, amelyben MTA kutatóhely vesz részt (MTA Számítástechnikai és Automatizálási Kutatóintézet, Budapest, 1,6 milliárd Ft, futamidő: 7 év; MTA Szegedi Biológiai Kutatóközpont, Szeged, 0,68 milliárd Ft, futamidő: 4 év).

A 2012. évi átalakítások óta 2016 volt a legsikeresebb pályázati év az MTA kutatóhálózata számára. A 2015 év végén megnyílt, európai uniós források támogatásával meghirdetett hazai pályázati lehetőségek komoly esélyt biztosítottak az MTA intézményei számára újabb kutatási források megszerzéséhez.

2016-ban az akadémiai kutatóintézetek összesen 262 kutatási pályázatot nyertek, 217 hazai (139 NKFIH-OTKA, 14 NKA, 52 NGM/GINOP, 4 NGM/egyéb strukturális, 8 egyéb), és 45 nemzetközi pályázatot. Tíz akadémiai kutatóhely összesen 26,496 milliárd forint támogatásban részesül különböző kutatás-fejlesztési célok megvalósítására a Gazdaságfejlesztési és Innovációs Operatív Program pályázatai révén. Az MTA Agrártudományi Kutatóközpont hat (4,03 milliárd Ft), az MTA Atommagkutató Intézet hat (4,363 milliárd Ft), az MTA Csillagászati és Földtudományi Kutatóközpont három (1,288 milliárd Ft), az MTA Ökológiai Kutatóközpont négy (2,0 milliárd Ft), az MTA Szegedi Biológiai Kutatóközpont huszonnyolc (11,241 milliárd Ft), az MTA Számítástechnikai és Automatizálási Kutatóintézet kettő (1,88 milliárd Ft), az MTA Természettudományi Kutatóközpont három (0,616 milliárd Ft), az MTA Társadalomtudományi Kutatóközpont egy (0,217 milliárd Ft), a Wigner Fizikai Kutatóközpont kettő (0,380 milliárd Ft) valamint az EK egy (0,479 milliárd Ft) pályázata volt sikeres az EU Strukturális Alapjaiból támogatott pályázatokon.

Az akadémiai kutatóintézet-hálózatban 2016-ban valamivel kevesebb tudományos publikáció született, mint 2015-ben. Az egy évvel ezelőtti adatokhoz képest a publikációk száma az élettudományok területén gyakorlatilag változatlan, a humán- és társadalomtudományok terén 10,5%-kal, míg a matematikai és természettudományok területén 7,5%-kal csökkent. A folyamat hátterét a kutatóközpontok, illetve az önálló kutatóintézetek 2015-ben elindított hosszú távú értékelése, valamint célzott elemzések során tárjuk fel, figyelemmel a minőségi szempontokra is.

A felsőoktatásban oktató kutatóintézet-hálózati kutatók száma a matematika és természettudományok területén szignifikánsan nőtt, a másik két tudományterületen

lényegében változatlan. 2016-ban a kutatóintézet-hálózati kutatók 40,5 %-a oktatott felsőfokú oktatási intézményben (2015-ben ez a mutató 38,6% volt). Azon doktori iskolák száma, ahol a vezető az MTA intézethálózatának kutatója, 21-ről 25-re nőtt. Az MTA közfeladatai megvalósításában továbbra is fontos partnerként tekint az egyetemekre, hiszen az együttműködés erősítése mindkét fél számára előnyökkel jár.

A 2016. év folyamataiból a Magyar Tudományos Akadémiának fontos feladatai származnak, hiszen a hat éves kutatási tevékenységet felölelő szakmai értékelés tanulságait felhasználva több változtatás is szükséges lehet a kutató-hálózat működésének, tudományos stratégiájának meghatározásában. A 2017. évi közgyűlés áttekinti az MTA Alapszabályát és ezt követően születhetnek meg a szükséges változásokat támogató Alapszabály módosítások. Az MTA kutatóközpontok 2012. évi létrehozásával és működésével kapcsolatos tapasztalatok is eredményezhetnek kisebb változtatásokat a központok szervezeti működésében, ami az intézmények SZMSZ-einek módosítását vetíti előre.

Az MTA kiemelt feladata továbbra is a 2016 májusában az MTA koordinálásával elindult Nemzeti Víztudományi Kutatási Program végrehajtása. A Program része lesz a készülő Nemzeti Vízstratégiának (Kvassay Jenő Terv) és ennek keretében méri fel, hogy milyen tematikával és szervezeti háttérrel végezhető a környezeti és víztudományi kutatások. A munka célja, hogy jó ökológiai állapotban és minőségben őrizzük meg hazai vízkészletünket.

Az egyes tudományterületeknek megfelelő kötetek áttekintést nyújtanak a Magyar Tudományos Akadémia kutatóhálózatának 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredményeiről, kiemelve, hogy az adott eredmény hogyan járul hozzá Magyarországi versenyképességének javításához.

Budapest, 2017. április 05.

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 Fejezeti és Intézményi Pénzügyek Osztálya, 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 alapján közöljük. Az idézettségi adatok – a nemzetközi gyakorlatra áttérve – a beszámolási évet megelőző évre (most 2015-re) vonatkoznak. Többéves pályázatoknál mindig az adott évre eső összeg került feltüntetésre.

A beszámolók táblázataiban indexszel megjelölt számok jelentései:

¹ Az éves gazdasági beszámolóban szereplő átlagos statisztikai állományi létszám.

² A kutatói besorolásban lévő közalkalmazottak 2016. 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 létszámba besorolt munkatársai jelentettek meg a beszámolási évben, és a publikáción szerepel a kutatóhely neve. Az egyes publikációtípusok meghatározásánál az MTMT definícióit vettük alapul (típus_jelleg_besorolás_v3.0).

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

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

⁷ A 2016-os összesített impaktfaktorhoz a folyóiratok legutóbbi (2016-ban közzétett, de a 2015-ös évre vonatkozó) impaktfaktorát használjuk.

⁸ A kutatóhelyhez rendelt összes eddigi publikációra 2015-ben kapott (a megjelenési év: 2015) 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 2015/2016-os tanév második és a 2016/2017-es tanév elő szemeszterére vonatkoznak.

¹⁵ A 2016. évben a kutatóhely részére a Magyar Államkincstár által kiutalt összes költségvetési támogatás.

¹⁶ 2016. 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: pokol.gyorgy@ttk.mta.hu

honlap: www.ttk.mta.hu

I. A kutatóközpont egészét érintő kutatási és tudományszervezési eredmények 2016-ban

2016 első hónapjaiban a kutatóközpont teljes szakmai és gazdálkodási átvilágításon esett át. A szakmai átvilágítás – melyet az MTA elnöke által felkért bizottság végzett el – a teljes szervezetre és gyakorlatilag az összes munkatársra (nem csak a kutatókra) kiterjedt. A működési-gazdálkodási átvilágítás – melyet az MTA elnöke független tanácsadó cégtől rendelt meg – tisztázta a fedezethiány összegét, meghatározta kialakulásának fő okait, és javaslatot tett a konszolidáció lehetőségeire.

A szakmai átvilágító bizottság az értékelésen kívül ajánlásokat is megfogalmazott bizonyos kutatócsoportok átalakítására, egyes esetekben megszüntetésére is. Az átszervezési intézkedések ezen alapultak, figyelemmel az év közben elfogadott konszolidációs megállapodás követelményeire is, melyek között a megtakarításokon belül a személyi költségek csökkentésének az MTA elnöke által elrendelt mértéke is szerepelt. Így ezek az intézkedések szükségképpen a létszám csökkentésével jártak.

Az év során elfogadott új SZMSZ-ben tisztázták és hatékonyabbá tették a (kémiai) Műszercentrum (MC) helyzetét. Három, korábban az SZKI keretében működő kutatócsoportot (MS Metabolomika, NMR, Röntgen Krisztallográfia) integráltak a Műszercentrumba, így a Műszercentrum megfelelő laboratóriumai képesek a magas színvonalú szakmai szolgáltatás mellett a kooperációs kutatásokra (a TTK-belül és kívül), valamint az önálló témáik kutatására is.

A költségvetés tervezésében új megközelítést alkalmaztak: a kutatóház és a központi szervezeti egységek költségeit az év elején rögzítették, ami az intézetek és kutatócsoportok munkájának tervezhetőségét lényegesen javította.

A 2016-ban megalapozott együttműködések közül az ELTE által vezetett FIEK konzorcium megalakulását tartják legfontosabbnak. Az elnyert pályázati projekt tumor biomarkerek kutatására és fejlesztésére irányul.

Anyag- és Környezetkémiai Intézet (AKI)

2016-ban minden részletre kiterjedő, alapos szakmai átvilágításon esett át az intézet, amelynek eredményeként a kutatócsoportok különböző minősítési kategóriákba kerültek. Kiváló kutatócsoportot besorolást kapott a Lendület Biomolekuláris Önrendeződés Kutatócsoport, átalakítandó lett a Funkcionális Határfelületek Kutatócsoport. Az átvilágító testület javaslata alapján a Spektroszkópia és a Preparatív Nanokémia csoportokat megszüntették, míg a többi kutatócsoport – a Plazmakémia, a Funkcionális Nanorészecskék, a Polimer Fizika, a Polimer Kémia, a Környezetkémia, a Megújuló Energia és a Biológiai Nanokémia – a jó kategóriába került. A 2016-ban alakult új kutatócsoport (Metatézis) természetesen még nem kaphatott minősítést.

Az MTA TTK felépítése lehetővé teszi, hogy a megoldandó kutatási problémákat komplexen, multidiszciplináris módon tudják megközelíteni. Az intézet és az MTA TTK többi intézete között számos sikeres együttműködés alakult ki, amelyben érvényesül a komplementer tudásbázis. Bár a TTK-ban dominálnak az orvosbiológia kutatások, sikerült benyújtani és pozitív szakpolitikai bírálatot kapni egy, az „Anyagtudományi kiválósági műhely:

környezetbarát eljárások fejlesztése megújuló energia- és nyersanyagforrások hatékony felhasználására és energiatartalmuk szabályozott felszabadítására” című pályázatra, amelynek megvalósításában támogató minisztériumi döntés esetén 3 intézet fog részt venni.

Enzimológiai Intézet (EI)

Az 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 alap kutatások folynak, melyek lehetővé teszik a fizioiógias és patofizioiógias folyamatok sejt és molekula szintű értelmezését, másrészt a szerkezeti biológia mellett folyamatosan bővül a kutatási tevékenység a komplex biológiai folyamatok megértését célzó rendszerbiológia irányába, a proteomika és a bioinformatika lehetőségeinek kihasználásával. Így többek között vizsgálják a sejtekben zajló jelátviteli utakat, a rendezetlen fehérjék működését, a komplement-rendszer aktiválódási mechanizmusait molekulaszerekezeti alapon, a daganatos és neurodegeneratív betegségek kialakulásához vezető egyes folyamatok, a transzmembrán fehérjék szerepét, valamint a DNS hibajavításban szerepet játszó enzimeket.

Kognitív Idegtudományi és Pszichológiai Intézet (KPI)

A kutatócsoportok közötti együttműködések közös OTKA és EU pályázat beadásban, közösen elnyert MTA Infrastruktúra pályázatban és közösen elnyert NAP Infrastruktúra pályázatokban manifesztálódtak. Több publikáció is megjelent az elmúlt időszakban a csoportok közötti munka eredményeként. A közösen működtetett EEG laborok, állatházak, viselkedéses laborok, neuroanatómiai labor és víruslabor, valamint a közösen fenntartott asszisztencia, technikai gárda is mutatja a csoportok intézeten belüli magas együttműködési potenciálját. Az intézet kutatóházon belüli együttműködő partnerei a következők: Agyi Képző Központ (AKK), Enzimológiai Intézet, Anyag és Környezetkémiai Intézet, Szerves Kémiai Intézet.

2016 során folytatódott az a Lendület pályázat által támogatott vizsgálatsorozat, melynek célja a párhuzamosan beszélők hangjának szétválasztásának tanulmányozása volt. Ezen belül a prozódia szerepét vizsgáló kísérleteket az AKK munkatársaival közösen tervezték meg. A kutatóközponton belüli módszertani lehetőségeket kihasználva a KPI és az SZKI kutatói együttműködnek, hogy kidolgozzák az oxytocin szint perifériás változásainak vérből, illetve vizeletből való kromatográfiás mérési módszerét. Azok a kísérletes vizsgálatok, melyek a kutyák in vivo idegi aktivitásának feltérképezésére irányulnak fMRI segítségével, az AKK-val együttműködésben zajlanak.

Szerves Kémiai Intézet (SZKI)

Az intézet 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 Csoport kvantumkémiaiával és egyéb elméleti számításokkal szervesen egészíti ki a kísérleti kutatásokat. Az elsődlegesen szerkezeti kémia irányultságú csoportok a központi igazgatás alá tartozó és nagy műszereket üzemeltető Műszer Centrummal kerültek összevonásra 2016 második félévében. Ezzel

megoldódott a központilag fenntartott nagy műszerek és a rajtuk kutatást végző csoportok széttagozódásának problémája.

A tárgyévben az Enzimológiai Intézettel membránfehérjékkel és fehérje-fehérje kölcsönhatással foglalkozó témákon működtek együtt, szerkezeti biológiai kérdéseket tanulmányoztak, fluoreszcensen jelzett vegyületeket fejlesztettek ki organikus taurokolsav transzporterek vizsgálatához, továbbá humán és patkány haptocita modellekkel gyógyszerhatóanyagok toxicitásának vizsgálatában vettek részt. Az Anyag- és Környezetkémiai Intézettel közösen biológiai rendszerekben használható jelző molekulák új fluoroforjainak fotokémiai és fotofizikai tulajdonságait tanulmányozták, cirkónium-szilikát-polialmasav konjugátumok toxicitását határozták meg, kukurbituril származékok és gyógyszerhatóanyagok között kialakuló komplexek szerkezetét vizsgálták, prosztataspecifikus membrán antigén alapú tumordiagnosztikai eljárás fejlesztésében vettek részt.

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

Agyi Képző Központ (AKK)

Az AKK-t alkotó két kutatócsoportban - Neurokognitív Fejlődés Kutatócsoport (NFK) és Agyi Szerkezet és Dinamika Kutatócsoport (ASZDK) - folyó kutatások kiterjedtek a számítógépes viselkedési tesztek és tréningprogramok, EEG és fMRI módszerek fejlesztésére és alkalmazására az emberi kognitív képességek hátterét képező egészséges és kóros idegrendszeri folyamatok és agyi hálózatok jellemzésére. Legfontosabb új eredmények:

Adaptív szenzoros információfeldolgozás agyi folyamatai

Az adaptív tárgylátásban kulcsfontosságú visszacsatoló mechanizmusok agyi hátterét vizsgálták az ismétléselnyomás-jelenség (RS) – azaz ugyanazon inger ismételt bemutatásakor tapasztalható fMRI válaszcsökkenés – segítségével. Kimutatták, hogy az arcíngerek esetén a fusiform arc területen (FFA) megfigyelhető RS hátterét egy kiterjedt agyi hálózathoz tartozó visszacsatoló moduláció képezi, és az ezen hálózaton belüli intrinzik funkcionális konnektivitás erőssége szorosan összefügg az RS mértékével. Továbbá, az agyi archálózaton belül mért RS nagysága jól előre jelezte az arcészlelésben megmutatkozó egyéni különbségeket (eredményeik a rangos Brain Imaging and Behavior folyóiratban jelentek meg).

A szóhangsúly agyi reprezentációjának RS segítségével történő vizsgálatával kimutatták, hogy az anyanyelvi hangsúly feldolgozásában fontos szerepet játszanak a superior temporális tekervény (STG) hátsó területének prediktív kódolási mechanizmusai. Ezen eredmények támogatják a beszéd prozódiai aspektusának prediktív kódolási elméletét.

Az olvasás és az olvasási zavarok agyi háttere

Az olvasás elsajátításának, valamint a természetes körülmények között történő összefüggő szövegolvasás idegrendszeri folyamatainak vizsgálatában érték el kiemelkedő eredményeket. Nagymintás olvasásfejlődési kutatásukban azt vizsgálták, hogy miként változik az ún. betűfelcserélési hatás olvasni tanuló gyerekeknél (2-4. osztályban). Kimutatták, hogy a betűfelcserélési hatás valójában az ortográfiai rendszer adaptivitásának eredménye, nem pedig a látási/olvasási mechanizmusok inherens következménye. Eredményeiket a nagy presztízsű Developmental Science folyóirat fogadta el közlésre (megjelenés éve: 2017.). A természetes olvasás idegrendszeri hátterét képező agyi folyamatok vizsgálatával sikerült azonosítani azokat a vizuális információfeldolgozási komponenseket, melyek szoros összefüggést

mutatnak az olvasásban való jártassággal és így lehetőséget nyújtanak az olvasási készség pontos jellemzésére és gyakorlás következtében történő változásának követésére (eredményeik a rangos Scientific Reports folyóiratban jelentek meg). Ezen túlmenően a módszertani apparátust kiegészítették a szemmozgás eseményekhez-kötött agyi oszcillációk spektrális analízisével, és elkezdték a szövegorientáció természetes, olvasás közbeni EEG markereinek vizsgálatát. A kidolgozott kísérleti és adatfeldolgozási eljárások az olvasás kutatásának egy lényegében új és nagyon ígéretes megközelítését teszik lehetővé.

A figyelmi funkciók szerepe a munkamemóriában

A munkamemória zavaró ingerekkel szembeni ellenálló képességének romlása a kognitív öregedés egyik legígéretesebb előrejelzője. Azonban meglepően keveset tudunk a zavaró ingerek kiszűrésének neurális folyamatairól és azok változásáról öregedés során. Az AKK kutatói feladathoz kötött és nyugalmi fMRI, valamint EEG módszerrel vizsgálták a munkamemória tárolása során jelentkező zavaró, irreleváns információ kiszűrésének neurális folyamatait egészséges fiatal felnőttekben. EEG vizsgálataik kimutatták, hogy a zavaró ingerek kiszűrése egy aktív folyamat, mely az inger feldolgozásáért felelős agyterületeken belüli fokozott információfeldolgozást igényel és ennek egy fontos markere lehet a zavaró ingerek által kiváltott alfa-béta deszinkronizációs válasz. Továbbá, fMRI kutatásaik az első kísérletes bizonyítékát szolgáltatták annak, hogy vizuális munkamemória feladatban a törzsdúcok kiemelt szerepet játszanak az irreleváns tárgyak figyelmi szűrésében. Eredményeik arra engednek következtetni, hogy a törzsdúcok – a jól ismert motoros kapuzó szerepükhöz hasonlóan – fontos funkciót látnak el a vizuális input szűrésében és a vizuális tárgyak munkamemóriában történő rövid idejű eltárolásának szabályozásában.

Amblyopia

Korábbi kutatások kimutatták, hogy az amblyop szemből érkező információ feldolgozása kevésbé hatékonyan és lassabban történik a látókéregben a jó, domináns szemhez képest. Azonban, eddig az amblyop szemet mindig úgy vizsgálták, hogy a jó szem közben le volt takarva és ebből kifolyólag semmit sem tudunk arról, hogy mennyire sérül, kerül elnyomásra az amblyop szemből érkező információ valós, kétszemes látás esetén. Az AKK kutatói kidolgoztak egy új kísérletes paradigmát, mely lehetőséget nyújtott ennek a kérdésnek az EEG vizsgálatára. Kutatásaikból kiderült, hogy kétszemes látás esetén az amblyop információfeldolgozás eddig ismert, a látókérgi válaszok korai komponensein jelentkező válaszcökkenésen kívül egy későbbi károsodási komponens is azonosítható, mely nem mutatható ki abban az esetben, amikor az amblyop szemet magában, a jó szem letakarásával vizsgálják. Az amblyop szemből érkező ingerekre kapott neurális válaszcökkenésének késői komponense szoros összefüggést mutat az amblyop betegek binokuláris/sztereoskopikus látáskárosodásával. Kutatásaik eredményeként sikerült azonosítani az amblyopia egy új, klinikailag releváns neurális markerét.

Jelentősebb közlemények:

1. Weiss B, Knakker B, Vidnyánszky Z: Visual processing during natural reading. Scientific Reports, 6: Paper 26902 (2016) <http://www.nature.com/articles/srep26902>
2. Hermann P, Grotheer M, Kovács Gy, Vidnyánszky Z: The relationship between repetition suppression and face perception. Brain Imaging and Behavior, 1–11 (2016) <http://real.mtak.hu/id/eprint/46275>
3. Honbolygó F, Török Á, Bánréti Z, Hunyadi L, Csépe V: ERP correlates of prosody and syntax interaction in case of embedded sentences. Journal of Neurolinguistics, 37: 22-33 (2016) <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0911604415000366>

Műszercentrum

A Műszercentrum 2016-ban is sikeresen működtette a birtokában lévő nagyműszereket: 6 db tömegspektrométert, 2 db NMR és 1 db egykristály röntgendiffraktométert.

A Műszerközpont együttműködött az MTA TTK több kutatócsoportjával. Szerkezet-felderítést végeztek oldatfázisú NMR vizsgálatok alkalmazásával a Gyógyszerkémiai Kutatócsoport, az Organokatalízis Kutatócsoport és a Kémiai Biológia Kutatócsoport részére. A Polimer Fizikai Kutatócsoporttal kurkumin modell gyökdonor vegyületekkel való kölcsönhatását vizsgálták. A polimerek gyökös degradációjának megakadályozására irányuló alap kutatások a későbbiekben ipari hasznosságúvá válhatnak.

Az MTA-ELTE Lendület Katalízis és Szerves Szintézis Kutatócsoporttal együttműködve tanulmányozták aromás aldehidek és anilidek Pd katalizált kapcsolási reakcióit, NMR vizsgálatokat végeztek a reakció feltételezett kulcs-intermedierjének igazolására.

További Pd katalizált CH-aktiválási reakciók vizsgálatában egykristály röntgendiffrakciós módszert alkalmaztak, eredményeiket publikálták.

Új módszert dolgoztak ki N-glikozilációs mintázatok HPLC-MS alapú meghatározására. Az eredmények a hazai gyógyszeripar (pl. Richter Rt) számára is jól felhasználhatók, növelik a versenyképességet.

Glikoproteinek analitikájában alkalmazták a tömegspektrometriás technikákat.

MS és LC-MS támogatást biztosítottak a TTK intézményeiben (SZKI, AKI, KPI, EI) felmerülő problémák (szerkezet-felderítés, célmolekulák mennyiségi meghatározása) megoldásában.

Jelentősebb közlemények:

1. Bazso FL, Ozohanics O, Schlosser G, Ludanyi K, Vekey K, Drahos L: Quantitative Comparison of Tandem Mass Spectra Obtained on Various Instruments. *Journal of the American Society for Mass Spectrometry*, 27 (8): 1357 (2016)
<http://real.mtak.hu/id/eprint/39802>
2. Csimbók E, Takács D, Balog JA, Egyed O, May-Nagy NV, Keserű GM: The first synthesis of isoxazolo[3,4-c]pyridine-7-ones. *Tetrahedron Letters*, 57(39): 4401 (2016)
<http://real.mtak.hu/id/eprint/46592>

MTA TERMÉSZETTUDOMÁNYI KUTATÓKÖZPONT

ANYAG- ÉS KÖRNYEZETKÉMIAI INTÉZET

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

telefon: (1) 382 6500; e-mail: tompos.andras@ttk.mta.hu

honlap: <http://www.ttk.mta.hu>

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

Az intézet feladata 2016-ban funkcionális és szerkezeti anyagok, valamint kémiai eljárások kutatása volt i) a fenntartható környezet és ii) a fenntartható egészség területein. Az első területen tevékenységük kiterjed a környezettudományra, nevezetesen az emberi tevékenységből származó káros környezeti hatások értelmezésére és csökkentésére, továbbá a megújuló energiaforrások átalakítására. A második területen az orvos-biológiai szempontból fontos lágy-anyagokra épülő rendszerekre, gyógyszerhordozókra, bioszenzorokra és az azokban lejátszódó folyamatok kutatására fókuszálnak.

A változatos szakértelmi bázis szinergiái kedveznek az intézetben folyó interdiszciplináris kutatásoknak. Kutatási témáikat az alapkutatási kérdések megválaszolásán keresztül mindig valamilyen társadalmi–gazdasági–környezeti igény motiválja. Tudományos-szakmai arculatukat így valós problémák alakítják. Tevékenységük fontos eleme az alap- és alkalmazott kutatások egymásra épülése.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

Kiemelkedő kutatási eredményeik tárgyalásakor az elsősorban anyagtudományi témáktól haladnak az energetikai célú és környezeti kémiai témákon keresztül a biológiai rendszereken és gyógyászati célból végzett kutatásokig. Az intézetben működő „Lendület” kutatócsoport eredményét a biológiai rendszerekkel kapcsolatos kutatások között szerepeltetik.

Különleges nanoszerkezetű amfifil kotérhálók

Tovább folytatták újfajta nanoszerkezetű amfifil polimer kotérhálókkal (kovalensen kötött hidrofíl és hidrofób szegmensekből felépülő térhálókkal) kapcsolatos kutatásaikat, amelynek keretében széles összetétel tartományban vizsgálták a poli(metil-metakrilát)-*l*-poliizobutilén kotérhálók termikus és duzzadási tulajdonságait. Sikerült igazolniuk, hogy a kotérhálóban a főlánchoz tartozó üvegesedési hőmérséklet nem függ a keresztkötőtől, csak –meglepő módon a Fox-Flory egyenlet szerinti összefüggést mutatva – a keresztkötési pontok közti átlagos molekulatömegtől. Másik fő irányvonalként a poli(N-vinil-imidazol) tartalmú amfifil polimer kotérhálókat alakították át Pd-fém hordozóvá, és vizsgálták ezek katalitikus aktivitását. Az eddigi eredmények alapján megállapítható, hogy sikeres a komplexképzés a fém és a polimer között, és további optimalizálás mellett katalitikusan aktív részecskék hozhatóak létre. Vizsgálták továbbá réztartalmú poli(poli(etilén-glikol)-metakrilát)-*l*-poliizobutilén amfifil polimer kotérháló nanokompozitok elektromos vezetési tulajdonságait, valamint sikeresen állítottak elő az irodalomban eddig le nem írt poli(N-vinil-pirrolidon)-*l*-poliizobutilén amfifil polimer kotérháló sorozatot.

Természetes és szintetikus polimerek és társított rendszereik

Biopolimerekből előállított társított rendszerekben tanulmányozták a határfelületi kölcsönhatásokat. Politejsav (PLA) és termoplasztikus keményítő (TPS) keverékeinek

vizsgálata bizonyította, hogy a két komponens között a kölcsönhatás gyenge. Termodinamikai modell segítségével igazolták, hogy a PLA kismértékben oldódik a TPS fázisban, főként a termoplasztikus keményítőben lévő glicerín hatására, de a keményítő nem képes oldódni a PLA-ban. A gyenge kölcsönhatás következményeként a fázisok közötti feszültségátvitel nem lehetséges, ami kis deformálhatóságot és kis szilárdságot eredményez. Polipropilén (PP) és lignin keverékeit készítették el széles összetétel tartományban homopolimer PP és két lignosulfonát alapanyagból. A komponensek elegyíthetőségét és a kölcsönhatásokat dinamikus mechanikai analízis (DMTA) segítségével, míg a mechanikai tulajdonságokat szakítóvizsgálatok segítségével jellemezték. A lokális deformációs folyamatokat akusztikus emissziós és a szakítási felületek pásztázó elektronmikroszkópos felvételei alapján azonosították. Az eredmények azt mutatták, hogy a keverékek szerkezetét a lignin szemcsék feldolgozás során lejátszódó lágyulása befolyásolja. Elsősorban a lignin molekulák közötti nagyszámú erős specifikus kölcsönhatás miatt gyenge kölcsönhatás alakul ki a két fázis között, de maleinsav-anhidriddel ojtott PP kapcsolóanyag segítségével a határfelületi kölcsönhatás javítható. Habár a kapcsolás növeli a szilárdságot, a keverékek deformálhatósága – különösen nagy lignin tartalmak mellett – kicsi marad, ami gátat szabhat a keverékek alkalmazhatóságának.

Műszaki polimerek felületeinek hideg plazmával történő módosítása

Többféle műszaki gyakorlatban használatos polimer – PA6, HDPE, PP, PEEK, PTFE, POM – plazmás felületkezelését vizsgálták a felületi tulajdonságok, így felületi energia, adhézió és tribológia előnyös változtatása céljából. Megállapították, hogy atmoszférikus dielektromos akadály kisülés (dielectric barrier discharge) plazmakezeléssel a vizsgált műszaki polimerek felülete mind kémiai aktivitásában, mind topológia tekintetében jelentősen módosult. A felületek felületi energiája lényegesen növekedett (hidrofilebbé vált), azonban ennek hatása időben csökkent. A felület érdessége a kiindulási állapottól függően csökkent vagy növekedett. A plazmakezelés hatására a polimerek adhéziója a polimer típusától függően kisebb-nagyobb mértékben növekedett.

Szén nanofázisok felületmódosítása

Részletes XPS vizsgálatokkal meghatározták a különféle szén nano-fázisokba (grafén, grafén-oxid) N₂ plazmából beépülő nitrogén kötésviszonyait és azok arányának változását. Meghatározták különböző összetételű grafén-oxidok redukciójának és a felületi C-O kötések változásának mértékét.

Acetaldehid előállítás etilén szelektív katalitikus oxidációjával

Kimutatták, hogy Pd/V₂O₅/TiO₂ heterogén katalizátoron, atmoszférikus nyomáson, viszonylag alacsony hőmérsékleten (~100 °C-on) víz és oxigén jelenlétében az etilén nagy szelektivitással és hozammal acetaldehiddé oxidálható. Az acetaldehidnek a közeljövőben jelentős szerepe lehet a gumigyártás alapanyagául szolgáló 1, 3-butadién szintézisében.

A vegyipar napjainkban főleg benzin termikus pirolízisével állítja elő a műanyaggyártás számára az etilént. Az 1,3-butadién az etilényártás mellékterméke. A vegyipar etilényártó ágazata most van átalakulóban. Mivel az olcsó palagázban a metán mellett jelentős mennyiségű etán van, a műanyagipar etilén igényét egyre inkább az etán oxidatív dehidrogénezésével elégítik ki. Ez felvetette a kérdést, hogyan fogja a gumigyártás az 1,3-butadién szükségletét ellátni. Egy lehetséges megoldás, ha a butadiényártást továbbra is az etilényártáshoz kapcsolják. A butadién előállítás régóta ismert eljárása az etanolból kiinduló, heterogén katalitikus Lebegyev-eljárás. Etilénből hidratálással lehet etanolt előállítani.

Számos tanulmány megállapítja, hogy a Lebegyev-eljárásnál enyhébb körülmények között és annál nagyobb hozammal etanol/acetaldhid elegyből állítható elő 1,3-butadién. A jövő 1,3-butadién gyártási technológiájának nagy valószínűséggel etanolra és acetaldhidre lesz szüksége. Kutatási eredményeik alapján technológiát lehet kifejleszteni, mellyel etilénből nagy hatékonysággal lehet acetaldhidet előállítani.

Metanol fotokatalitikus reformálása

Gallium-cink-oxinitrid és gallium-oxid alapú fotokatalizátorok a fotokatalitikus reakció során szerkezeti változáson mennek keresztül, a működő katalizátorokban oxihidroxidok alakulnak ki. Szol-gél módszerrel előállított TiO_2 fotokatalizátorok aktivitása jelentősen nő $\text{SnO}_x\text{-PtO}_x$ kokatalizátorok jelenlétében. A kokatalizátor formázása kedvezőbb kalcinálással, mint magas hőmérsékletű hidrogénes kezeléssel. A reakciókörnyezetben in situ kialakuló fémes platina tartalmú katalitikus aktív helyek előnyösek a fotokatalitikus hidrogéntermelés szempontjából. Az Sn aktivitást növelő szerepe pozitív és negatív hatások eredőjeként jelentkezik.

$\text{Ti}_{(1-x)}\text{M}_x\text{O}_2\text{-C}$ ($M = \text{W}, \text{Mo}$; $x = 0,2-0,4$) kompozit hordozós Pt elektrokatalizátorok fejlesztése

Meghatározták azokat a szintézisfeltételeket, amelyek szükségesek a W és a Mo adalékok rutilszerkezetű TiO_2 rácsba építéséhez a $\text{Ti}_{(1-x)}\text{M}_x\text{O}_2\text{-C}$ ($M = \text{W}, \text{Mo}$; $x = 0,2-0,4$) kompozitok kialakítása során. A kompozit hordozós Pt katalizátorok elektrokémiai minősítése kapcsán kimutatták a nagyfokú W- és Mo-beépülés jelentőségét a CO tűrőképesség és a stabilitás fokozásában. Összefüggést találtak a W- és Mo-beépülés mértéke, a hidrogén spillover jelenség, a stabilitás és a CO tűrőképesség között, ugyanakkor sem a katalitikus aktivitást, sem a stabilitást, sem a CO tűrőképességet nem befolyásolta az oxofil adalék anyagi minősége. A kompozit hordozós elektrokatalizátorok Pt/C vagy Pt-Ru/C referencia katalizátorokhoz viszonyított jobb teljesítőképességét 100 ppm CO-t tartalmazó hidrogénnel táplált tüzelőanyagcella-tesztberendezésben is igazolták.

Szén hordozós Sn-Pt kétfémes katalizátorok fejlesztése kizárólagos Pt-Sn kapcsolatok biztosításával

Az irányított felületi reakció módszerével Pt/Sn=3 összetétel-arányú Sn-Pt/C ötvözet elektrokatalizátorokat készítettek. A mintakészítési módszer garantálja, hogy az ón kizárólag a Pt részecskék felületére válik le, garantálva a Sn-Pt ötvözet fázis létrejöttét. In situ fotoelektron-spektroszkópiai és röntgendiffrakciós mérésekkel igazolták a $\text{PtSn} \leftrightarrow \text{Sn}^{4+} + \text{Pt}$ reverzibilis átalakulást oxigén, illetve hidrogén jelenlétének hatására. A katalizátorok elektrokémiai teljesítőképességét CO oxidációs, illetve oxigén redukciós reakciókban vizsgálták; a CO oxidációban az Sn-Pt/C katalizátorok jobbnak bizonyultak az ipari referenciaként használt Ru-Pt/C katalizátoroknál. A felületi összetétel optimális megválasztásával a kiindulási Pt/C katalizátorhoz képest az oxigén redukciós aktivitás is jelentősen javítható.

Etanol átalakulása Ni/CeO₂ modellkatalizátor felületen

Szubmonorétegnyi mennyiségű nikkellel módosított $\text{CeO}_2(111)$ felületen vizsgálták etanol viselkedését fotoelektron-spektroszkópiai módszerekkel. A korábbi tapasztalatok szerint a nikkelmentes CeO_2 felületen az etoxi adszorbeátumok bizonyos mértékű oxidációjára kerül sor, így a hőmérséklet emelésével deszorbeálódó molekulák között a rekombinálódó etanol mellett az acetaldhid megjelenése is várható. Nikkel jelenlétében, vákuumban az etoxi csoportok két átalakulási útvonalát sikerült azonosítani: többségük az etoxi csoportok dehidrogéneződése, a C-O kötés felszakadása és a keletkező termékek kondenzációja után

grafitos képződményekké alakul, kisebb részük viszont már szobahőmérsékleten acetáttá oxidálódik, ami a hőmérséklet emelésével karbonáttá alakul. A vízgőz jelenléte gátló hatású az acetát/karbonátos reakcióútra; ilyenkor csak a grafitos képződmények figyelhetők meg. A grafitos lerakódások vákuumban a CeO₂ rács oxigénje segítségével, vízgőzben a képződő felületi hidroxilcsoportok felhasználásával könnyen eltávolíthatók, 300 °C-on már gyakorlatilag szénmentes felület alakul ki. Érdeemes megjegyezni, hogy katalitikus mérésekben 300 °C körül indul gyors növekedésnek a hidrogéntermelés.

Elektrokémiai energiatárolás

Az elektrokémiai energiatárolási témájú *PLIANT FP7* európai uniós projekt keretében szuperkondenzátor előállításakor alkalmazható szén nanocső gyártósorra telepíthető minőségellenőrző berendezést fejlesztettek ki. A berendezés a futószalagon készülő elektród anyag igen gyors jellemzésére alkalmas, ezáltal a gyártási folyamat megszakítása nélkül, valós időben ad visszajelzést az esetleges minőségi változásokról. A gyors minősítést lehetővé tévő innovatív méréstechnikai megoldás sok felharmonikust tartalmazó perturbáló jellel másodpercnyi időtartam alatt pásztázza végig a teljes hangfrekvenciás tartományt, és azonnal elvégzi a mért impedancia spektrumok kiértékelését is. A berendezés további módosításával, azaz a mérőcellával összeépített előerősítő fokozat és az önálló egységben kialakított AD és DA konverterek kialakításával a laboratóriumi kivitel továbbfejlesztették, és egy kisméretű, könnyen áttelepíthető, egyszerűen kezelhető, ipari környezetben is jól használható mérőberendezést fejlesztettek ki.

Molekuláris elektronika

Az „Elektrontranszport egy molekulán mint átmeneten. Elektromos és termoelektromos áram közvetlen mérése törőátmenet technikával” című MTA magyar-cseh együttműködés keretén belül a prágai együttműködő partnerrel molekuláris elektronikai jelenségeket vizsgáltak, ezen belül egyedi szerves molekulák elektromos vezetését mérték. Az ilyen jellegű mérések úttörőnek tekinthetők, az egyedi molekulán keresztül történő elektromos vezetés mechanizmusát segítik tisztázni, illetve új típusú, molekuláris szenzorok kialakítására adnak módot. A munka során mind a magyar, mind a cseh laboratóriumban felépítették a fém-molekula-fém elektromos átmenet termoelektromos viselkedésének jellemzésére alkalmas pásztázó alagútmikroszkóp konstrukción alapuló méréstechnikát. 4,4'-bipiridin molekulán végzett mérésekkel tesztelték, és irodalmi adatokkal összehasonlítva validálták az eljárást.

Polipenténamer alapú újrahasznosítható szintetikus autógumi alapanyag szintézise

Az alapanyag szintézise egyensúlyi gyűrűnyitó metatézis polimerizációval kőolajipari melléktermékből, a gőzpirolízis során képződő alacsony hozzáadott értékkel rendelkező C5 frakcióban található ciklopentén komponensekből lehetséges. A szintetikus polimer gumialapanyag hatékony szintézisét és katalitikus depolimerizálását valósították meg enyhe reakciókörülmények között. A ciklopentén közepes gyűrűfeszültségének köszönhetően a gyűrűnyitó metatézis polimerizációjakor szobahőmérsékleten egy olyan reakció elegy képződik, amelynek összetétele – a reakció viszonylag magas entrópiaváltozásának köszönhetően – a reakcióhőmérséklet enyhe módosításával jelentősen a polimerképződés vagy a depolimerizáció irányába tolható el. Így pl. 20 tf.% kezdeti monomer koncentrációnál 0 °C-on a monomer konverzió elérheti a 85%-ot, míg 40 °C-on csak kb. 40%. Ez az egyensúlyi polimerizáció a polipenténamer alapú szintetikus gumi szintézisét 0 °C-on magas hozammal teszi lehetővé, míg az elhasználandó gumi 40-50 °C-on ugyanazon katalizátor rendszer alkalmazásával (a visszaalakult ciklopentén folyamatos kidesztillációja mellett)

depolimerizálható. A kutatási eredmények a 2016. évi Amerikai Kémiai Társaság (ACS) konferencián Philadelphiában kiemelt figyelmet kaptak, és „press released topic”-ként a konferencián tartott sajtótájékoztató keretében a széles közvélemény számára is bemutatásra kerültek.

Hazai biomassza anyagok termikus hasznosítását vizsgáló kutatások

Akácfa, repceszalma és búzaszalma alacsony hőmérsékletű pirolízisének (200-300 °C), az ún. torrefactionnek a hatását vizsgálták termogravimetria-tömegspektrometria módszerrel. A termikus vizsgálatokon kívül a kezeletlen és különböző hőmérsékleteken hőkezelt minták cellulóz, hemicellulóz és Klason lignin tartalmát is meghatározták, amelyek segítségével a hőkezelés hatására a fő alkotókban bekövetkező változásokról átfogó képet kaphatnak. Megállapították, hogy a lágyszárú növények magas alkáliion tartalma alacsony hőmérsékleten is jelentősen katalizálja mind a cellulóz, mind a lignin hőbomlását, azonban a hemicellulóz bomlását nem katalizálja. Megfigyelték, hogy a 225 °C-os hőkezelés hatására a minták hemicellulóz tartalma lényegében nem változik, azonban a savasságot okozó oldalcsoportjai már lehasadnak a hőkezelés hatására. A mérési eredményeket statisztikai módszerrel (Főkomponens elemzéssel) is feldolgozták. Ezzel szemléltetni tudták a különböző hőmérsékletű hőkezelések hatására a biomassza minták szerkezetében bekövetkező változások és a termogravimetriás paraméterek közötti összefüggéseket.

Környezetkémiai reakciókinetikai és fotokémiai kutatások

A növényi biomasszából előállítható tetrahidrofurán (THF), 2-metil-tetrahidrofurán (2MTHF) és 5-hidroximetil-furfural (5HMF) ígéretes bioüzemanyagok, és megújuló platform molekulák. Gyakorlati felhasználásuk során elkerülhetetlenül kikerülnek a környezetbe, így környezeti hatásuk vizsgálata alapvető fontosságú. A kutatócsoport munkatársai laboratóriumi alapkutatásokkal megállapították, hogy a THF és 2MTHF nagyon gyorsan reagál OH-gyökkel, ezért légköri élettartamuk rövid, az 5HMF pedig főleg fotokémiai reakciókban fogy el a környezetben.

Reakciódinamikai módszerfejlesztés

Az elemi kémiai reakciók dinamikájának elméleti modellezése területén klasszikus mechanikai módszert dolgoztak ki annak felmérésére, hogy milyen szisztematikus hibái vannak a sok atom részvételével járó reakciók dinamikai leírására használatos redukált-dimenziós módszereknek. A metán és H-atom reakciójának példáján megmutatták, hogy súlyos hibákra vezet, ha a dinamikai számításban egyes szabadsági fokok be vannak fagyasztva. A példareakció izotópkombinációjától és a modellezésre használt potenciálisenergia-felület jellegétől függően a szabadsági fokok befagyasztása miatt egyes esetekben a reaktivitás a valódinál lényegesen alacsonyabbnak, másoknál túlzottan nagyknak adódott.

Polimerek kémiai módosítása és környezetileg előnyös stabilizálása

Ez irányú kutatásaik két fő terület köré csoportosíthatók. Ez egyik irány a hiperelágazós poliglicidol alapú antioxidánsok létrehozása, amelyeket PVC termooxidatív stabilizálására kívántak alkalmazni. Az eredmények azt mutatják, hogy az előállított antioxidáns molekulák alkalmazásával hasonlóan magas stabilitás érhető el, mint a kereskedelmi forgalomban lévő kismolekulájú termékekkel, azonban az új makrostabilizátorok kioldódása jóval kisebb mértékű a PVC mátrixból. A másik irány keretében a poli(etilén-glikol)lal ojtott PVC kopolimerek szerkezetének feltérképezését végezték el, amelyből megállapítható, hogy az

összetételtől függően az ojtott kopolimerek üvegesedési hőmérséklete széles tartományban változik. Kísérletileg igazolták, hogy ezek felületén a fehérjeletapadás kismértékű, ami lehetőséget kínál bioanyagként történő alkalmazásra.

Jól definiált szerkezetű multifunkciós polimerek

Új iniciátorrendszert dolgoztak ki biokompatibilis hiperelágazásos poliglicidol előállítására, melynek szelektív módosításával (bio)konjugációs reakciókban releváns csoportokat tartalmazó monofunkciós polimereket állítottak elő. Egyszerű eljárást dolgoztak ki amfifil karakterű mono-alkil csoportot tartalmazó hiperelágazásos poliglicidol előállítására, továbbá igazolták a makromolekula felületaktív tulajdonságát, és elsőként alkalmazták poli(tejsav-glikolsav) alapú gyógyszerhordozó nanorészecske előállítására és stabilizálására. Tanulmányozták a poli(etilén-glikol)-poliakrilsav és poli(poli(etilén-glikol)-metakrilát)-poliakrilsav interpolimer komplexek hőmérsékletérzékeny oldatait, és feltárták az átmeneti hőmérséklet függését az összetevők szerkezeti és az oldat koncentrációs paramétereitől. Szisztematikus kísérletekkel meghatározták a poli(N-izopropil-akrilamid) kritikus oldhatósági hőmérsékletének optimális, standardizálható körülményeit, mely kiterjeszhető más hőmérséklet érzékeny (intelligens) polimerek esetére is. Poli(N-izopropil-akrilamid) alapú hibrid kopolimereket és géleket állítottak elő, és vizsgálták ezek alapvető tulajdonságait, például hatóanyagleadásukat. Eredményeik azt mutatják, hogy ezek az újszerű hibrid gélek alkalmasak jól szabályozható hatóanyagleadásra. Kutatták poliizobutilén és poli(etil-oxazolin) láncvégi funkcionálásának lehetőségeit, és optimális körülményeket dolgoztak ki. Új reakciókörülmények kidolgozásával és környezetileg előnyös oldószerkeverékekkel sikeresen polimerizáltak apoláris akrilátokat egy újszerű élő polimerizációs eljárással, SET-LRP-vel.

Biokompatibilis polimerek felületmódosítása

Polimetil-metakrilát (PMMA) felületét módosították, ezáltal növelve biokompatibilitását. A mű szemlencseként is használatos PMMA felületén hoztak létre egy olyan réteget, amely terveik szerint a hosszú távú felhasználást nagymértékben javítja azáltal, hogy meggátolja a baktériumok, fehérjék megtapadását a felületen. Első lépésben a felületet aktiválták hidegplazmás eljárással, ezzel funkciós csoportokat, gyököket hoztak létre, amihez ezt követően polivinilpirrolidon és csersav makromolekulákat kapcsoltak. Mindkét vegyület biokompatibilis, a csersav pedig antibakteriális hatású is, így a felvitt réteg feltehetően megtartja baktériumölő tulajdonságát. Bár mindkét makromolekulát használják a gyógyászatban, élelmiszeriparban, de felületmódosításra elsőként alkalmazták. Eredményeik (FTIR, XPS, AFM) egyértelműen bizonyítják, hogy a felületet sikerült módosítani. Mivel a felületkezelés csak néhány nanométeres vastagságban történt, elmondható, hogy a kiindulási PMMA-t kedvező tömbi tulajdonságainak megtartása mellett új felületi tulajdonságokkal sikerült felruházni.

Önszerveződéssel képződő szabályozható szerkezetű nanorészecskék

Külső hatásra szerkezetváltozással reagáló nanorészecskék iránt széleskörű érdeklődés tapasztalható sokoldalú felhasználási lehetőségük miatt. A kutatócsoport tagjai francia kutatóintézettel együttműködve 1-metil-3-tetradecil-imidazolium kationok és vízben jól oldódó, nem toxikus makrociklusos vegyületcsalád, a 4-szulfonáto-kalixarének különböző gyűrűméretű tagjainak spontán önszerveződésével állítottak elő gömb alakú nanorészecskéket. Feltárták, hogy milyen körülmények között valósítható meg reverzibilis nanorészecske-szupramolekuláris micella átalakulás. Megállapították, hogy a hőmérséklet, a só koncentráció, a komponensek mennyiségének aránya és a makrociklus mérete miként

befolyásolja az asszociációs folyamatok termodinamikai paramétereit és a szerkezetváltozást. 4-Szulfonáto-kalixarének jelenlétében több mint 50-szeres kritikus micella koncentráció csökkenést sikerült elérniük, így jelentősen növelni tudták a felületaktív anyag hatékonyságát. Biokompatibilis makrociklus és protonált kitozán önszerveződésével gyógyászati szempontból fontos alkaloidok hordozására alkalmas nanorészecskéket szintetizáltak.

Indukált konformáció változás természetes és nem-természetes peptidekben – a Biomolekuláris Önrendeződés „Lendület” Kutatócsoport kiemelkedő kutatási eredménye

Az antimikrobiális és egyéb membránaktív peptidek biológiai aktivitása szorosan összefügg a peptid – sejtmembrán kölcsönhatással, illetve a peptidek eközben végbemenő térszerkezet változásával. Ennek megismerése céljából tanulmányozták a CM15 antimikrobiális peptid hatását lipid kettősrétegre. Cirkuáris dikroizmus (CD) spektroszkópia és UV abszorpciós spektroszkópia módszerekkel elsőként igazolták, hogy az említett peptiden jelentős konformációs változás mehet végbe kontrollált körülmények között is, negatívan töltött szintetikus biomolekulák jelenlétében. Indukált CD sávok mérésével és molekulamodellezési számításokkal tisztázták ezen komplexek szerkezeti tulajdonságait. A jelenség általános megértéséhez újonnan szintetizált foldamer (nem természetes alapú peptid) – lipid kölcsönhatásait is tanulmányozták vezikuláris rendszerekben. Infravörös spektroszkópiás (ATR-FTIR) és lineárisan polarizált fényspektroszkópiás (LD) mérések alapján kimutatták a peptid beépülését DOPC (dioleoil-foszfátidilkolin) vezikulákba. A modell membrán liposzómák csak részlegesen alkalmasak az igazi sejtmembrán mimikálására, ezért komplex modellek vizsgálatát is elindították. Ennek keretében elsőként mutatták ki a vörösvértestből izolált extracelluláris vezikulák orientálhatóságát polarizált fényspektroszkópia módszerével. Ezen potenciálisan gyógyászati és/vagy diagnosztikai szereppel bíró vezikulák izolálása és jellemzése még kevésbé standardizált. A csoportban egy új, gyors kivitelezésű módszert sikerült kidolgozni a részecskék jellemzésére, amelytől remélhető, hogy ezen lipid rendszerek komplex membránmodellként is alkalmazhatóak lesznek.

Természetes és mesterséges vezikula rendszerek előállítás, szeparálása, jellemzése, orvosi célra történő fejlesztése

A gyógyászatban már alkalmazott úgynevezett pegilált, azaz PEG-lánccal stabilizált vezikulák esetében a kozmotróp sók által kiváltott vezikula-aggregációt értelmezték a PEG lánc szerkezeti változásainak (a C-O-C kötések trans-gauche aránya) alapján. Úttörő módon elsőként kezdtek el extracelluláris vezikulák (EVk) IR spektroszkópiai vizsgálatával foglalkozni. Olyan spektrális markereket kerestek, amelyekkel egyszerűen, megbízhatóan lehet jellemezni az egyes EV szubpopulációkat (exoszóma, mikrovezikula, apoptotikus test), és amelyek az EVk szeparációjának gyors ellenőrzéséhez vezethetnek. Ilyen például az amid I és a C-H vegyértékrezgések aránya, amely jellemzően eltérő értékeket ad a különböző szubpopulációk esetében.

Oldatfázisú bio-makromolekulák, fehérjék méret- és alakmeghatározását biztosító röntgenszórási metodika fejlesztése

A kisszögű röntgenszórás módszerét fejlesztve oldott állapotú biológiai makromolekulák és fehérjék méret, valamint alak meghatározását végezték el. Az alak meghatározás módszerének fejlesztése érdekében foszfolipid keverékből álló bicella modellrendszer ellipticitás változásának követésére röntgenszórás és NMR technikákat alkalmaztak, és a továbbiakban a két módszer által nyerhető adatok összehasonlító vizsgálatát végezték el. Meghatározták a bicella modellrendszerbe ágyazott melittin és KALP23 fehérjék

alakmódosító hatását. Az eukarióta sejtekben megtalálható kalmodulin fehérje apo (Ca ionban szegény), ill. Ca ionnal kötött formáinak szerkezeti eltérését jellemezték. Igazolták a tripszin enzimnek az egyrétegű vezikulákban történő bezáródását. A ROCK 2 kináz rendszeren végzett kisszögű röntgenszórásos vizsgálatok eredményei alapján a pontosabb, a rendszer szinkrotron állomáson kivitelezett szerkezeti jellemzését készítették elő. A kisszögű röntgenszórásos vizsgálataikkal egyúttal hozzájárultak a szinkrotron mérési idő pályázat elnyeréséhez. Elvégezték a nagyméretű fenilalanin-liáz (PAL) enzim oldatfázisú, kislebontású alakmeghatározását.

Szabályozott hatóanyag-leadású biokompatibilis és biológiailag lebontható kompozit nanorészecskék

Három féle poli(tejsav-glikolsav) (PLGA) és két fajta polietilén-glikol-poli(tejsav-glikolsav) (PEG-PLGA) kopolimerrel, összetett emulziós módszer segítségével 80-90% kapszulázási hatékonysággal állítottak elő 160-170 nm átlag szemcseméretű, interferon-béta (szklerózis multiplex elleni) hatóanyagot tartalmazó nanorészecskéket. A PEG-PLGA polimerből készült nanorészecskék az elvárásoknak megfelelően jelentős mértékben képesek voltak elkerülni a sejtek által történő felvételt. Ezzel szemben a PLGA polimerrel előállított nanorészecskék nagy részét a vizsgált sejtek bekebelezték.

Szintén PLGA és PEG-PLGA kopolimerekkel sorafenib hatóanyagot (hepatocelluláris karcinóma kezelésére) mikrokapszuláztak emulziós módszerrel. A létrehozott 200 nm körüli átlagméretű nanorészecskék sejtfelvételi vizsgálatokban az interferon tartalmú részecskékhez hasonlóan viselkedtek. A részecskék karcinóma sejtekre gyakorolt citotoxicitását jelentősnek találták. A PEG-gel módosított kopolimerekből felépülő nanoszemcsék in vivo kísérletekben szignifikánsan hosszabb vérbeli tartózkodási idővel rendelkeztek.

Elektroanalitikai fejlesztések

Kardiovaszkuláris megbetegedések kezelésében fontos szerepet játszó fehérjebontó enzimek aktivitásának lokális jellemzésére elektroaktív biomolekula-konjugátum vékonyrétegekkel módosított mikro-elektrodokat alkalmaztak. Véralvadék modellben végbemenő enzimaktivációs folyamatokat követték elektrokémiai úton különböző, a vérben neutrofil sejtek által extracellulárisan kiválasztott komponens jelenlétében. A mérések igazolták a komponensek fibrin oldódási sebességet befolyásoló hatását. A kialakított mérési eljárást vérmintában történő alvadék oldódás vizsgálatára is tesztelték.

Szerves és vizes fázis közötti megoszlás és kromatográfiás adatok modellezése

Egy egyedülálló, szisztematikus algoritmust fejlesztettek ki a legmegfelelőbb lipofilicitási jellemzők (indexek) kiválasztására és csoportosításukra két nemparaméteres módszer: a rangszám-különbségek összege és az általánosított párkorrelációs módszer segítségével. ANOVA és hőtésképek segítettek a jellemzők csoportosításában. A kísérletes, rázóedényes módszer adta a legjobb eredményt, de közvetlenül utána a számítós módszerek következnek. Az oktadecil-szilika fázisokon a mobil fázis milyensége (metanol vagy acetónitril) nem játszik szerepet.

Több évtizedes próbálkozás után a Szentpétervári Egyetem kutatóival együttműködve sikerült hihető magyarázatot adni a Kováts indexek (a legjobban reprodukálható retenciós adat) anomális hőmérsékletfüggésére. Az elméleti magyarázat nemcsak az analizálandó anyag polaritásával operál, hanem a minta mennyiségével is. Kimutatták, hogy az oszlopra adagolt mintamennyiség dinamikusan megváltoztatja az oszlop elválasztási tulajdonságait, mégpedig úgy, hogy a háromféle hőmérsékletfüggés (csökkenő, növekvő, minimumos) magyarázhatóvá

válí. A korábbi elképzeléseket (elárasztás és adszorpciós hatások) cáfolni tudták. Ezzel több évtizedes vita végére tettek pontot.

b) Tudomány és társadalom

A társadalom széles rétegei számára tették közkincsé tudományos eredményeiket ismeretterjesztő folyóiratcikkekkel és rádióriporttal. Előadásokkal, demonstrációkkal csatlakoztak más intézvények rendezvényeihez, több saját kezdeményezésű programjukkal népszerűsítették a tudományt, segítették középiskolások tehetséggondozását és pályaválasztását, valamint a legkisebbekben igyekeztek felkelteni az érdeklődést a természettudományok iránti.

A Tudományos Ismeretterjesztő Társulat és az MTA Természettudományi Kutatóközpont közös ismeretterjesztő cikkpályázatán a Természet Világa kategóriában az intézet fiatal munkatársa második helyezést ért el „Pörkölt kávébab és hőkezelt biomassza” című munkájával.

Az OTKA magazinban közérthető módon írtak a „Molekulahordók”, valamint a „Hulladékok hóbontása pirolízissel” című kutatásokról.

Az intézet egyik kutatócsoport-vezetőjét a Hitrádió munkatársa által készített interjúban kérdezték a megújuló energiákról. A beszélgetésben érintették a különbséget az alternatív energia és a megújuló energia között, a hazánkban elterjedt alternatív, illetve megújuló energiaforrásokról, valamint az ezekhez kapcsolódó kutatási irányokról: a hidrogén tüzelőanyag-cellás és a direkt metanol tüzelőanyag-cellákon alapuló technológiákról.

A Kossuth Rádióban, interjúban számoltak be a „Lendület” támogatást nyert Biomolekuláris Önrendeződés csoport kutatási terveiről. Az NKFIH honlapján a csoport vezetőjének korábbi tevékenységéről és a Magyarországra való visszaköltözésének szakmai megfontolásairól írtak. Az MTA honlapján rövid közlemény mutatta be a csoport nem természetes peptidszármazékok szintézisére is alkalmas reakciókról szóló összefoglaló cikkét.

Más intézmények szervezésében, külső helyszíneken is részt vettek a tudomány népszerűsítésében

Az „Élet - Tudomány - Történelem” konferencián (2016. június 1. MTA Székház) „A toxikus fémek szerepe az emberi betegségekben. Történeti áttekintés az ókortól napjainkig” címmel tartottak előadást.

A Szellemi Tulajdon Nemzeti Hivatala székházában a Hamisítás Elleni Nemzeti Testület Műtárgyhamisítás elleni munkacsoportja rendezvényén (2016. április 7.) szerepeltek.

Az ELTE középiskolásoknak szóló Alkímia ma sorozat 2016. január 28-i előadás témája „Analitikusok a makromolekulák nyomában” volt, a március 10-i előadás pedig arról szólt, hogy "Hogyan mérünk tömeget, hőmérsékletet és nyomást manapság?".

Az MTA EK Energetikai szemináriumai keretén belül, 2016. április 18-án a „Polimer elektrolit membrán tüzelőanyag elemek katalitikus problémái” témáról beszéltek.

A Nemzetgazdasági Minisztériumban kerül sor a „metanolos tüzelőanyag-cellák” workshopra, amelyen a „Tüzelőanyag-cellás járművek a jelenlegi elterjedtsége, piaci helyzete és várható fejlődése” című előadás hangzott el.

A Csodák Palotája Múzeumok Éjszakája rendezvényén az intézet egyik tudományos tanácsadója „Polimer (műanyag) korszakban élünk: A fogkefétől a számítógépes csipekig és gyógyszerkibocsátó szívkoszorúér sztentekig” címmel tartott előadást.

„Miben mások a makromolekulák?” címmel ugyancsak a polimerekről adott elő az intézet egyik fiatal munkatársa az V. Eötvös Természettudományos Táborban.

A Csodák Palotája Tudományos Csopa Cafe programján, 2016. december 13-án az intézet egyik főmunkatársa „Fény és anyag - színképelemzés a természettudományok szolgálatában című” előadásában bemutatta, hogy miként járult hozzá a színképelemzés a modern kémia és fizika tudományának kialakulásához, és hogyan szolgálja a mai napig a tudomány és az ipari kutatás-fejlesztés szakembereit.

Saját szervezésű programok rendezése

Az MTA TTK épületében 2016. június 6-án került sor a „Az elektro-mobilitás és a hidrogén-mobilitás lehetőségei, feladatai Magyarországon és az EU-ban” című információs napon a „Kapcsolódás az EU hidrogén és tüzelőanyag-cellák közös vállalkozásához (FCH JU) és annak kutatási szervezetéhez (N.ERGHY)” című előadásra.

Megszervezték az „E-mobilitás másképpen II” konferenciát Budapesten, az EXPO területén 2016. október 19-én, amelyen a metanol tüzelőanyag-cellák fejlesztésének problémáiról beszéltek.

Marie Curie workshop keretében a Marie Curie ösztöndíjakra jelentkező fiatalok felkészülését segítő többnapos tanfolyamot szerveztek.

Az intézet a szervezője az „AKI Kíváncsi Kémikus” kutatótábor sorozatnak, amelynek nyolcadik táborát szervezték meg 2016. június végén. Az egy hetes programban 25 tehetséges középiskolás vehetett részt. A diákok tizenkét kémiai, illetve biológiai téma kutatásába kapcsolódhattak be, melyek közül hetet az intézet munkatársai irányítottak. Ezek a következők voltak: Hogyan épül fel a sejtmembrán? Egyszerű modellek előállítása és vizsgálata; Liposzómás gyógyszerhordozó rendszerek; Kétdimenziós kémia; Polimerek – Az óriásmolekulák csodálatos világa; A 9,9'-biantril különleges fluoreszcenciája; Katalízis fűvel-fával: vegyianyagok előállítása lignocellulózból; Mennyi energiát nyerhetünk ki egy elektrokémiai áramforrásból? A rendezvény megnyitóján az intézet egyik fiatal kutatója „Lehet „intelligens” egy polimer?” címmel tartott plenáris előadást. A kutatótáborban készített munkájukról a diákok dolgozatokat készítettek, melyeket a korábbi évekhez hasonlóan ISBN számmal rendelkező kötetbe szerkesztettek, és kiadtak.

A Magyar Tudomány Ünnepe, 2016. november 29-én „Oknyomozás tudományos módszerekkel” címmel nyílt napot rendezett az intézet, melyen a Szinyei Merse Pál Gimnázium 50 kémia és biológia fakultációra járó diákja vett részt. A diákok érdeklődésüknek megfelelően választhattak a tizenhat labor nyújtotta kínálatból, ahol érdekes kutatási projektekkel ismerkedhettek meg.

2016 decemberében a kutatóközpont munkatársai ismét elhozták óvodás és kisiskolás gyermekeiket, unokáikat a hagyományos „Kémikulás” rendezvényre, ahol egy tematikus program keretében az ElektroKémikulás várta a piciket, akivel játékos elektrokémiai kísérleteket hajthattak végre.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

Hazai kapcsolatok

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

Intenzív kapcsolatokat tartanak fenn a hazai oktatási intézményekkel. A közös kutatások mellett az intézet munkatársai részt vesznek a graduális és posztgraduális képzésben, előadásokat tartanak, gyakorlatokat vezetnek a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi

Egyetemen (BME), az Eötvös Loránd Tudományegyetemen (ELTE), a Pannon Egyetemen (PE) és az Óbudai Egyetemen. PhD, MSc, BSc és TDK témákat vezetnek a fenti egyetemeken kívül a Szent István Egyetem hallgatóinak is. A BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Karával és a Pannon Egyetem (PE) Műszaki Informatikai Karának Műszaki Kémiai Intézetével különösen szoros az együttműködés, hiszen velük közös laboratóriumot tartanak fenn.

ELTE Kémiai Intézet Határfelületi- és Nanoszerkezetek Laboratóriumával közösen elnyert MEDinPROT Szinergia pályázat keretében különféle szerkezetű polimerek biokompatibilitását jellemezték. További két MEDinPROT pályázatban működnek együtt MTA-ELTE Fehérjemodellező Kutatócsoporttal: fehérjék oldatbeli szerkezetét határozták meg SAXS és NMR módszerekkel, illetve poli(N-izopropil-akrilamid) és globuláris, valamint rendezetlen fehérjék hőmérsékletfüggő kölcsönhatásait vizsgálták NMR spektroszkópiával. Ez utóbbi projektben részt vesz az MTA TTK Enzimológiai Intézet is.

Az MTA kutatóhálózatának intézeteivel is sokrétű kutatási kapcsolatban állnak. Az együttműködésekhez speciális szakismereteikkel és színvonalas kutatást lehetővé tevő műszerparkjukkal járulnak hozzá. Kutatási eredményeik gyakorlati megvalósításában kis- és nagyvállalatokkal kialakított kapcsolatrendszerük segít.

A kutatás-fejlesztési és oktatási tevékenységük mellett az intézet kutatói nagy számban vesznek részt az MTA bizottságainak, munkabizottságainak és más tudományos testületeknek, valamint folyóiratok szerkesztőbizottságainak munkájában.

Nemzetközi kapcsolatok

Mesterséges lökéshullámmal létrehozott és aszteroida becsapódás során képződött gyémántszerkezetek komplex vizsgálatát kezdték meg a University College London (Nagy-Britannia) és az MTA Wigner Fizikai Kutatóközpont kutatóinak együttműködésével.

Természetes (barlangi) és mesterséges (laboratóriumi körülmények között előállított) karbonátok szerkezetének és izotóp összetételének összehasonlítását végzik a Graz University of Technology (Austria) és az MTA Csillagászati és Földtudományi Kutatóközpont munkatársaival közösen. A kapcsolattartást az MTA és az Osztrák Akadémia egyezménye teszi lehetővé.

Akadémia-ipar mobilitási pályázatban (H2020 MSCA RISE – FORMILK) ír és szlovák részvétellel innovatív technológiát dolgoznak ki enzim aktivitás meghatározására tejben.

MÖB DAAD kutatócsere projekt keretében az Universitát Ulm (Németország) munkatársaival közösen az elektrokémiai kettősréteg átrendeződési folyamatait vizsgálják ionfolyadékokban.

Együttműködésben a Heyrovsky Institute of the CAS (Prága, Cseh Köztársaság) kutatóival elektromos és termoelektromos áram közvetlen mérése alkalmas nagy érzékenységű, egyedi mérőberendezést fejlesztettek ki, amellyel egy molekulán mint átmeneten képesek elektrontranszportot mérni.

Az University of Novi Sad (Novi Sad, Szerbia) oktatóival közösen korróziós folyamatokat tanulmányoznak kvarckristály mikromérleg alkalmazásával.

A Szlovák Tudományos Akadémia Polimer Intézetével (Pozsony, Szlovákia) elnyert mobilitási pályázattal támogatott együttműködésben új típusú, kisebb környezeti kockázatot jelentő makromolekuláris stabilizátorokat dolgoznak ki.

Többfunkciós elágazó polimerekkel kapszulázott ftalocianin pigmenteket fejlesztenek ki in situ nyomtatáshoz. A kétoldalú nemzetközi egyezményen alapuló kutatási projekt együttműködő partnere a National Research Center, Kairo (Egyiptom).

Funkcionalizált egyenes szénláncú és ciklikus polimerek szintézise témában együttműködtek a Texas A&M University at Qatar (Doha, Qatar) és a California Institute of Technology (Pasadena, CA, USA) intézményekkel. Az együttműködést a Qatar Nemzeti Kutatási Alap támogatja.

COST együttműködésben a Cordoba Egyetemmel (Rabanales, Spanyolország) alacsony környezetterhelést eredményező technológiákat dolgoznak ki kémiai alapanyagok és energiahordozók gyártására.

Az intézet egyik fiatal kutatója a Karlsruhe Institute of Technology (Németország) vendégeként impulzus-lézer fotolízissel tanulmányozta OH gyök és gyűrűs éterek reakcióját. A kint tartózkodás költségeit a „Chemistry of smart energy carriers and technologies” COST akció fedezte.

MTA és a Bolgár Tudományos Akadémia közötti megállapodás keretében az Institute of Organic Chemistry with Centre of Phytochemistry (Szófia, Bulgária) kutatóival új típusú nanopórusos szilikátokat alkalmaznak gyógyszer hatóanyag hordozó rendszerként és katalitikus célokra.

A Humboldt tapasztalt kutatói ösztöndíj támogatásával sorafenibet és gadolíniumot tartalmazó nanokompozitokat fejlesztenek ki hepatocelluláris karcinóma diagnosztizálására és kezelésére. A fogadó intézmény a Goethe Universitát (Frankfurt am Main, Németország).

Az East Paris Institute of Chemistry and Materials Science (Franciaország) a partner a molekulák önszerveződésével előállított szabályozható nanorendszerek kutatásában.

MTA-JSPS együttműködési projekt keretében a Saitama University (Japan) munkatársaival közösen feltárták, hogy egy reverzibilis redox reakcióra képes szerves kation és negatív töltéssel rendelkező makrociklusos vegyület között milyen asszociációs folyamatok játszódhatnak le.

TÉT együttműködésben az Uniklinik RWTH Aachen (Németország) kutatóival liposzómás radionukleozidot állítottak elő, és tesztelték biológiai működését.

Foldamerekben használható aminosavak szintézise témában a Chalmers University (Göteborg, Svédország) kutatóival dolgoznak együtt. A Tokyo Institute of Technology (Japan), és a Harvard University (Cambridge, MA, USA) professzoraival önszerveződő molekuláris motor-DNS komplexeket tanulmányoznak rekombinációs reakció folyamatában. Mintázatfelismerés, osztályozás, kromatográfiás és spektroszkópiai adatok modellezése élelmiszerek eredetvizsgálatára és a biológiai aktivitás jellemzésére témában működnek együtt a Belgrádi Egyetem (Szerbia) kutatójával. A közös munka kereteit MTA bilaterális egyezmény adja.

A következő tudományos jelentőséggel is bíró külföldi szerződéses munkákban vesznek részt:
A Borealis Polyolefine GmbH-val (Linz, Austria), a Kompetenzzentrum Holz GmbH-val (Linz, Austria) és a BME-vel együttműködésben hibrid polipropilén kompozitok kifejlesztésén dolgoznak. Elsősorban szerves szálak alkalmazásával a műanyag kompozitok tulajdonságainak (merevség, ütésállóság, tömeg, ár) megfelelő kombinációját kívánják elérni.

A SABIC Petrochemicals B.V. (Hollandia) megbízásából tanulmányozzák ligninnek polietilén stabilizátoraként való alkalmazhatóságát.

A Taiwan Liposome Company Ltd. megbízásából sztérikusan stabilizált liposzómák PEG-rétegvastagságát határozták meg SAXS módszerrel.

Három jelentős nemzetközi konferencia szervezésével járultak hozzá az intézet külkapcsolataihoz: World Congress on Living Polymerizations and Polymers, Budapest, 2016. május 29. – június 3.; 3rd Conference on Biobased Polymers and Composites, Szeged, 2016. augusztus 28. – szeptember 1.; 13th Pannonian Symposium on Catalysis, Siófok, 2016. szeptember 19-23.

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A H2020 MSCA RISE – FORMILK 690898 pályázat keretében innovatív technológiát dolgoznak ki enzim aktivitás meghatározására tejben. Szlovák, hazai és ír akadémiai és gazdasági szereplők (Univerzita Komenskeho v Bratislave; University College Dublin; MTA TTK AKI; Powertec sro., Szlovákia; Sonas Ltd., Írország; Magyar Tejgazdasági Kutató Intézet) részvételével 2016 januárjában indult a projekt. A külföldi kiküldetések során ígéretes kutatási eredmények születtek biomolekulákkal stabilizált fém nanorészecskék szenzorikában történő alkalmazhatóságával, tej modell lipid-fehérje kevert vékonyrétegek stabilitásával és tejben alkalmazott táplálék kiegészítők stabilitásával kapcsolatban.

Az OTKA NN 117986 projekt keretében 2016 áprilisa óta alga foszfolipidből mint megújuló nyersanyagforrásból kiindulva állítanak elő olefin metatézissel biológiailag lebomló polimereket. Az alga olaj gyártása során alacsony hozzáadott értékű foszfolipidek képződnek, amelyek hasznosításával többszörösen telítetlen zsírsav észterekből poliészter és poliamid alapanyagok állíthatók elő. Együttműködő partner a Yale University, Center for Green Chemistry and Green Engineering, New Haven, CT, USA.

Az EGT/Norvég alap FM támogatásával a Terra Humana Kft. vezetésével 2016 májusa óta dolgoznak az „Új zöld ipari technológia alkalmazása és piaci bevezetése melléktermékekből előállított magas foszfor tartalmú csontszén szilárd fermentációjával” című pályázaton. A projekt keretében fizikai kémiai módszerekkel jellemezték az állati melléktermékeket (esősorban csontliszt), illetve pirolízisük szilárd és cseppfolyós termékeit. Kísérleteket végeztek a pirolízis olajban nagy koncentrációban megjelenő hosszúszenláncú savnitrilek hidrolizálására, a nitrogéntartalom kinyerésére. Vizsgálataik tudományos értékű eredményeket ígérnek.

A 2016. évi Lendület pályázat egyik nyertese az intézet munkatársa. A 2016 júniusában indult „Membrán aktív mesterséges szerveződések” című projektben a következő eredményeket érték el: Egy új, gyors kivitelezésű módszert dolgoztak ki extracelluláris vezikulák jellemzésére, melyből remélhető, hogy ezen lipid rendszerek a jövőben komplex membránmodellként is alkalmazhatóak lesznek membránaktív peptidok aktivitásának vizsgálatakor. Ezen felül egy rendezetlen szerkezetű antimikrobiális peptid konformációváltozását indukálták negatívan töltött szintetikus, biológiailag releváns molekulákkal, ezt CD és UV abszorpciós spektroszkópia módszerekkel, valamint molekulamodelllezési technikákkal igazolták.

A „Bionanotechnológiai kutatások betegségek hatékony kimutatása, újfajta hatóanyagok kifejlesztése és bioinspirált intelligens nanoanyagok előállítása érdekében” című GINOP-2.3.2-15-2016-00017 pályázatban (projekvezető a Pannon Egyetem) 2016 szeptemberében

kezdődött meg a munka. Poli(tejsav-glikolsav) és polietilén-glikol-poli(tejsav-glikolsav) kopolimerekkel fehérje típusú (szklerózis multiplex kezelésére), illetve szerves rákellenes gyógyszert tartalmazó biokompatibilis és biológiailag lebontható nanorészecskéket állítottak elő. A nanorészecskék fizikai, kémiai és in vitro hatóanyagleadási és citotoxicitási elemzését elvégezték, és megkezdték az in vivo vizsgálatokat. Tanulmányozták egy biológiailag aktív természetes alkaloid, a flavopereirin kukurbit[7]uril apoláris üregébe ékelődésének kinetikáját különböző hőmérsékleteken. Nagypontosságú, egyszerű módszert fejlesztettek ki kukurbit[7]uril komplexek disszociációs sebességi állandójának meghatározására.

A 2016 szeptemberében indult Magyar-indiai Tét projekt (Tét_15_IN-1-2016-0034) célja „Katalitikus zöldkémiai eljárás fejlesztése vegyi anyagok és üzemanyagok előállítására lignocellulózából”. Eddig elért eredmények: Üzemanyagként, illetve üzemanyag adalékként alkalmazható, hosszú szénláncú alkoholokat, ill. paraffinokat állítottak elő biomasszából nyerhető rövid szénláncú alkoholokból és ketonokból heterogén katalizátorok segítségével. A lignocellulóz sav, illetve enzim katalizátorok jelenlétében különféle platform vegyületekké, pl. etanollá és acetonná alakítható. Első lépésben az acetont etanollal Guerbet alkilezésével hosszabb szénláncú ($C_5 - C_{19}$) ketonokat, illetve alkoholokat állítottak elő Ni-tartalmú Mg,Al-hidrotalcit katalizátoron, ezt követően a keletkezett alkoholokat, illetve ketonokat alkánokká redukálták NiMo/ γ -Al₂O₃ katalizátoron. Vizsgálták továbbá az etanol Guerbet önkapcsolódását hosszabb szénláncú alkoholokká Pd tartalmú, lúggal módosított aktív szén katalizátoron.

Az „Új galenikus gyógyszerkészítmények kutatás-fejlesztése és a gyártásukat biztosító infrastruktúra kialakítása” című GINOP-2.2.1-15-2016-00023 pályázat vezető intézménye az Egis Gyógyszergyár Zrt., az intézeten kívül résztvevő még a Pannon Egyetem és a Szegedi Tudományegyetem. A munka 2016 októberében vette kezdetét, az azóta eltelt időben áttekintették a hatóanyagról rendelkezésre álló irodalmat, elkezdték vizsgálni antioxidáns tulajdonságait és elektrokémiai detektálhatóságát. Megállapították, hogy a hatóanyag nem rendelkezik Fe³⁺ redukáló képességgel, és ICP-MS eredményei nem mutatnak jelentősebb szennyeződést. A bőrgyógyászatban alkalmazott hatóanyag liposzómák foszfolipid kettősrétegével való kölcsönhatását jellemezték kisszögű röntgenszórással, fagyasztva töréssel kombinált transzmissziós elektronmikroszkópiával és infravörös spektroszkópiával. Olaj/víz emulziós módszerrel többféle kapszulázó polimerrel létrehoztak topikális alkalmazásra szánt nanokompozitokat. Nanoszemcsés hatóanyag előállítását vizsgálták precipitációs és porlasztva szárítási módszerekkel ultrahang és növekedésgátlást biztosító és kapszulázó polimerek jelenlétében.

Az „Épületek korszerű hőtárolása környezetbarát fázisváltó anyagok alkalmazásával építő- és szigetelőelemekben” című GINOP-2.2.1-15-2016-00010 pályázat kezdete, 2016 októberétől a megnövelték a fázisváltó hőtároló mikrokapszulák előállításának léptékét, és kidolgozták a léptéknöveléshez szükséges technológiai változtatásokat. A projektet vezető intézmény a Thermofoam Kft., az intézeten kívül résztvevő még a Pannon Egyetem.

A „Módszerek fejlesztése pontos és gyorsan számítható analitikus potenciálisenergia-felületek előállítására és alkalmazásuk elemi reakciók dinamikájának vizsgálatában” című PD_16 120776 pályázat keretében 2016 októberétől kifejlesztettek egy újszerű, teljesen automatizált módszert félmerek molekulák konvencionális erőterének paraméterezésére, amelyhez rezgési analízis eredményeket használnak fel.

A PD 121326 pályázat célja „Biomimetikus referencia nanorészecskék előállítása extracelluláris vezikulák jellemzéséhez”. A 2016 októberében indult projektben üreges,

mezopórusos szilika nanorészecskéket állítottak elő, és különböző módszerekkel (TEM, SAXS, DLS, FTIR, NTA, RPS) jellemezték azokat.

A "Polimer kompozit termékek előállítása rövid ciklusidejű, automatizált gyártástechnológia segítségével gépjárműipari alkalmazásokra, különös tekintettel a kompozit elemek komplexitására és újrafeldolgozhatóságára" című NVKP_16-1-2016-0046 nyertes pályázatban a 2016. december 1-én kezdődött el a munka. A pályázat vezetője az Evopro Systems Engineering Kft., az intézet mellett résztvevő még az eCon Engineering Mérnöki, Szolgáltató Kft. és a BME.

2017. januárban indulnak az NVKP_16-1-2016-007 „Anyagtudományi kutatás és fejlesztés az extracelluláris vezikula alapú orvosdiagnosztika megvalósításához” című, és a H2020 735977 jelű „A Tüzelőanyag Cellák és a Hidrogén technológiák fejlődése érdekében a jogi szabályok és adminisztratív folyamatok azonosítása, a jogi akadályok vizsgálata és megszüntetésüknek támogatása” című, 2017. februárban pedig a NVKP-16-1-2016-0045 „Innovatív fotooxidációs víztisztítási technológia kidolgozása szerves mikroszennyezők eltávolítására biológiai úton tisztított szennyvizekből” című pályázatok.

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Bozsódi B, Romhányi V, Pataki P, Kun D, Renner K, Pukánszky B: Modification of interactions in polypropylene/lignosulfonate blends. *Materials and Design*, 103: 32-39 (2016) <http://real.mtak.hu/id/eprint/41642>
2. Czégény Zs, Bozi J, Sebestyén Z, Blaszó M, Jakab E, Barta-Rajnai E, et al. (4): Thermal behaviour of selected flavour ingredients and additives under simulated cigarette combustion and tobacco heating conditions. *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*, 121: 190-204 (2016) <http://real.mtak.hu/id/eprint/39789>
3. Fazekas P, Czégény Zs, Mink J, Bódis E, Klébert Sz, Németh Cs, et al. (3, Keszler AM, Károly Z, Szépvolgyi J): Decomposition of Poly(vinyl chloride) in Inductively Coupled Radiofrequency Thermal Plasma. *Chemical Engineering Journal*, 302: 163-171 (2016) <http://real.mtak.hu/id/eprint/35346>
4. Feczkó T, Fodor-Kardos A, Sivakumaran M, Shubhra QTH: In vitro IFN- α release from IFN- α - and pegylated IFN- α -loaded poly(lactic-co-glycolic acid) and pegylated poly(lactic-co-glycolic acid) nanoparticles. *Nanomedicine*, 11: 2029-2034 (2016) <http://real.mtak.hu/id/eprint/44974>
5. Fekete É, Lengyel B, Cserfalvi T, Pajkossy T: Electrochemical dissolution of aluminium in electrocoagulation experiments. *Journal of Solid State Electrochemistry*, 20: 3107-3114 (2016) <http://real.mtak.hu/id/eprint/41925>
6. Fodor Cs, Stumphauer T, Thomann R, Thomann Y, Iván B: Poly(N-vinylimidazole)-l-poly(propylene glycol) amphiphilic conetworks and gels: molecularly forced blends of incompatible polymers with single glass transition temperatures of unusual dependence on the composition. *Polymer Chemistry*, 7: 5375-5385 (2016) <http://real.mtak.hu/id/eprint/45114>

7. Garcia-Diez R, Gollwitzer C, Krumrey M, Varga Z: Size determination of a liposomal drug by small-angle X-ray scattering using continuous contrast variation. *Langmuir*, 32: 772-778 (2016) <http://real.mtak.hu/id/eprint/45524>
8. Harangozó JG, Wintgens V, Miskolczy Zs, Guigner J-M, Amiel C, Biczók L: Effect of macrocycle size on the self-assembly of methylimidazolium surfactant with sulfonatocalix[n]arenes. *Langmuir*, 32: 10651-10658 (2016) <http://real.mtak.hu/id/eprint/40460>
9. Hári J, Gyürki Á, Sárközi M, Földes E, Pukánszky B: Competitive interactions and controlled release of a natural antioxidant from halloysite nanotubes. *Journal of Colloid and Interface Science*, 462: 123-129 (2016) <http://real.mtak.hu/id/eprint/37878>
10. Kali G, Iván B: Noncollapsing polyelectrolyte conetwork gels in physiologically relevant salt solutions. *European Polymer Journal*, 84: 668-674 (2016) <http://real.mtak.hu/id/eprint/45115>
11. Nagy-Naszályi L, Polyák A, Mihály J, Szécsényi Á, Szigyártó ICs, Czégény Zs, et al. (11, Jakab E, Németh P, Bertóti I, Bóta A): Silica@zirconia@poly(malic acid) nanoparticle: promising nanocarriers for theranostic applications. *Journal of Materials Chemistry B*, 4: 4420-4429 (2016) <http://real.mtak.hu/id/eprint/36448>
12. Onyestyák Gy, Novodárszki Gy, Farkas Wellisch Á, Pilbáth A: Upgraded biofuel from alcohol-aceton feedstocks over a two-stage flow-through catalytic system. *Catalysis Science & Technology*, 6: 4516-4524 (2016) <http://pubs.rsc.org/en/content/articlepdf/2016/cy/c6cy00025h>
13. Rácz A, Bajusz D, Fodor M, Héberger K: Comparison of classification methods with "n-class" receiver operating characteristic curves: A case study of energy drinks. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 151: 34-43 (2016) <http://real.mtak.hu/id/eprint/46476>
14. Vass Á, Pászti Z, Bálint Sz, Németh P, Szűjjártó GP, Tompos A, et al. (1, Tálas E): Structural evolution in Pt/Ga-Zn-oxynitride catalysts for photocatalytic reforming of methanol. *Materials Research Bulletin*, 83: 65-76 (2016) <http://real.mtak.hu/id/eprint/39149>
15. Vikár A, Nagy T, Lendvay G: Testing the Palma–Clary Reduced Dimensionality Model Using Classical Mechanics on the $\text{CH}_4 + \text{H} \rightarrow \text{CH}_3 + \text{H}_2$ Reaction. *Journal of Physical Chemistry A*, 120: 5083-5093 (2016) <http://real.mtak.hu/id/eprint/45139>
16. Zsila F, Beke-Somfai T: Dimeric binding of the plant alkaloid ellipticine to human serum proteins. *RSC Advances*, 6: 44096-44105 (2016) <http://real.mtak.hu/id/eprint/47576>

MTA TERMÉSZETTUDOMÁNYI KUTATÓKÖZPONT ENZIMOLÓGIAI INTÉZET

1117 Budapest, Magyar Tudósok körútja 2.
telefon: (1) 382 6700; e-mail: buday.laszlo@ttk.mta.hu
honlap: <http://www.ttk.mta.hu>

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

Az Enzimológiai Intézetben számos tudományterületet átfogó, interdiszciplináris kutatások folynak, melyek során mind a biológia, mind fizika és a kémia tudománya által kínált lehetőségeket alkalmazzák. A kutatóhelyen részben szerkezeti biológiai alapkutatások folynak, melyek egyrészt lehetővé teszik a fiziológiás és patofiziológiás folyamatok sejt és molekula szintű értelmezését, másrészt a szerkezetbiológia 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 folyamatok, a transzmembrán fehérjék szerepét, valamint a DNS hibajavításban szerepet játszó enzimeket.

Az intézet fontos feladatának tekinti a nemzetközileg beágyazott alapkutatás mellett az oktatást. Munkatársaik négy egyetemen tartanak előadásokat, illetve gyakorlatokat mind az alapképzésben mind posztgraduális oktatásban. Intézetük ezzel egy időben több mint 60 doktorandusz hallgató oktatását is ellátja, akik munkájukkal nagymértékben hozzájárulnak az intézet eredményeihez.

Az intézet alapkutatási eredményeinek hasznosítására együttműködések jöttek és jönnek létre különböző kis- és nagyvállalatokkal. 2016-ban az intézet aktív módon közreműködött a Richter Gedeon NyRt-vel, valamint szoros kapcsolatot alakított ki számos kisvállalattal (Vichem Chemie Kutató Kft., Targetex Kft., Pharma-Trend-Biotechnológia Kft, Toxi-Coop Toxikológiai Kutatóközpont Zrt., KTT Kft., Alkahest Inc., USA, Zymo Research Corporation/Zymo Research Europe GmbH stb.). Fontos feladatuknak tekintik a magyar tudomány eredményeinek nemzetközi szinten történő képviselését, amit nemzetközi pályázatok résztvevőiként és nemzetközi szervezetekben viselt tisztségek útján valósítanak meg.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

A Jelátviteli és Funkcionális Genomika Kutatócsoport egyik része (jelátvitel) alapvetően két ún. állványfehérje családot vizsgál, ezek a Caskin és a Tks fehérjecsaládok. Rekombinációs technikával előállítottak számos SH3 domént, illetve az ezek foszforilációjára képes tirozin kinázt. Az *in vitro* foszforilációt követően vizsgálták a partner prolin-gazdag peptidek kötődését. Kimutatták, hogy a tirozinon foszforilált SH3 domének nem vagy csak alig képesek prolin-gazdag peptideket kötni. Sikerült a foszforilált fehérjék szerkezetét röntgenkrisztallográfia, illetve NMR vizsgálatok segítségével atomi szinten is feltérképezni. A Tks4 fehérjét kódoló gén kiütésével egérmodellt hoztak létre. Kimutatták, hogy a jelentős defektusokat mutató egerekből izolált mesenchymalis őssejtek differenciációs programja sérül, így nem vagy csak rosszul képesek zsír- és csontszöveti irányba differenciálódni. A funkcionális genomika alcsoport kutatói korábbi munkájuk során kimutatták, hogy a WFIKKN1 fehérje jelentős affinitással kötődik a promiosztatin és latens miosztatin prodomén régiójához, ezért feltételezhető volt, hogy e kölcsönhatás révén a WFIKKN1 befolyásolja a

miosztatin proteolitikus aktiválódását. Kimutatták, hogy bár a WFIKKN1 fehérje nincs hatással a promiosztatin furin által történő hasítására, jelentősen növeli a latens miosztatin BMP1-gyel történő processzálódását. A vizsgálatok azt is kiderítették, hogy a BMP1 metalloproteáz a WFIKKN1 fehérjét is elhasítja, és elsősorban a keletkező KKN1 fragmens felelős a BMP1 aktivitást fokozó hatásért. Megállapították továbbá, hogy a genom szekvenciák számítógépes vizsgálata alapján azonosított fehérje-kódoló gének jelentős hányadának szerkezete téves, ezért a hibás adatok elemzése gyakran téves következtetésekre vezet a kutatókat. Kimutatták, hogy arra a meglepő konklúzióra is génpredikciós hibák vezették a kutatókat, hogy a morfológiailag extrém konzervatívizmust mutató (élő fossziliaként számoltartott) lándzsahalak fehérjéi extrém evolúciós változékonyságot mutatnának.

A rendezetlen fehérjék többfunkciós, többek között aggregatív jellegüknél fogva igen gyakran aktív résztvevői idegrendszeri betegségeknek, mely betegségek kialakulásában e fehérjék oldható, kisméretű asszociált formái játszanak meghatározó szerepet; a patológiás aggregátumuk felhalmozódása a betegség későbbi szakaszában jellemző kórképként jelenik meg. A Sejtarchitektúra Kutatócsoport által felfedezett mikrotubulus asszociált (MAP) fehérje, a TPPP/p25 nem rendelkezik 3D szerkezettel, a szintén szerkezet nélküli α -szinukleinnel patológiás komplexet alkot, ami aggregátumok majd zárványtestek képződéséhez vezet, ami jellemző kórképe a Parkinson-kórnak és a multiszipstémás atrófiának (MSA). Ezek a rendezetlen, többfunkciós „hallmark” fehérjék azonban nem tekinthetők ideális gyógyszer-célpontnak, miután mind fiziológiás, mind patológiás funkcióval rendelkeznek, amit a kölcsönható partnereik határoznak meg (*Neomorphic Moonlighting Proteins*). Egy új innovatív kutatási stratégiát valósítottak meg azáltal, hogy a patológiás TPPP/p25-szinuklein kontaktfelületét azonosították, és gyógyszer-célpontként molekuláris és sejtszinten validálták. Bizonyították elméleti és kísérletes módszerekkel, hogy a TPPP/p25 speciális plaszticitással rendelkezik (*Neomorphic Chameleon Protein*), melynek alapját génszintű változások képezik. Javaslatot dolgoztak ki arra vonatkozólag, hogy a többfunkciós, plasztikus, nagyrészt rendezetlen fehérjék esetén hogyan azonosítható nagy specificitású gyógyszer-célpont, illetve fejleszhető alacsony toxicitású gyógyszer-molekula. Agykutatási eredményeik megmutatták, hogy egyrészt a TPPP/p25 kifejeződésének hiánya tumor (glióma) kialakulásához vezet, másrészt over-expressziója antiproliferatív hatással bír, ami a fehérjének a mikrotubuláris hálózat acetilációját fokozó hatásának tudható be. A hatásért a citoplazmatikus hiszton dezacetilázok (HDAC6 és SIRT2) – melyek tumor ellenes molekulák fontos célpontjai – TPPP/p25 általi gátlása felelős. COST projekt keretében német és francia szintetikus vegyészek potenciális molekuláinak sejtszintű vizsgálatai révén sikerült új hatásmechanizmussal működő molekulákat azonosítaniuk (pl. az inhibitor a SIRT2 proteozómális degradációját indukálja). Megállapították, hogy az általuk azonosított és elnevezett apicortin fehérje 3 paralógja megtalálható a chromerida egysejtűekben.

A Fehérjeszerkezet Kutatócsoport a multidrog rezisztencia szerkezeti hátterét vizsgálja. Az aryl hydrocarbon receptoron (AHR) mint a multidrog rezisztencia hátterében álló széles ligand specificitással rendelkező receptorok modelljén kollaborációban végzett in silico vizsgálatok alapján valószínűsítették, hogy a ligand specificitásért nem csak a PAS-B domén tehető felelőssé. A ligand kötő zseb mellett az oda vezető csatorna is fontos szerepet játszik a testidegen molekulák felismerésében. Emellett új potenciális hatóanyagok keresésével, glutaminil cikláz gátlására fragmens alapú drogok tervezésével is foglalkozik a munkacsoport. Irodalomból ismert gátlószerekből kiindulva 2D hasonlósági szűrés alapján összeállított fragmenskönyvtár kísérletileg leghatékonyabbnak ítélt 15 elemét vizsgálták a Schrödinger Suite 2015 programcsomaggal. A fehérje szerkezetét is flexibilisen kezelő Induced Fit Docking modul segítségével bedokkolták a fragmenseket a glutaminil cikláz 3si0 PDB

szerkezetébe. A legjobb pontszámokat kapott fehérje-ligand komplex szerkezetek összehasonlítása azt mutatta, hogy egy fragmens a fehérje más részéhez kötődik, mint a többi. Ezt a fragmenst egy hozzá közel kötődő másik fragmenssel összekötötték és az így kapott molekulán újabb IFD számolást végeztek. A számolás kedvezőbb kötődést jósolt, mint irodalmi gátlószerek esetében, azonban ez a molekula nem elérhető kereskedelmi forgalomban, és nehezen szintetizálható lett volna. Így 2D hasonlósági keresést végeztek kereskedelmi ligand adatbázisokban, majd a találatokon IFD és végül MMGBSA kötési szabadentalpia számolásokat végeztek. A kis-molekulákat ezen eredményekből számított konszenzus Z-score alapján rangsorolták. A TagetExKft munkatársaival készült cikk előzetes, on-line változata 2016 végén jelent meg.

A Membrán Fehérje Lendület Kutatócsoportban az ERC pályázat záró szakaszában megfejtették az MDR-szelektív toxicitás egyik lehetséges hatásmechanizmusát. Számos újabb vegyületet szintetizáltak és jellemeztek, valamint szabadalmi beadványt nyújtottak be a multidrog rezisztens rákos sejtek ellen szelektíven ható és megemelkedett toxicitású 8-hidroxikinolin származékok előállítására és alkalmazására, rákos megbetegedések kezelésére, különös tekintettel azok multidrog rezisztens variánsaira (P1600234 alapszámú magyar szabadalmi bejelentés). Lipidomikai módszerekkel jellemezték az NCI 60 sejtpanel vonalait, és kidolgoztak egy REIMS-alapú sejtvizsgálati módszert. Vizsgálták az ABCB1 (MDR1/P-glikoprotein) molekuláris működését, valamint az endothelin-A szerepét a nintedanib-bal szemben kialakuló rezisztenciában. Rescue kísérletekkel kimutatták, hogy a humán ABCB6 fehérje a *C. Elegans* és az *S. pombe* HMT1 fehérje ortológja. Vizsgálták a humán organikus anion transzporterek fluoreszcens molekulákkal való kölcsönhatását, melynek során szubsztrátokat azonosítottak.

A Genomstabilitás Lendület Kutatócsoport kutatásainak fő témája a rosszindulatú daganatok genomjában található mutációk keletkezésének és következményeinek megértése volt. A genomikai kísérletek mellett a csoport munkája kiterjedt a sérült DNS replikációjának genetikai és biokémiai vizsgálatára. A kutatócsoport brit és amerikai klinikusok közreműködésével génkiütött sejtvonalakban modellezte a daganatokban mutációkat okozó (mutagenikus) folyamatokat. Ehhez szükség volt a sejtek teljes génállományának meghatározására, és az ebben létrejövő összes mutáció pontos azonosítására. A bioinformatikai adatok elemzésére létrejött egy szoros együttműködés az ELTE Komplex Rendszerek Fizikája Tanszék kutatóival. Az eredmények szerint a BRCA génhibával rendelkező sejtekben rendkívül felgyorsul a mutációképződés folyamata. Bár a BRCA fehérjéknek a DNS-törések javításában ismert a szerepe, meglepő módon nemcsak a törések hibás javítására utaló deléciók dúsultak fel, hanem ennél jóval nagyobb arányban növekedett az egyszerű bázisváltozások száma. Az Oncogene folyóiratban közölt eredmények arra utalnak, hogy a bázisváltozások, melyhez hasonlókat daganatok genomjában is észleltek, fontos szerepet tölthetnek be a BRCA génhibák onkogenikus hatásában. A kifejlesztett kísérleti rendszer lehetővé tette a kemoterápiás kezelések hatásának modellezését is a tumorsejtek genomjában. A kemoterápiák egyik alapvető hatásmechanizmusa a DNS károsításával a daganatsejtek elpusztítása. A terápiát túlélő sejtekben azonban a kezelés génmutációkat okozhat. A kutatók megvizsgálták számos, gyakran használt citotoxikus hatóanyagok a kezelést túlélő sejtek genomjára gyakorolt hatását. A Genome Biology folyóiratban publikált eredmények szerint a hatóanyagok között van olyan, amelynek számottevő a mutagenikus hatása, és jellemző típusú génmutációkat idéz elő. Több klinikai esetben ugyanilyen mutációk okoztak rezisztenciát a kezelés után kiújuló BRCA mutáns daganatokban. Ezek alapján az eredmények egy új mechanizmust vázolnak fel a daganatok evolúciójában, mely szerint a mutagenikus kemoterápia elősegítheti a terápiára való

rezisztencia kialakulását. Az eredmények tükrében a Lendület pályázat jó minősítéssel zárult, a munka folytatásához szükséges forrás beépült az intézet költségvetésébe.

A Rendezetlen Fehérje Kutatócsoport több éve folyamatosan vizsgálja az ERD14 növényi chaperone fehérje szerkezet-funkció összefüggéseit. Mutánsok előállításával és részletes szerkezeti/funkcionális vizsgálatával sikerült még alaposabban feltérképezni, hogy mely régiók felelősek a fehérje sejtvédő hatásaért. Sejten belüli NMR mérésekkel sikerült azt is kimutatni, hogy a fehérje funkcionális állapotában is nagyrészt rendezetlen, és egy kevert szekvenciájú kontroll konstrukció segítségével ki lehetett zárni a sejtes környezetből eredő aspecifikus hatásokat is. A rendezetlen chaperonok további vizsgálata egy *Deinococcus radiodurans* Nudix fehérjével (DR0550) folytatódott, melynek N-terminális rendezetlen régiója ismeretlen funkcióval rendelkezik. Az enzim különböző mutáns formáinak előállításával és ezek alapos szerkezeti és funkcionális vizsgálatával kimutatható volt, hogy a rendezetlen régió nem elsősorban a fehérje stabilitását növeli, hanem RNS kötő szerepe van. Sikerült azonosítani az RNS kötésért felelős szekvencia-motívumot is. A vad típusú enzim és egy deléciós mutáns esetében is sikerült fehérje-kristályokat előállítani, melyek lehetővé teszik a fehérje szerkezetének pontos megismerését. A BME Bioorganikus Kutatócsoportjával 2014-ben kezdődött együttműködés folytatásaként His-tag-gel ellátott fehérjék mágneses nanorészecskékkel történő tisztításának további optimalizálása történt meg. Számos különböző bevonattal rendelkező nanorészecske tesztelése által sikerült két eltérő jellemzőkkel rendelkező nanorészecske-típust előállítani. Az első fajta alacsonyabb specificitással, gyengébben, de nagy mennyiségben képes a fehérjék kötésére, a második pedig nagy specificitással és erősen, de kisebb mennyiségű célfehérjét köt. A rendezetlen fehérjék kölcsönhatásait kötéserősség, specificitás, konzerváltság tekintetében folytatott bioinformatikai vizsgálatok eredményeként sikerült megállapítani, hogy az általánosan elfogadott “nagy specificitás-gyenge kölcsönhatás” tétel nem írja le a rendezetlen fehérjék teljes interakciós kapacitását. A kapott eredmények rámutatnak, hogy a rendezetlen fehérjék is képesek nagy kötéserősség kialakítására, ezért nem tekinthetők homogén halmaznak az interakcióikat tekintve.

Az Aktív Transzport Fehérjék Kutatócsoport felfedezte, hogy a kötőszövetek meszesedésének gátlásáért felelős fiziológiai metabolit, a pirofoszfát (PPi), szájon át bejuttatva emberben felszívódik, és a felszívódás mértéke eléri, illetve meghaladja a terápiás szintet. Ezzel egy több mint 50 éves dogmát döntöttek meg, amely szerint a szájon át bejuttatott PPi bioavailability-je zérus. Megállapították továbbá, hogy a PPi egérben nemcsak a vékonybélből, hanem a szájüregből és a gyomorból is felszívódik. Két olyan egérmodellen végeztek kísérleteket, amelyek egy-egy kötőszöveti/artériás meszesedési örökklődő betegség modelljei. Mindkét esetben megállapították, hogy az ivóvízzel bejutatott PPi nagymértékben gátolja a puhaszöveti meszesedést. Ezzel egy új, egyszerű és rendkívül olcsó terápia lehetőségét vetették fel. Eredményeik alapján a pseudoxanthoma elasticum (PXE) örökklődő betegség terápiáját célzó klinikai kipróbálást kezdték szervezni az USA-ban. Felfedezésük alapján Hollandiában szabadalmat nyújtottak be holland (15%) és magyar (85%) részvétellel. Ebben az évben is folytatták a franciaországi Angers-ban működő Orvosegyetem Bőrgyógyászati Klinikájával kialakult együttműködés keretében a francia PXE-páciensek mutációinak preklinikai, állatmodellben történő jellemzését. 4 olyan misszensz mutációt azonosítottak, amelyek az „*Allele-specific use of 4-PBA in PXE; 4-PBA as an orphan drug in calcification disorders*” című klinikai kipróbálásba bevonhatóak. Olyan ABCC6-specifikus antitest fejlesztésében értek el biztató eredményt, amely a fehérjét a sejten kívül található epitópok alapján ismeri fel. Ennek a kifejlesztés alatt álló kísérleti eszköznek a gyógyszerfejlesztésben, a kémiai chaperonok szűrésében van nagy jelentősége. A fenti eredményt az ELTE Immunológiai Tanszék és az ImmuniGenes magyar céggel közösen érték

el. Korábban soha nem sikerült az ABCC-típusú membránfehérjéket felismerő ilyen típusú antitestet előállítani. *In vivo* módszereket fejlesztettek ki a nagy izomsérüléseket kísérő meszesedés vizsgálatára, illetve az azt megelőzni képes terápiás stratégiák kidolgozására. Különlegesen fontos eredményük, hogy bemutatták, hogy egérmájban *in vivo*, rövid idő alatt a genom több tízezer pontján történhet DNS metilációs változás, ezzel bebizonyították a legstabilabbnak hitt, a transzkripció szabályozásában fontos szerepet betöltő, epigentikus módosítás dinamikusan változó. Tudomásuk szerint ez az első adatsor, amely néhány óra alatt ilyen jelentős mértékű DNS metilációs változásra derít fényt nem osztódó, differenciálódott sejtekben. Kísérleteik azt mutatták ki, hogy jelentős DNS metilációs csökkenés alakult ki az éheztetés hatására, míg az újraetetés következtében egy remetilációs hullám figyelhető meg már 4 óra alatt. A metilációs változások jelentős része intergenikus régiókban következik be, míg a promóterekben kifejezetten kevés DNS metilációs változást figyeltek meg. Vizsgálataikhoz az RRBS módszert alkalmazták, az eredményeik bioinformatikai analízisét is ők végezték. Meghatározták, hogy mely transzkripciós faktorok szabályozzák az ABCC6 gén hepatocita-specifikus kifejeződését. Kimutatták továbbá, hogy különböző szignál transzdukciós kaszkádok aktiválódása gátolja a gén kifejeződését a HNF4 α gátlásán keresztül. Kollaboráció keretében (egy Marie-Curie RTN résztvevőjeként) alkalmazzák az RRBS módszert a Tourette-szindróma patkány modelljében az epigenetikus változások tesztelésére. Részt vettek a Philadelphiában rendezett PXE-Research Meeting szervezésében. A tudományterület legfrissebb eredményeit bemutató review-cikk megírására kaptak ismét felkérést a bőrgyógyászati tudományterület legrangosabb folyóiratában.

A Genom Metabolizmus Kutatócsoport két jelentős publikációjában leírta a patogén és más mikrobák túlélési stratégiáit a genom integritás kulcsenzimeinek nélkül. A mikroorganizmusok teljes genomkészletét (mikrobióm) vizsgálva számos olyan fertőző és egyéb mikrobát azonosítottak, melyek nem kódolják a fontos dUTPáz és UNG enzimeket. Ezek túlélési stratégiai szempontból kiemelt jelentőségűek az új DNS javító útvonalak feltárásában. A csoport továbbá jellemezte az Arg finger motívumok szerkezeti proteomikáját. Teljes PDB-re kiterjedő szerkezeti biológiai rendszerszemlélettel leírták az Arg ujjak jelentőségét és szerepét a kis GTPázoktól a pirofoszfatazokig, ahol elsőként azonosították ezt a fontos elemet. A csoportvezető társszerzője volt az autofágia modern módszertanát leíró összefoglaló cikknek.

A Szerkezeti Biofizika Munkacsoport négy fő kutatási témában ért el jelentős eredményeket. Tanulmányozták komplement-rendszer és más proteolitikus kaszkádszisztemek, illetve immunsejtek közötti kölcsönhatásokat. Kimutatták, hogy a lektin út fő proteáza, a MASP-1 jelentősen gyorsítja a véralvadás folyamatát protrombin jelenlétében. Ebből azt a következtetést lehet levonni, hogy a MASP-1 képes aktiválni a protrombint. Ezek alapján feltételezhető, hogy bizonyos patofiziológiai körülmények között a MASP-1 gyorsítja vagy akár iniciálja is a véralvadás folyamatát. Kimutatták, hogy a MASP-1 növeli a neutrofil granulociták és az endotél sejtek közötti adhéziót azáltal, hogy stimulálja az E-szelektin adhéziós molekula termelődését. Ezzel egy új kapcsolatot fedeztek fel a komplementrendszer és a neutrofil granulociták között, amely hatékonyabbá teszi a patogén mikrobák elleni védekezést. Tanulmányozták fontos élettani és patológiai szerepet betöltő kináz enzimek és ligandumok közötti kölcsönhatásokat. A Rassf1A fehérje Aurora A kináz általi foszforilációjában az egyes domének és szerkezeti motívumok funkcióját azonosították. A ROCK1/2 kinázok LIMK1/2 kinázok irányában mutatott specificitásért (ROCK2-LIMK1 illetve ROCK1-LIMK2) felelős régióját tükröképi mutációk segítségével lokalizálták. Tovább kutatták a bakteriális flagellumok felépülésének mechanizmusát. A FliS fehérjéről korábban kimutatták, hogy hozzájárul a flagellin hatékony exportjához. Feltételezett fő feladata a flagellin monomer formában tartása a sejten belül, de emellett számos egyéb funkciója is ismert. Felmerült a kérdés, hogy ez a kis fehérje hogyan képes számos jelentősen eltérő

feladatot ellátni. Többféle biofizikai módszerrel megvizsgálva kimutatták, hogy a FliS egy molten globula-szerű fehérje és nagymértékű szerkezeti plaszticitással bír, ami diverz funkcióinak alapjául szolgálhat. A bioinformatikai kutatások területén is értek el új eredményeket. Két- és háromállapotú fehérje dimerek kapcsolt felgombolyodását és kötődését vizsgálták egy új megközelítéssel, mely a hálózatos kinetikai modellt az ún. WSME sokaság alapú modellel kombinálja. Több ismert kétállapotú dimer esetében kimutatták, hogy az asszociációt a láncok kismértékű lokális rendeződése előzi meg. Tovább javították a korábban kifejlesztett Gauss-keverék alapú eljárást, mely entrópiakülönbségek konformációs sokaságokból történő becslésére szolgál, az így kifejlesztett GMENTROPY szoftvert nyilvánosan elérhetővé tették. Részben ennek felhasználásával az uroporfirinogén-3 szintáz enzim példáján megmutatták, hogy a szegmenscsere evolúciós lépése hozzájárult a szubsztrátkötő funkció kialakulásához a domének közötti flexibilitás csökkentése révén.

A Membránfehérje Bioinformatika Lendület Kutatócsoport tovább folytatta a membránfehérjékkel kapcsolatos bioinformatikai és nagy áteresztő képességű kísérletes topológia meghatározó módszerek fejlesztését. E fejlesztések során 7 nemzetközi folyóiratba beküldött tudományos mű jelent meg, vagy fogadtak el, e mellett számos hazai és nemzetközi konferencián mutatta be a csoport a tudományos eredményeket. Sikert ért el egy olyan kísérlettel kombinált elméleti módszer kidolgozása, amellyel egyszerre több száz transzmembránfehérjéről lehet topológiai adatot meghatározni, és a kapott adatokkal jelentősen lehet ezen fehérjék alacsonyfelbontású szerkezetbecslését javítani. Emellett több adatbázist is kifejlesztett a csoport, amelyekben levő adatok szintén a topológia becsléshez, illetve a szerkezeti genomikai projektekhez nyújtanak értékes információkat. A Genomstabilitás Lendület Kutatócsoporttal együttműködve a csoport részt vett egy olyan bioinformatikai eszköz kifejlesztésében, amellyel sikerült a rákos betegségek ellen használt különböző gyógyszerek káros mutációkat okozó hatásait kimutatni. Ezek a munkák mind igen színvonalas, 5 fölötti impaktfaktorú nemzetközi folyóiratban jelentek meg.

A Molekuláris Sejtbiológiai Kutatócsoport kutatási területe kiterjed a membránfehérjék és a Ca^{2+} szignalizáció vizsgálatára polarizált hámsejtekben (májsejtekben), őssejtekben és azokból nyert leánysejtekben, valamint a membránfehérjék vörösvérsejtekben történő elemzésére. A csoport tagjai kimutatták, hogy az ABCG4 fehérje funkcionális dimert alkot az ABCG1 fehérjével, és az ABCG1-hez hasonlóan apoptózist indukál sejtekben; mutációs analízissel feltérképezték az ABCG1 potenciális szterol-kötő helyeit. Vizsgálták a májsejtek és a máj-specifikus szöveti makrofágok, a Kupffer sejtek kölcsönhatásait. Kidolgoztak egy nagyhatékonyságú eljárást az ABCG2 transzporter funkcionális detektálására, valamint egy olyan sejt-alapú módszert, amely segítségével kimutatták a különböző IgG alosztályok eltérő proinflammatorikus potenciálját. Egy könyvfejezet megírásával a csoport tagjai hozzájárultak az ABC fehérjékkel kapcsolatos jelenlegi kutatási trendek összefoglalásához; ismertették az ABCB11 epesó transzporterhez kapcsolódó legújabb eredményeket. A NAP pályázat keretében folytatták a neurális progenitorok (NPC-k), valamint az érettebb idegi sejtek jellemzését. Az NPC-ket modellként felhasználva, High Content Screening technológia alkalmazásával vizsgálták az idegi regeneráció kezdeti lépéseit humán rendszerben. Az SE Pszichiátriai és Pszichoterápiás, illetve a Városmajori Szív- és Érgyógyászati Klinikákkal együttműködésben a korábban meghonosított sejt visszaprogramozási eljárás segítségével két, pszichiátria betegséggel (skizofrénia és DiGeorge szindróma) érintett család tagjaiból indukált pluripotens őssejteket (iPSC) hoztak létre, melyek a betegség kialakulásának és a lehetséges terápiájának vizsgálatát teszik lehetővé. Az őssejtek általános jellemzése kapcsán vizsgálták az ABC transzporterek kifejeződését, elemezték a kalcium-szignálokat, és megmutatták a pluripotens őssejtek, mint modellek felhasználásának további lehetőségeit.

A Biomembrán Kutatócsoport tagjai a humán ABC transzporter fehérjék szerkezeti és funkcionális vizsgálata során részletesen elemezték a transzportereknek az emberi őssejt differenciálódásában, valamint a daganatok multidrog rezisztenciájában betöltött szerepét. Gyógyszerhatások mérésére alkalmas új esszéket állítottak be, elemezték a gyógyszerek és a membrán-lipidek kölcsönhatásait az ABC fehérjékkel. A *Mycobacterium* ABC transzporterek vizsgálatát indították el a rezisztens tuberkulózis gyógyszeres kezelésének fejlesztése érdekében. Aktívan részt vettek az emberi őssejt-differenciáció elemzésében. Tanulmányozták a prion fehérjecsalád fiziológiás folyamatokban, valamint a szivacsos agysorvadásban, illetve az Alzheimer-kórban betöltött szerepét. Új módszereket állítottak be a CRISP-R génedítáló rendszer alkalmazására emlős sejtekben. Részletesen elemezték a DNS transzpozonok működését, és specifikus módszerek kidolgozása után vizsgálták a piggyBac transzpozon szupercsaládba tartozó humán gének (PGBD gének) expressziós mintázatát. Speciális mikroRNS-eket terveztek és teszteltek, amelyek fontos szerepet játszanak a membránfehérjék szabályozásában.

A görcsgátló, nyugtató hatású klonazepam mellékhatásai a metabolizmusában résztvevő CYP3A és NAT2 enzimeknél megfigyelhető jelentős egyéni különbségekre vezethetők vissza. Pszichiátriai betegek bevonásával végzett vizsgálatok során a Metabolikus Gyógyszerkölcsönhatások Kutatócsoport munkatársai igazolták, hogy a klonazepam plazmakoncentrációja összefüggésben van a betegek CYP3A4 expressziójával, azonban a CYP3A5 és NAT2 genotípus nincs hatással a 'steady-state' klonazepam koncentrációra. Ugyanakkor a normál CYP3A4 aktivitás lassú NAT2 acetiláló képességgel párosulva a 7-aminoklonazepam metabolit felhalmozódásához vezet, amely rontja a klonazepam hatékonyságát, és a gyógyszer visszavonásakor súlyos megvonási tünetek kialakulásához vezet. A betegek CYP3A4 expressziójának és a NAT2 genotípusának ismerete segíti a mellékhatások szempontjából nagy kockázatú betegek beazonosítását és a személyre szabott klonazepam terápia kialakítását. A primer hepatociták egyszerű *in vitro* modellt jelentenek a gyógyszerek és gyógyszer-jelölt hatóanyagok farmakokinetikai és metabolizmus vizsgálatához. A humán májsejt modell *in vivo* 'clearance' becslésre való használhatóságát igazolták 16 forgalomban lévő pszichofarmakon vizsgálatával. Az *in vitro* farmakokinetikai adatokból becsülhető humán biohasznosulási értékek megegyeztek a klinikai vizsgálatok során nyert biohasznosulási értékekkel. Továbbá meghatározták a biztonsági vizsgálatok során alkalmazott állatfajok közül az emberhez metabolikus szempontból legközelebb álló fajt, amely alapján a patkány tekinthető legmegfelelőbb modell állatnak.

A Fehérje Kutatócsoport eredményei alap kutatás természetűek voltak és ezeket nemzetközi folyóiratokban publikálták. Megjelent egy közleményük, amelyben vizsgálták a kalcium kötő S100B fehérje hatását a jelátviteli szempontból aktív ERK2-RSK1 komplex összeállítására. Munkájuk tehát egy, a bőrrák kialakulásában szerepet játszó fehérje komplex kialakulását vizsgálta. Azt találták, hogy a melanóma egyik ismert marker fehérjéje (S100B) befolyásolja a sejtek osztódásában fontos szerepet játszó jelátviteli komplexek összeállítását. Ez a tanulmány a Journal of Biological Chemistry újságban a „Paper of the week” kategóriába került, ahova az itt megjelent cikkek közül a szerkesztők által a legfontosabbnak tartott publikációk kerülnek (kb. az összes 1-2%-a). Egy másik munka kapcsán a rákban felhalmozódó mutációk eloszlását vizsgálták a fehérjék szekvenciáiban. Ezzel hozzájárultak a rák során katalogizálható mutációk oki tényezőinek jobb megértéséhez. Egy összefoglaló természetű munka kapcsán a csoport által több éve kutatott MAP kináz enzim család egyik tagjának fehérje-fehérje kölcsönhatásait értelmező tanulmányt írtak. Továbbá egy másik összefoglaló munkában a jelátviteli szempontból érdekes fehérje-fehérje komplexek előállításában szerzett sokéves tapasztalataikat tették közzé.

A 2014. július 1-jén megalakult Reprodukció Rendszerbiológiája Lendület Kutatócsoport 2016-ban nyolcfősre nőtt. A csoport laboratóriumának felszerelése folytatódott és egy új iroda is kialakításra került. A csoport kollaborációs kutatásokat folytatott az MTA Természettudományi Kutatóközpont csoportjaival, a Semmelweis Egyetem I. sz. Patológiai és Kísérleti Rákkutató Intézetével, Genetikai, Sejt- és Immunbiológiai Intézetével és a Kútvölgyi Klinikai Tömb Maternity Klinikájával, az Eötvös Loránd Tudományegyetem Immunológiai Tanszékével és Proteomikai Munkacsoportjával, az MTA Szegedi Biológiai Központ Genetikai Intézetével, a Wayne State University Szülészeti és Nőgyógyászati Klinikájával (Detroit, MI, USA), a National Institutes of Health Perinatology Research Branch-ével (Detroit, MI, USA), a University of Southern California Szülészeti és Nőgyógyászati Klinikájával (Los Angeles, CA, USA), a Zymo Research Corporation-nel (Irvine, CA, USA), a Ben Gurion University Szülészeti és Nőgyógyászati Klinikájával (Beer Sheva, Israel), valamint a University of Basel Szülészeti és Nőgyógyászati Klinikájával (Bázel, Svájc). A munkacsoport mintagyűjtési- és kutatási tevékenysége folytatódott a kollaborátor laboratóriumokban az Eötvös Lóránd Tudományegyetemen és a Semmelweis Egyetemen. Ezen együttműködések közül egy szakmai könyvfejezet, valamint hét tudományos közlemény került publikálásra. Az eddigi kutatások főleg a terhességek 5-8%-ában előforduló praeclampsia kialakulásának lehetséges útvonalaira és biomarker molekuláira fókuszáltak, így jelentős társadalmi, népegészségügyi és gazdasági kihatásuk lehet, ezért ezen területeket illetően relevanciájuk kiemelt.

A génextpresszió szabályozásának egyik fiziológiás rendszerét alkotják a sejtekben meglévő miRNS-ek. Az Onkológiai Biomarker Kutatócsoport munkatársai létrehoztak egy olyan online elérhető elemző rendszert, amelynek segítségével emlőtumoros betegekben lehet egyes kiválasztott miRNS-ek túlélésre gyakorolt hatását vizsgálni. A rendszer négy különböző vizsgálatból több mint 2000 betegmintát tartalmaz. Az egyes klinikai és patológiai alcsoportokra, valamint az alkalmazott kezelésekre való szűrés után lehet az expresszióknak a teljes túléléssel való kapcsolatát számolni. Bár a kísérletesen alkalmazott RNS interferencia mára egy rutinszerűen felhasznált technológiává vált, a módszer független validálása még mindig várat magára. Kutatásaik során feldolgoztak 429 olyan korábbi RNS interferencia vizsgálatot, ahol gén chip adatok is rendelkezésre álltak. A gén chip mérések lehetővé teszik, hogy az egyes gének csendesítésében bekövetkező változásokat mérni is lehessen. Azt az eredményt kapták, hogy a kísérletek 18.5%-ában egyáltalán nem volt sikeres a csendesítés. Szolid tumorok esetében egyre nagyobb teret kap a molekuláris altípusok feltérképezése és klinikai használata. Colon tumorok esetén azonban még nincsen konszenzus, hogy melyik legyen klinikailag is felhasználva. Az irodalomban leírt összesen 22 colon molekuláris altípus osztályozót újra-programozták. Ezután egy közös mintahalmazon az egyes osztályozókat egymással összehasonlították, illetve külön-külön a túlélésre gyakorolt hatást is megvizsgálták. Végezetül a későbbi preklinikai vizsgálatok lehetővé tétele érdekében az irodalomban leggyakrabban használt sejtvonalakat osztályozták. Az emlőrák molekuláris altípusai már ma is meghatározzák az alkalmazott kezelést. Megvizsgálták a DNS metilációt az emlőrák molekuláris alcsoportjaiban. Azt figyelték meg, hogy az altípusok között az egyes gének metilációs állapota szempontjából és ezeknek a túléléssel való összefüggése között jelentős eltérések vannak.

b) Tudomány és társadalom

A Jelátviteli és Funkcionális Genomika Kutatócsoport az eredményeiről számos fórumon (cikkek, konferenciák) és a médiában (rádiós beszélgetés, mta.hu honlap, Innotéka magazin, stb.) is beszámolt.

A Genomstabilitás Lendület Kutatócsoport vezetője az MTA Kommunikációs Főosztályának segítségével sajtóközleményben ismertette a csoport 2016-ban publikált áttörő eredményeit a rákos génmutációk kialakulása területén, valamint interjút adott az Info Rádió tudományos műsorának és a Kossuth Rádióknak az eredmények értelmezéséről. Emellett a kutatócsoport vezetője ismeretterjesztő előadást tartott a DNS károsodásáról és javításáról a Kutatók Éjszakája rendezvénysorozat keretében.

Az Aktív Transzport Fehérjék Kutatócsoport csoportvezetője több, a tudomány és a társadalom kapcsolatát elemző cikket publikált az Élet és Irodalom c. hetente megjelenő lapban („Két ifjú tudós”, 2016. jún. 10. – „Lélek és légcső”, 2016. február 19 – „Boncolás a mázsaházban” 2016. január 15).

A Genom Metanolizmus Kutatócsoport megszervezte a Kutatók Éjszakáján belül laboruk bemutatását. A csoport vezetője számos rádió és TV interjút adott.

A Membránfehérje Bioinformatika Lendület Kutatócsoport által kapott eredmények és a már kidolgozott, illetve kidolgozandó eljárások rendkívül fontosak a gyógyszerkutatás szempontjából, amit jól mutat, hogy a csoport által fejlesztett és fenntartott szerverek segítségével a világ kutatói évente több százezer becslést végeznek (lásd: <http://counter.enzim.hu/counter>).

A Molekuláris Sejtbiológiai Kutatócsoport számos ismeretterjesztő programban vett részt:

A Károlyi Mihály Gimnázium látogatása az MTA TTK-ban (2016. febr. 3.). Az Apáczai Csere János Gimnázium látogatása az MTA TTK-ban (2016. március. 5.). Interjúbeszélgetés a csoport két vezető kutatójával a Duna-Word televízió Növum című műsorában (2016. márc. 26.). Trefort Gimnázium pályaválasztási nap az MTA TTK-ban (2016. jún. 10.) Kölcsey Gimnázium látogatása az MTA TTK-ban (2016. dec. 9.). Tájékoztató nap a NAP projekt második munkaszakaszáról: a pályázatok eredményeinek közérthető összefoglalása (Mátraháza, MTA Üdülő, TTK, 2016. nov. 10-12.).

A Biomembrán Kutatócsoport tagjai számos esetben tartottak a tudományos kutatásról és módszertanról szóló tájékoztatót középiskolás diákok részére, valamint tudománynépszerűsítő előadást egyetemi hallgatóknak (pl. ELTE „Élő adás” sorozat).

A Metabolikus Gyógyszerkölsönhatások Kutatócsoport munkatársai a Servier Gyógyszerkémiai Kutatóintézetben szervezett tudományos fórumon bemutatták a CYPtestTM alapú, gyógyszer-lebontó képességhez igazított terápia lehetőségeit és klinikai eredményeit. A Magyar Tudomány Ünnepe alkalmából szervezett nyílt napon pedig középiskolás diákoknak bemutatták a DNS hibák (mutációk) kimutatásának PCR alapú módszerét.

A Fehérje Kutatócsoport 2016 elején publikált cikke kapcsán, ami a bőrrák kialakulásához kapcsolható, több felkérésnek tett eleget munkájuk szélesebb körben való ismertetésére. A melanóma (bőrrák) kialakulásának újszerű gátlására tett javaslatuk járta meg a sajtót (Ma délelőtt, MTV1; Novum, Duna World). Továbbá a Természet Világa, 2016 májusi számában tettek közzé egy ismertetőt „A sejtes élet és halál urai. A protein-kináz alapú jelátviteli komplexek” címmel.

A praeclampsia területén elért kollaborációs kutatási eredményekről a Reprodukció Rendszerbiológiája Kutatócsoport vezetője 2016. április 11-én egy webinar keretében számolt be, melyet a világ 67 országából 739-en követtek figyelemmel élőben, és amely továbbra is elérhető az interneten az érdeklődők számára.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

Hazai kapcsolatok

Téma címe: Challenging drug target for Parkinson's disease: Pathological complex of the chameleon TPPP/p25 and alpha-synuclein proteins

Együttműködő partnerintézmény: ELTE Szerves Kémiai Intézet

Eredmények: A patológiás szinuklein-TPPP/p25 komplex kötőfelszínének atomi szintű karakterizálása multinukleáris NMR spektroszkópiával. Egy cikk fog megjelenni 2017-ben.

Téma címe: α -szinuklein és TPPP/p25: A Parkinson-kór biomarker fehérjének jellemzése
Együttműködő partnerintézmény: Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Eredmény: Az intézet munkatársának témavezetésével elkészült TDK dolgozat.

Téma címe: A rákos megbetegedésekkel kapcsolatos pont mutációk analízise
Együttműködő partnerintézmény: ELTE
Eredmények: közös publikáció.

Téma címe: MDR-szelektív vegyületek szerkezet-hatás összefüggései
Együttműködő partnerintézmény: TTK SZKI
Egyezmény neve: Lendület pályázat
Eredmények: MDR-szelektív vegyületek szintézise, közös publikáció előkészületben.

Téma címe: ABCB6 membrántopológiája
Együttműködő partnerintézmény: TTK SZKI
Eredmény: egy közös publikáció.

Téma címe: MDR-szelektív kelátorok bioinorganikus kémiája
Együttműködő partnerintézmény: SZTE
Egyezmény: Lendület pályázat
Eredmény: egy közös publikáció.

Téma címe: A kemoterápiás kezelések mutagenikus hatása
Együttműködő partnerintézmény: Országos Korányi Pulmonológiai Intézet, Budapest
Eredmények: A csoport magyar rákbetegek normál és tumoros szövetmintáiból meghatározta a teljes genom szekvenciát és a daganatot okozó mutációkat. Közös publikációk száma: 1.

Téma címe: A komplementrendszer specifikus gátlása
Együttműködő partnerintézmény: ELTE TTK Biokémiai Tanszék
Egyezmény neve: OTKA konzorciális pályázat
Eredmények: Specifikus inhibitorokat fejlesztettünk a lektin út proteázai ellen. Közös publikációk száma: 4

Téma címe: Klinikai molekuláris patológiai diagnosztika újgenerációs szekvenálás segítségével
Együttműködő partnerintézmény: Országos Onkológiai Intézet
Eredmények: Az Intézet Sebészeti és Molekuláris Daganatpatológiai Központjában az osztályvezető főorvossal és kutatócsoportjukkal a formaldehidbe és parafinba ágyazott daganatsejt minták DNS analízisének, valamint klinikai adatok feldolgozásának témáján dolgozott a csoport, idén ebből a munkából az Applied Immunohistochemistry & Molecular Morphology folyóiratban jelent meg egy cikke a csoportnak.

Téma címe: Virus RNS diagnosztika növényekben újgenerációs szekvenálás segítségével
Együttműködő partnerintézmény: NAIK-Mezőgazdasági Biotechnológiai Kutatóintézet
Eredmények: A csoport az MBK Genomikai Főosztály Diagnosztikai Csoportjával együttműködve dolgozik egy újfajta - újgenerációs szekvenáláson és bioinformatikai feldolgozásán alapuló – diagnosztikai módszer fejlesztésén patogén vírusok azonosítására. Az eredményeket számos hazai és nemzetközi folyóiratban publikálták és konferenciákon jelentették meg.

Téma címe: NF- κ B –mediált, immunkomplex által kiváltott válasz detektálására alkalmas sejtes modell rendszer fejlesztése
Együttműködő partnerintézmény: ELTE TTK, Immunológia Tanszék

Eredmények: A létrehozott GFP-alapú riporter sejtet validáltak, és reumatoid arthritisz betegek mintáin vizsgálták, egy közös publikáció született.

Téma címe: Kalcium szignalizáció vizsgálata, melanóma sejtek migrációjának elemzése

Együttműködő partnerintézmény: SOTE, II. Patológiai Intézet

Eredmények: Megjelent 2 publikáció kalcium szignálok vizsgálatáról GCaMP2 kalcium indikátort kifejező patkány modellben, az újabb vizsgálatok kiterjednek a Ca pumpáknak a melanóma sejtek migrációjára gyakorolt hatására.

Téma címe: transzporterek bioinformatikai vizsgálata

Együttműködő partnerintézmény: SOTE, Biofizikai és Sugárbiológiai Intézet

Eredmények: A partnerek adatbázist hoztak létre a különböző transzporterek mutációiról és polimorfizmusairól. Egy közös kézirat elkészült, megjelentetése folyamatban van.

Téma címe: Indukált pluripotens őssejtek felhasználása pszichiátriai betegségmodellekben

Együttműködő partnerintézmény: SOTE, Pszichiátriai és Pszichoterápiás Klinika

Eredmények: A NAP program keretében jellemezték humán pluripotens őssejtekből nyert neurális progenitorokat, valamint ezek differenciáltásával kapott neurális tenyészeteket, skizofrén betegekből létrehoztak iPS vonalakat, amelyek betegségmodellként használhatók. Az eredményeket 4 poszter és 2 nemzetközi előadás formájában bemutatták, 3 közös kézirat elkészült.

Téma címe: Indukált pluripotens őssejtekből nyert idegi sejtek elektrofiziológias jellemzése

Együttműködő partnerintézmény: ELTE TTK, Biokémia Tanszék

Eredmények: A NAP program keretében az indukált pluripotens őssejtekből differenciáltatott neurális tenyészetek elektrofiziológias jellemzését végezték. Az eredményeket 2 poszter formájában bemutatták, kézirat előkészületben.

Téma címe: Humán indukált pluripotens őssejtekből nyert neurális progenitor sejtek neurit növekedésének és annak szabályozásának vizsgálata

Együttműködő partnerintézmény: ELTE TTK, Biokémia Tanszék

Eredmények: A nem izom miozin gátolja a neurit növekedést, specifikus inhibitorokkal ez a gátlás felszabadítható. Az eredményeket 3 poszteren bemutatták, kézirat előkészületben.

Téma címe: Indukált pluripotens őssejtek felhasználása komplex betegségmodellben (DiGeorge szindróma)

Együttműködő partnerintézmény: SOTE, Városmajori Szív- és Érgyógyászati Klinika, Kardiológiai Tanszék

Eredmények: DiGeorge szindrómában szenvedő betegekből létrehoztak iPS vonalakat, amelyek később betegségmodellként használhatók. Közös állami ösztöndíjas PhD hallgató.

Téma címe: MSC-k immunológiai tulajdonságainak vizsgálata

Együttműködő partnerintézmény: Debreceni Egyetem, Immunológiai Tanszék

Eredmények: A partnerek 2015-ben publikálták közös kutatómunkájuk eredményét és közös kutatási pályázatot nyújtottak be (GINOP2.1.1), amely 2016-ban megkapta a támogatást. Közös publikációk száma: 1

Téma címe: A PSMB1 proteaszóma fehérje polimorfizmusának szerepe a mielóma multiplex kezelésében

Együttműködő partnerintézmény: SOTE, 3. Belgyógyászati Klinika, Országos Vérellátó Szolgálat

Eredmények: Egy bizonyos polimorfizmus a proteaszóma gátláson alapuló kezelés kimenetelét hátrányosan befolyásolja. Egy közös kézirat megjelentetése folyamatban van.

Téma címe: ABCG2 polimorfizmusok keresése a hazai populációkban

Együttműködő partnerintézmény: Országos Vérellátó Szolgálat

Eredmények: ritka mutációk azonosítása. Egy közös kézirat publikálása folyamatban van.

Téma címe: Kószvényes betegek membránfehérjéinek vizsgálata vörösvérsejteken

Együttműködő partnerintézmény: Országos Reumatológiai és Fizioterápiás Intézet

Eredmények: A kószvényre hajlamosító biomarkerek kimutatása.

Téma címe: Membránfehérjék szerkezetének vizsgálata

Együttműködő partnerintézmény: MTA-TKI Molekuláris Biofizikai Kutatócsoport

Eredmény: Két közös publikáció született.

Téma címe: Farmakokinetika és Gyógyszermetabolizmus Szimpózium megrendezése

Együttműködő partnerintézmény: Magyar Kísérletes és Klinikai Farmakológiai Társaság

Eredmények: A szimpózium, amely 2016. április 6-8. között került megrendezésre Galyatetőn, teret adott a transzporter fehérjékkel, a kábítószerrel, új gyógyszer-formulációk farmakokinetikai vonatkozásaival, bioinformatikai elemzésekkel, új terápiás lehetőségekkel, engedélyeztetési irányelvek változásaival, valamint az új analitikai megoldásokkal kapcsolatos problémák megvitatásának. A rendezvényt támogatta a három nagy magyarországi gyógyszergyár. A konferenciáról kiadvány jelent meg.

Téma címe: A személyre szabott gyógyszeres terápia lehetőségei a pszichiátriában

Együttműködő partnerintézmény neve: SOTE, Pszichiátriai és Pszichoterápiás Klinika

Egyezmény: Felkérés a Pszichiátriai Továbbképzésben való oktatásra

Eredmények: A képzés keretében a gyógyszer-metabolizmusban résztvevő citokróm P450 enzimeket, a metabolikus gyógyszer-interakciókat és lehetséges klinikai következményeit ismerhették meg a hallgatók.

Téma címe: A személyre szabott pszichofarmakoterápia lehetőségei

Együttműködő partnerintézmény: SOTE, Pszichiátriai és Pszichoterápiás Klinika

Kapcsolat formája: Intézmények közötti együttműködési megállapodás, OTKA104459

Eredmények: Skizofréniában és bipoláris zavarban szenvedők gyógyszer-metabolizáló képessége befolyásolja a pszichofarmakon vérszinteket, ezért a betegek előzetes CYP-status vizsgálatával beazonosíthatók a magasabb mellékhatás kockázatú gyenge metabolizálók vagy a terápiás hatástalanságot rejtő gyors metabolizálók. CYP-status alapú gyógyszerelés javasolható, mivel igazolták, hogy: a CYP3A4 expresszió és a *CYP3A5* genotípus meghatározza a clozapine terápiát; a betegek CYP3A4 expressziójának és NAT2 acetiláló fenotípusának ismerete javítja a clonazepam biztonságos alkalmazását; a glukuronidáció és a mitochondriális beta-oxidáció gyengesége esetén a CYP2C9-alapú valproát terápia csökkenti a hibás dozírozásból fakadó, a terápiás vérszinttől eltérő valproát koncentrációk kialakulását; az aripiprazole, risperidone és quetiapine kiürülését a betegek *CYP2D6* genotípusa alapjaiban befolyásolja. A gyógyszer-metabolizáló képességhez igazított terápia a dózis optimalizálásával a betegek hatékonyabb pszichoterápiáját és a mellékhatás kockázatának csökkenését teszi lehetővé. Közös publikációk száma: 5.

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

Együttműködő partnerintézmény: SE, I.Sz. Patológiai és Kísérleti Rákkutató Intézet

Egyezmény neve: MTA Lendület pályázat.

Eredmények: Két tudományos közlemény és egy könyvfejezet jelent meg. A csoportvezető a Semmelweis Egyetem Doktori Iskolájában vezetett PhD témát.

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

Együttműködő partnerintézmény: SE, Kútvölgyi Klinikai Tömb, Maternity Klinika

Egyezmény neve: MTA Lendület pályázat

Eredmények: Két tudományos közlemény és egy könyvfejezet jelent meg. A csoportvezető a Semmelweis Egyetem Doktori Iskolájában vezetett PhD témát.

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

Együttműködő partnerintézmény: SE Genetikai, Sejt- és Immunbiológiai Intézet

Egyezmény neve: MTA Lendület pályázat

Eredmények: Két MedInProt pályázatot nyertek el, egy-egy OTKA és svájci kutatási pályázatot nyújtottak be, továbbá előkészítettek egy tudományos közleményt.

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

Együttműködő partnerintézmény: ELTE, Természettudományi Kar, Immunológiai Tanszék

Egyezmény neve: MTA Lendület pályázat

Eredmények: Egy FIEK pályázatot nyertek el, és egy tudományos közleményt készítették elő.

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

Együttműködő partnerintézmény: MTA Szegedi Biológiai Központ Genetikai Intézet

Egyezmény neve: MTA Lendület pályázat

Eredmények: Egy tudományos közlemény jelent meg.

Téma címe: Veserák vizsgálata

Együttműködő partnerintézmény: SE II. Patológiai Intézet

Eredmények: Igazoltuk, hogy a HIF1 alfa és HIF2 alfa gének hatása prognosztikai szempontból ellentétes csontáttétes világos sejtes veserák esetén. Az eredményeket az Oncotarget folyóiratban közzétettük.

Nemzetközi kapcsolatok

Téma címe: Selective Sirt2-inhibition by ligand induced rearrangement of the active site

Együttműködő partnerintézmény: Institute of Pharmaceutical Sciences, Albert-Ludwigs-University Freiburg, Németország

Egyezmény: EU COST: Epigenetics Bench to Bedside (2011-2014); EU COST: Epigenetic Chemical Biology (EPICHEM) (2014-2018)

Eredmények: Az együttműködés több éve tart, COST pályázat keretében. Kísérletes munka, gyógyszerjelölt vegyületek biológiai vizsgálata. Három közös publikáció született, köztük Nat. Commun.-ben.

Téma címe: Immunolocalisation of Tubulin Polymerisation Promoter Protein TPPP/p25 in the retina

Együttműködő partnerintézmény: UCL Institute of Ophthalmology, London, UK

Egyezmény: EU COST: Zn-Net Zinc biology (2013-2017)

Eredmények: Az együttműködés tavaly kezdődött, COST pályázat keretében. A partner intézet koordinálja a network munkáját. Két közös publikáció jelent meg. A projekt TPPP/p25 retinában való lokalizációjának konfokális mikroszkópiás analízise, amely egy marosvásárhelyi kutató témája, aki Collegium Talentum ösztöndíjat nyert el. (1 konferencia-előadás)

Téma címe: HDAC inhibitors

Együttműködő partnerintézmény: Institut de Chimie des Milieux et Matériaux de Poitiers, UMR CNRS France

Egyezmény: EU COST: Epigenetics Bench to Bedside (2011-2014); EU COST: Epigenetic Chemical Biology (EPICHEM) (2014-2018)

Eredmények: Közös részvételük a COST Epigenetics projektben vezetett az eredményes kollaborációhoz. Kísérletes munka, gyógyszerjelölt vegyületek biológiai vizsgálata. Egy közös publikáció és egy konferencia-előadás született. Közös EU-pályázatot adtak be (H2020-MSCA-ITN-2017).

Téma címe: Challenging drug target for Parkinson's disease: Pathological complex of the chameleon TPPP/p25 and alpha-synuclein proteins

Együttműködő partnerintézmény: Department of Molecular Medicine and USF Health Byrd Alzheimer's Research Institute, Morsani College of Medicine, University of South Florida, USA

Eredmény: egy közös publikáció született.

Téma címe: A stabilitási centrumok szerepe a fehérjék hőstabilitásában

Együttműködő partnerintézmény: Indian Institute of Technology Madras, India

Eredmény: egy közös publikáció született.

Téma címe: Targeting the Achilles heel of cancer

Együttműködő partnerintézmény: Medical University of Vienna

Eredmény: egy közös publikáció született.

Téma címe: Genomic Approaches for Discovery of Predictors and Improvement of Therapy Response

Együttműködő partnerintézmény: Johns Hopkins Medicine, Baltimore, Maryland, USA

Eredmények: Az együttműködésben elvégezte a csoport a daganatokban gyakori BRCA1 és BRCA2 génhibák mutagenikus hatásának vizsgálatát sejtenyészetekben egész genom szekvenálással, és további genetikai kísérleteket végzett a BRCA mutáns daganatokban kialakuló kemoterápia-rezisztencia mechanizmusainak modellezéséhez. Közös publikációk száma: 2.

Téma címe: Egyes rákban szerepet játszó rendezetlen fehérjék szerkezeti és funkcionális vizsgálata

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

Egyezmény neve: KRCF-MTA Joint Laboratory Project

Eredmények: A rendezetlen linker régiók szerepének jellemzése a domén-linker-domén típusú processzív enzimek működésében. Bioinformatikai módszerekkel jellemzésre került a linker régiók aminosav összetétele, konzerváltsága és flexibilitása. Sikerült egy elméleti modellt is kidolgozni, mely alkalmas a linker régiók térbeli mozgásának modellezésére. Közös publikációk száma: 1.

Téma címe: A rendezetlen fehérjék kötőmotívumainak szerkezeti elemzése

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

Egyezmény neve: ANN-FWF OTKA együttműködés

Eredmények: Bioinformatikai módszerekkel meghatározhatók voltak a rendezetlen fehérjék fő funkcionális egységeinek, a kötő motívumoknak a biofizikai jellegzetességei. Kidolgozásra került egy módszer, amely megbízhatóan elkülöníti a különböző fizikai jellemzőjű motívum csoportokat, és ezáltal alkalmas lehet egy predikciós módszer kialakítására is. 10 motívum és a határoló régiók bakteriális kifejeztetése és NMR vizsgálata történt meg.

Téma címe: 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.
Egy közös publikáció született.

Téma címe: ABCC6 és a puhaszövetek meszesedése
Együttműködő partnerintézmény: University of Hawaii USA
Egyezmény: NIH együttműködési támogatás, R01 közös pályázat
Eredmények: Az ABCC6 és mutánsainak vizsgálata. Egy közös publikáció született.

Téma címe: Metabolikus megbetegedések hatása az epigenetikai mintázatra
Együttműködő partnerintézmény: Université d'Angers, Franciaország
Egyezmény: Commission de recherche pályázat
Eredmények: Vad típusú és ABCC6 génkiütött egerek epigenetikus mintázatának vizsgálata.

Téma címe: Alternative transcript in kinase genes
Együttműködő partnerintézmény: Pediatrics, Harvard Medical School; Pediatrics, Boston Children's Hospital
Eredmények: Az együttműködés célja olyan kináz gének azonosítása, amelyek alternatív transzkripció révén konstitutívan aktiválódnak, és ezáltal járulnak hozzá a rákos folyamatok kialakulásához.

Téma címe: Sejtpolaritás és trafficking vizsgálata májsejtekben
Együttműködő partnerintézmény: National Institute of Child Health and Human Development, NIH, Bethesda, USA
Eredmények: az ABCB11 epesó transzporter szabályozása májsejtekben (egy közös publikáció született).

Téma címe: Kalcium transzport fehérjék vizsgálata
Együttműködő partnerintézmény: Institut National de la Santé et de la Recherche Médicale, PRES Sorbonne Paris-Cité, Bobigny, France
Eredmények: a Ca^{2+} pumpák és ezen belül is a SERCA pumpák szerepének vizsgálata neurális progenitorokban.

Téma címe: Multidrog rezisztencia fehérjék expressziójának vizsgálata tumor sejteken, a mezenchimális őssejtek és a mikrokörnyezeti stressz hatások függvényében
Együttműködő partnerintézmény: Laboratory for Experimental Hematology and Stem Cells, Institute for Medical Research, University of Belgrade
Eredmények: beadott TÉT-2016/ Szerb-magyar pályázat

Téma címe: Őssejtek vizsgálata
Együttműködő partnerintézmény: Max-Delbrück-Center for Molecular Medicine
Eredmény: egy közös publikáció.

Téma címe: Pharmacological research and analytical approaches (Italian-Hungarian Symposium on Spectrochemistry)

Együttműködő partnerintézmények: Magyar Kísérletes és Klinikai Farmakológiai Társaság, Water Research Institute (Italian Research Council)

Egyezmény neve: Magyar-olasz projekt alapú kutatói mobilitás

Eredmények: 1. A természetes vizekbe kijutó gyógyszer-hatóanyagok és bomlástermékeik befolyásolják a vizekben élő természetes mikroorganizmusokat és állati szervezeteket, valamint az ivóvízbe kerülve hatással vannak az emberre. A kutatók a nemzeti hatóságoknál fellelhető adatok alapján kigyűjtötték a legmagasabb felhasználású gyógyszer-hatóanyagokat, amelyek azonosítását végzik a Dunában és a Tiberisben. 2. Megszervezték 2016. június 12-16. között Pisa-ban a XV. IHSS konferenciát, amelynek központi témája volt a gyógyszer-

hatóanyag szennyezések okozta problémáknak, a farmakológiai vizsgálatok új irányvonalainak, a személyre szabott terápia lehetőségeinek bemutatása.

Közös publikációk száma: 4 tudományos publikáció (3 elfogadva, 1 benyújtva)

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

Együttműködő partnerintézmény: Wayne State University és National Institutes of Health, Perinatology Research Branch (Detroit, MI, USA).

Egyezmény neve: MTA Lendület pályázat.

Eredmények: Ezen kollaborációból 2016-ban öt tudományos közlemény jelent meg.

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

Együttműködő partnerintézmény: University of Basel (Bázel, Svájc).

Egyezmény neve: MTA Lendület pályázat.

Eredmények: Ezen kollaborációból 2016-ban egy tudományos közlemény jelent meg, egy-egy svájci és MedInProt pályázat került elnyerésre, és egy OTKA pályázat került beküldésre.

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

Együttműködő partnerintézmény: Ben Gurion University (Beer Sheva, Israel).

Egyezmény neve: MTA Lendület pályázat.

Eredmények: Ezen kollaborációból 2016-ban egy-egy cikk és nemzetközi pályázat került előkészítésre.

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

Együttműködő partnerintézmény: University of Southern California (Los Angeles, CA, USA).

Egyezmény neve: MTA Lendület pályázat.

Eredmények: Ezen kollaborációból 2016-ban egy-egy cikk és nemzetközi pályázat került előkészítésre.

Téma címe: Kemoszenzitivitás előrejelzése

Együttműködő partnerintézmény: Yale Egyetem, USA

Eredmények: A triple negatív emlőrákokban a kemorezisztenciát előrejelző faktorokat genom-szintű vizsgálata. Az eredményeket a PLoS Medicine folyóiratban közzétük.

Téma címe: Colon tumorok vizsgálata

Együttműködő partnerintézmény: Michigani Egyetem, USA

Eredmények: Igazoltuk, hogy a vasfelvétel szabályozásában részt vevő DNMT1 gén a JAK-STAT3 jelátviteli úton keresztül serkenti a colon tumorok kialakulását. Az eredményeket a Cell Metabolism folyóiratban közzétük.

Téma címe: DNS repair vizsgálata

Együttműködő partnerintézmény: John Hopkins Egyetem, USA

Eredmények: Azonosítottuk a HOXC10 gén, mint a kemorezisztencia kialakulásának egyik oki génjét emlőtumoros sejtekben. Az eredményeket a Cancer Research folyóiratban közzétük.

Vállalati kutatás-fejlesztési kapcsolatok

Téma címe: TagetExKft-vel több gyógyszeripari szempontból fontos fehérje közös vizsgálata

Együttműködő partnerintézmény: TagetExKft

Eredmények: egy közös publikáció.

Téma címe: CRISPR genom-editálási módszer alkalmazása humán indukált pluripotens őssejt vonalakon neuropszichiátriai betegségek *in vitro* modellezése és genetikai hátterének vizsgálata céljából

Együttműködő partnerintézmény: Richter Gedeon Nyrt.

Egyezmény neve: Gyógyszercélpont felfedezésére, azonosítására, validálására szolgáló kutatási javaslat és megvalósítási terv kidolgozása” tárgyban meghirdetett Richter Témapályázat

Eredmények: Még nincsenek, 2016 decemberében indult a projekt.

Téma címe: Bioszimiláris monoklonális antitestek fejlesztése

Együttműködő partnerintézmény: Richter Gedeon Nyrt.

Egyezmény neve: VKSZ pályázat

Téma címe: Köldökzsínórvér-eredetű pluripotens őssejtbank technológiai kifejlesztése és biobank megalapítása (GINOP-2.1.1-15)

Együttműködő partnerintézmény: Aktogen Hungary Kft.

Téma címe: Reagens és szolgáltatás csomag kialakítása gyógyszerek abszorpciójának – disztribúciójának – metabolizmusának - eliminációjának (ADME) vizsgálatához

Együttműködő partnerintézmény: SOLVO ZRt

Téma címe: Diflovidazine és clofentezine *in vitro* farmakokinetikai viselkedésének és metabolizmusának vizsgálata, a metabolit képződés mechanizmusa

Együttműködő partnerintézmény: Toxi-Coop Toxikológiai Kutató Központ ZRt (Budapest)

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

Együttműködő partnerintézmény: Zymo Research Corporation (Irvine, CA, USA)

Egyezmény neve: MTA Lendület pályázat

Eredmények: Egy közleményt és egy nemzetközi pályázatot készítettek elő.

Részvétel a tudományos közéletben

Az Enzimológiai Intézet Kutatócsoport vezetői aktívan részt vesznek a tudományos közéletben, valamint számos tudományos testület vezetőségi tagjai (Magyar Biokémiai Egyesület, Magyar Biofizikai Társaság, Magyar Bioinformatikai Társaság, MTA Jelátvitel Szakosztály, MTA Molekuláris Biológiai, Genetikai és Sejtbiológiai Tudományos Bizottság, Bioinformatika Osztályközi Állandó Bizottság, Magyar Genetikusok Egyesülete RNS Bizottsága stb). Képviseltetik magukat az Európai Komplement Hálózat bizottságában, valamint közülük került ki a FEBS Advanced Course Committee elnöke. Az EU-OPENSREEN projekt, és egyben a Magyar Kémia Biológiai hálózat itthoni koordinátora is közülük kerül ki, valamint egyikük részt vett egy nagyátesztő-képességű (HTS) hatóanyagszűrésre alkalmas európai szintű, akadémiai infrastruktúra kiépítésére és koordinálására létrejött nemzetközi konzorcium munkájában.

A kutatócsoport vezetők számos szakfolyóirat szerkesztőségi tagjai, mint pl. Plos One, FEBS Letters, Immunobiology, CPPS, J. Pathol. Translational Med., Journal of Bacterology and Parasitology, Journal Physics, Biology Direct, The Open Applied Informatics Journal.

2016 októberétől az egyik csoport vezetője a 2017 Central European Genome Stability Meeting nemzetközi konferencia főszervezője, és ezen kívül is számos hazai és nemzetközi konferencia, illetve szimpózium szervezésében vállalnak jelentős szerepet a kutatócsoportok vezetői és tagjai (Gárdos György Szimpózium, Farmakokinetika és Gyógyszermetabolizmus Szimpózium).

Felsőoktatási tevékenység

Az intézet fontos feladatának tekinti a nemzetközileg beágyazott alapkutatás mellett az oktatást. Munkatársaik hat egyetemen (ELTE, BME, Semmelweis Egyetem, Pázmány Péter Katolikus Egyetem, Debreceni Egyetem, Szegedi Tudományegyetem Doktori Iskolája) tartanak előadásokat, illetve gyakorlatokat mind az alapképzésben mind posztgraduális oktatásban. Az intézet ezzel egyidőben több mint 60 doktorandusz hallgató oktatását is ellátja, akik munkájukkal nagymértékben hozzájárulnak az intézet eredményeihez.

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A pályázat megnevezése: Kutatási infrastruktúra fejlesztése (FIEK-16)

A pályázati téma megnevezése: Molekuláris biomarker kutatási és szolgáltatási központ kialakítása az ipari igények kiszolgálása érdekében

A pályázat azonosító száma: FIEK_16-1-2016- 0005

A pályázati támogatás mértéke: 2 712 184 794 Ft (ebből 2016-ra 0 Ft)

A pályázat megnevezése: NKFIH PD pályázat

A pályázati téma megnevezése: Investigation of genomic mutagenesis and chemotherapy treatment resistance

A pályázat azonosítószáma: 121381

A pályázati támogatás mértéke (összesen, ill. 2016-ban): 15 087 000 Ft, ill. 419 E Ft

A pályázat megnevezése: Richter Kutatási Témapályázat

A pályázati téma megnevezése: „CRISPR genom-editálási módszer alkalmazása humán indukált pluripotens őssejt vonalakon neuropszichiátriai betegségek in vitro modellezése és genetikai hátterének vizsgálata céljából”

A pályázat azonosítószáma: RG-IPI-2016 TP10/15

A pályázati támogatás mértéke (összesen, ill. 2016-ban): 26 M Ft, ill. 4 M Ft

A pályázat megnevezése: BCRF (Breast Cancer Research Foundation) társpályázat

A pályázati téma megnevezése: Genomic Approaches for Discovery of Predictors and Improvement of Therapy Response

A pályázat azonosítószáma: BCRF 00087415

A pályázati támogatás mértéke (összesen, ill. 2016-ban): 28436 USD, ill. 7109 USD

A pályázat keretében 2016-ban végzett munka fontosabb eredményei: A kutatócsoport génmódosított sejtvonalakat hozott létre a BRCA mutáns daganatokban kialakuló kemoterápia-rezisztencia mechanizmusainak modellezéséhez.

A pályázat megnevezése: Collaborative Research Fund from NST

A pályázati téma megnevezése: Biophysical and biochemical characterization of the recognition motifs in IDPs.

A pályázati támogatás mértéke (összesen, ill. 2016-ban): 21 M Ft (0 Ft)

A pályázat megnevezése: OTKA K 119374

A pályázati téma megnevezése: Kapcsolatok a komplementrendszer három aktiválódási útvonala között.

A pályázati támogatás mértéke (összesen, ill. 2016-ban): 24,916 / 1,557 M Ft

A pályázat megnevezése: OTKA K 119287

A pályázati téma megnevezése: Transzmembrán fehérjék transzkriptom analízise

A pályázati támogatás mértéke (összesen, ill. 2016-ban): 40 788 E Ft

A pályázat megnevezése: GINOP-2.1.1-15

A pályázati téma megnevezése: Köldökszínórvér-eredetű pluripotens őssejtbank technológiai kifejlesztése és biobank megalapítása

A pályázat keretében a munka 2017-ben indul.

A pályázat megnevezése: University of Basel Innovation Pilot Project Grant

A pályázati téma megnevezése: The effects of pregnancy-specific galectin-13/PP13 on maternal neutrophil functions and its implication in the disease pathways of preeclampsia

A pályázati támogatás mértéke (összesen, ill. 2016-ban): 50.000 CHF (összesen, 2016-ra)

A pályázat keretében az eredményekből egy OTKA pályázat és egy tudományos közlemény került előkészítésre.

A pályázat megnevezése: OTKA K119283

A pályázati téma megnevezése: Párbeszéd a daganatsejtek és környezetük között. A fibroblaszt aktiváció szerepe a tumornövekedésben és invázióban.

A pályázati támogatás mértéke: 35 M Ft (4 évre), 8 M Ft a 2016/17-es pályázati évre.

A pályázat megnevezése: OTKA K 119493

A pályázati téma megnevezése: A DNS-beli uracil prevenciójában, javításában, fenntartásában és esetleges jelátviteli szerepében fontos útvonalak kapcsolata.

A pályázati támogatás mértéke (összesen, ill. 2016-ban): 47,8 M Ft

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Dülk M, Kudlik G, Fekete A, Ernszt D, Kvell K, Pongrácz JE, et al. (8, Merő BL, Szeder B, Radnai L, Vas V, Buday L): The scaffold protein Tks4 is required for the differentiation of mesenchymal stromal cells (MSCs) into adipogenic and osteogenic lineages. *Sci. Rep*, 6: 34280 (2016) <http://real.mtak.hu/id/eprint/41820>
2. Schiedel M, Rumpf T, Karaman B, Lehotzky A, Gerhardt S, Ovádi J, et al. (3): Structure-based development of an affinity probe for sirtuin 2. *Angewandte Chemie - international edition*, 55(6): 2252-2256 (2016) <http://real.mtak.hu/id/eprint/34687>
3. Magyar C, Gromiha MM, Sávolgy Z, Simon I: The role of stabilization centers in protein thermal stability. *Biochemical and Biophysical Research Communications*, 471: 57-62 (2016) <http://real.mtak.hu/id/eprint/34677>
4. Bársony O, Szalóki G, Türk D, Tarapcsák S, Gutay-Tóth Z, Bacsó Z, et al. (5, Szakács G): A single active catalytic site is sufficient to promote transport in P-glycoprotein. *Sci. Rep*, 6: 24810 (2016) <http://real.mtak.hu/id/eprint/36200>
5. Szikriszt B, Póti Á, Pipek O, Krzystanek M, Kanu N, et al. (7, Molnár J, Szeltner Z, Tusnády GE, Szüts D): A comprehensive survey of the mutagenic impact of common cancer cytotoxics. *Genome Biol*, 17: 99 (2016) <http://real.mtak.hu/id/eprint/36039>
6. Guharoy M, Bhowmick P, Sallam M, Tompa P: Tripartite degrons confer diversity and specificity on regulated protein degradation in the ubiquitin-proteasome system. *Nature Communications*, 7: 10239 (2016) <http://real.mtak.hu/id/eprint/36031>

7. Oroszlán G, Kortvely E, Szakács D, Kocsis A, Dammeier S, Zeck A, et al. (5, Závodszky P, Gál P, Dobó J): MASP-1 and MASP-2 Do Not Activate Pro-Factor D in Resting Human Blood, whereas MASP-3 Is a Potential Activator: Kinetic Analysis Involving Specific MASP-1 and MASP-2 Inhibitors. *J. Immuno*, 196: 857-865 (2016)
<http://real.mtak.hu/id/eprint/34689>
8. Varga J, Dobson L, Tusnady GE: TOPDOM: database of conservatively located domains and motifs in proteins. *Bioinformatics*, 32: 2725-2726 (2016)
<http://real.mtak.hu/id/eprint/41864>
9. Sándor S, Jordanidisz T, Schamberger A, Várady G, Erdei Z, Apáti Á, Sarkadi B, Orbán TI: Functional characterization of the ABCG2 5' non-coding exon variants: Stem cell specificity, translation efficiency and the influence of drug selection. *Biochim Biophys Acta*, 1859(7): 943-51 (2016) <http://real.mtak.hu/id/eprint/41881>
10. Tóth K, Csukly G, Sirok D, Belic A, Kiss Á, Háfra E, et al. (4, Déri M, Monostory K): Optimization of clonazepam therapy adjusted to patient's CYP3A-status and *NAT2* genotype. *International Journal of Neuropsychopharmacology*, 19(12): 083 (2016)
<http://real.mtak.hu/id/eprint/46236>
11. Zeke A, Misheva M, Reményi A, Bogoyevitch MA: JNK signaling: Regulation and functions based on complex protein-protein partnerships. *Microbiology and Molecular Biology Reviews*, 80(3): 793-835 (2016) <http://real.mtak.hu/id/eprint/40186>
12. Than NG: A praeeclampsia kórélettana. *In: A perinatológia kézikönyve*, Medicina Könyvkiadó, 23. Fejezet: 232-248 (2016)
13. Sztupinszki Z, Györffy B: Colon cancer subtypes: concordance, effect on survival and selection of the most representative preclinical models. *Sci Rep*, 16(6): 37169 (2016)
<http://real.mtak.hu/id/eprint/46466>

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

A párhuzamosan beszélők hangjának szétválasztására hatással lévő legfőbb változók vizsgálata. Az újszülött csecsemők hallási képességeit felderítő kutatás lezárása és az eredmények publikációra történő előkészítése.

Az elterelődéssel, illetve a kockázattal járó döntésekkel kapcsolatos végrehajtoi működés egyes alapfolyamataiban megfigyelhető életkori különbségek feltárása. Az automatikus változásdetekció vizsgálata a látás területén, kapcsolata ingerspecifikus adaptációs folyamatokkal, és a parvo- és magnocelluláris rendszer szerepe ezekben a működésekben.

A vizuális információfeldolgozás elemi működésének idői jellemzőinek feltárása időseknél és fiataloknál.

Űranalóg szimulációban, szélsőséges körülmények között (Antarktiszon) élő kiscsoportok pszichodinamikájának tartalomelemzéses vizsgálata, az ehhez szükséges automatikus elemzőprogramok kifejlesztése korszerű nyelvtechnológiai eszközökkel.

A Nemzetközi Űrállomáson végzett, űrhajósok kognitív képességeit és agyműködését vizsgáló kísérletsorozat adatainak elemzése és publikálása.

A kognitív fáradás agyműködésre és teljesítményre gyakorolt hatásának vizsgálata.

A humán fiziológiás és kóros agyi aktivitási mintázatok vizsgálata. Az epilepsziák bizonyos formáinak közös idegi mechanizmusainak feltárása széles módszertani alapon.

A rendszer idegtudományi kutatásokra alkalmas bionikai interfészek tervezése és validálása.

A viselkedés és kognitív feldolgozási mechanizmusok közötti összefüggések feltárása, szisztematikus adatgyűjtés és elemzés a kutya és ember szociokognitív készségeinek különböző megnyilvánulásairól.

A csecsemőkortól utánkövetett serdülő populáció kérdőíves és viselkedési adatainak feldolgozása és genetikai elemzése.

A versengés és a pszichés és szomatikus egészség összefüggéseinek vizsgálata különböződemográfiai mutatójú csoportok esetén.

Annak vizsgálata, hogy a versengő attitűd változik-e kulturális hatásokra, hogy az iskolai versengő légkör hatással van-e a diákok pszichés és szomatikus egészségére.

A kollektív áldozati szerepnek a nemzeti identitásban betöltött szerepének a feltárása.

A tehetség megbízható számítógépes mérésének a kidolgozása.

A női szerepek társadalmi reprezentációjának a feltárása.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények **a) Kiemelkedő kutatási eredmények**

A párhuzamosan beszélők hangjának szétválasztását vizsgáló, a Lendület pályázat által támogatott kutatás során 1) összefoglalták a hallási jelenetelemzés különböző elvi alapokon

nyugvó komputációs modelljeit, és megadták ezek integrációjának lehetséges irányát; 2) leírták a párhuzamos hangok szétválasztását kísérő agyi elektromos oszcillációkat és az akusztikus alak-háttér megkülönböztetés során a spektrális és temporális jelzőmozzanatok integrációját jelző agyi válaszokat; 3) bizonyították, hogy a hallási szabálysértések detektálása a hangok közötti átmeneti valószínűségek reprezentációjára épül, ami megalapozza a hangsorok agyi prediktív modellezését, valamint, hogy a lokális prediktív modellen túl az elsőbbségi hatás is befolyásolja a hangsorban megjelenő hangok jelentőségének értékelését; és 4) kimutatták, hogy a hangsorok szétválasztásában megmutatkozó egyéni különbségek összefüggenek az egyén ego-rugalmasságával és egyes végrehajtó funkciókat vizsgáló feladatokban mutatott teljesítményével.

Megmutatták, hogy a hangok végződése – hasonlóan a hangok kezdetéhez – jellegzetes, a figyelemi irányultság függvényében változó eseményhez kötött potenciál mintázatot vált ki, ami szenzoros és végrehajtói folyamatokat is tükröz.

Agyi elektromos tevékenység vizsgálatával kimutatták, hogy nem-figyelt környezeti változások azonosításában két egymást követő folyamat játszódik le: az egyik a környezeti szabályszerűségekre mutató aktivitás csökkenés, a másik olyan aktivitási többlet, melyet a szabálytól eltérő esemény vált ki. Amikor a változás a látvány háttérében jelentkezik, az előbbi folyamat dominál. A vizuális objektumok változásakor viszont megjelenik az utóbbi is. Egy olyan módszer alkalmazásával, mely a szabályos ingerlésre csökkenő aktivitás hatását kiszűri, az objektumok változásának automatikus azonosítása vált vizsgálhatóvá. E hatások a felnőtt korban keveset változnak.

Vizuális maszkolási helyzetben igazolták, hogy az idős személyeknek a fiataloknál hosszabb időre van szüksége a célinger azonosításához. Az inger megnövekedett perzisztenciája viszont előny is lehet. Egy olyan feladatban, ahol az inger észlelése két egymás után bemutatott részlet integrációjával volt lehetséges, a vizuális eltérési negativitással kimutatták, hogy ez az integráció fiataloknál nem történik meg, időseknél azonban még 20 ms-os késés után is létrejön. Az eredmény jelzi, hogy speciális esetekben a gyengébb gátló folyamatok jobb teljesítményhez – a konkrét példában jobb vizuális észleléshez – vezethetnek.

Az emocionális tartalmú szavakra történő emlékezéssel összefüggő kiváltott potenciál változások arra utalnak, hogy fiatal személyek a negatív érzelmi töltésű ingereket hatékonyabban dolgozzák fel. E hatás csökkenése idősekben az adaptív magatartás károsodását jelezheti.

Azt találták, hogy sorozatos, kockázattal járó döntési feladatban a következmények mérlegelése fontos a fiatalok számára a megfelelő hatékonyságú lépések tervezéséhez és elvárások kialakításához. Ez a folyamat idősekben kevésbé hatékony.

Eseményhez kötött kiváltott potenciálok módszerével és viselkedési adatokkal igazolták, hogy az antarktisi szélsőséges viszonyok (főleg a hipoxia, fény-sötétség ciklus megváltozása, izoláció) között is jól működnek a figyelmi funkciók.

Megállapították, hogy az aritmetikai feladat végzése közben elvezetett agyi elektromos tevékenység „minimális feszítő fák” módszerével történő elemzése lehetővé teszi a folyamatban résztvevő neurális hálózatok azonosítását.

Partnereikkel korábban közösen fejlesztett újszerű, innovatív megoldásokat is tartalmazó elektrofiziológiai mérőrendszer alkalmazhatóságát vizsgálták különböző kísérleti

körülmények között. Kimutatták, hogy e módszerrel (elektronikus mélységszabályzós eszköz) nagy mennyiségű hasznos adat nyerhető ki az egyes kísérletekből, ezáltal csökkenthető a kísérleti állatok száma. A rendszer jelenleg kereskedelmi forgalomban kapható egyik partnerüknél (ATLAS Neuroengineering).

Megvizsgálták az altatás és a mélyalvás fázisában kialakuló lassú hullámú aktivitás generátorainak eloszlását patkány agykérgének különböző rétegeiben. Azt találták, hogy az V. kérgi rétegnek jelentős szerepe lehet ennek az agyi ritmusnak a kialakításában, de a talamusznak is jelentős hatása lehet a kérgi lassú hullám aktivitásra a IV. rétegen keresztül.

Az ELTE és a Semmelweis Egyetem kutatóival együttműködésben végzett vizsgálatok nyomán elsőként sikerült arra bizonyítékot találni, hogy a kutya esetében az oxytocinnak mint neurohormonnak jelentős, de fajtánként változó befolyása van a társas ingerek feldolgozására és az emberrel szemben mutatott társas viselkedésekre. Ezek az eredmények fontos előrelépést jelentenek a humán társas készségek evolúciós gyökereinek és neurohormonális hátterének mélyebb megismeréséhez.

A kutya viselkedéses vizsgálatokat alvási EEG mérésekkel kombináló kutatás fontos új információkkal szolgált az alvás memória konszolidációban játszott szerepét illetően. A világon elsőként sikerült noninvazív módszerekkel kimutatni, hogy a kutyák humán-analóg társas tanulási képességei alvás-függő memória konszolidációs folyamatokkal hozhatók kapcsolatba.

Mivel a korábbi kutatások ritkák és ellentmondóak abban, hogy a gondozó milyen szerepet játszhat a csecsemő közös figyelem képességének fejlődésében, anya-csecsemő triádikus (felnőtt–csecsemő–tárgy) interakciókat vizsgáltak 9 hónapos korban. Az anya kezdeményező viselkedése befolyásolta az egyszerű közös figyelem kialakulását, amely magasabb arányban jellemezte a bizonytalanul kötődő diádok interakcióját, vélhetően az inszenzitív, korlátozó gondozói viselkedés következtében. A fejlődés szempontjából magasabb szintű megosztott közös figyelem azonban nem függött össze a kötődéssel és az anyai viselkedéssel; ellenben a csecsemő idegi érését jellemző változók (születési súly, tekintetváltogatás képessége) jósolták be legjobban 9 hónapos kori előfordulását. Mindez arra utal, hogy a csecsemő fejlődési üteme szabja meg az anyai viselkedés lehetséges befolyását.

Feldolgozták Bálint Alice pszichoanalitikus naplóját, melynek eredményeképpen pontosabban rekonstruálható az analitikus személyes és szakmai fejlődésének és legfontosabb kapcsolatainak története.

A leszbikusság államszocializmus ideje alatti magyarországi pszichiátriai reprezentációinak elemzése feltárta, hogy a pszichiátria a hagyományos nemiszerep-normákat és családi ideálokat erősítette meg, s elsőrendű terápiás célja a megfelelő társadalmi adaptáció elérése volt.

A versengés kutatása során reprezentatív mintán kimutatták, hogy a fiatalabbakra, a magasabban iskolázottakra, a budapestiekre erősebb versengés, jobb pszichés megküzdési mechanizmusok jellemzőek. Az idősebbekre, az alacsonyabban iskolázottakra, a vidékiekre erősebben jellemző a versengéskerülés, mint a fenti csoportokra. A versengő attitűd negatívan korrelál a kardiovaszkuláris megbetegedésekkel.

A versengés moralitásával és igazságosságával kapcsolatos személyes élmények erősen együtt járnak a magyarországi versengési folyamatok általános percepciójával. A budapestiek

személyes versengés élményei pozitívabbak, mint a vidékieké. A reprezentatív minta alapján a magyar lakosság túlnyomó többsége átélt igazságtalan versengést és azt, hogy mások csaltak vele szemben a versengésben; egyharmaduk pedig maga is csalt a versengésben.

Az európai történelmi események szociális reprezentációja szerepet játszik az európai identitás jelentésének meghatározásában, és a magyar nemzeti identitásra jellemző kollektív áldozati azonosulás az európai identitás konstrukcióját is meghatározza. Kidolgozták a Kollektív Büntudati Skála magyar változatát.

A diszlexiás felnőttek online vizsgálatához a tanulási képességek és a neurokognitív tesztek kombinációjával kialakítható egy egyéni optimalizált profil, amely könnyen értelmezhetően jelzi az egyén számára az erősségeinek és gyenge oldalainak a mértékét.

Validáltak több olyan mérőeszközt, melyek a következő problémás és nem problémás viselkedésekhez tartoznak: 1) TV sorozatnézés, 2) Tinder-használat és 3) Facebook használat. Emellett feltárták az összeesküvés elméletekbe vetett hit csökkentésének lehetőségeit.

b) Tudomány és társadalom

Több hazai és nemzetközi online folyóiratban közölték, hogy milyen okai és következményei vannak a [sorozatnézéssel kapcsolatos szenvedélynek](#) és a [Tinder-használatnak](#), valamint, hogy milyen lehetőségek vannak az összeesküvés elméletekben való hit csökkentésére.

Az ESA „Space for Inspiration” rendezvényén bemutatták a Neurospat kísérletet, mint a zsűri által kiválasztott *ESA Success Stories* egyikét.

Szervezőként és közreműködőként rész vettek az Agykutatás Hete rendezvénysorozatban, tudománynépszerűsítő interaktív bemutatókat vezettek, előadásokat tartottak a humán csoportok szerveződéséről és a megszaladási jelenségekről a rendezvényen.

Tudományos népszerűsítő előadásokat tartottak a Magyar Pedagógiai Társaság jubileumi találkozóján a társas tanulás neurofiziológiai alapjairól, valamint a World Wide Free Seminar of the Family Dog Project webináriumon a legújabb kutatási eredményeikről. Ez utóbbi rendezvényt világszerte több ezer, tudomány iránt érdeklődő ember kísérte figyelemmel.

Előadást tartottak az *Oknyomozás tudományos módszerekkel* című nyílt napon, illetve több alkalommal laborbemutatót, és a PPKE ITK-n nyílt napot tartottak érdeklődő középiskolás diákoknak.

A Nemzeti Agykutatási Program 1. – Tudomány és Parlament című, 2016. november 10-én megtartott rendezvényen, amely a Nemzeti Agykutatási Program (NAP) eredményeit és társadalmi hasznát mutatta be, előadást tartottak, amelyen a NAP infobionikai kutatási és fejlesztési eredményeit ismertették.

Kutatásaikról IT cégek felsővezetőinek, informatikai szakmapolitikai vezetőknek tartottak előadást, a Tudomány Napja alkalmából az MTA II. Osztálya által szervezett Oktatási Konferencián, valamint számos pedagógiai fórumon adták elő a kutatásaikat. Több újságnak, illetve rádióműsoroknak adtak interjút (pl. Irány a Mars! Honfoglalás a Világűrben, 168 óra, 2016. november 21. szám; Klub Rádió, Nagy Generáció – 2016. június 1.; Klub Rádió, Többet ésszel – 2016. április 7.).

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

Téma címe: A hallási alak-háttér megkülönböztetés idegi korrelátumai

Együttműködő partnerintézmény: Center for Computational Neuroscience and Neural Technology, Boston University, USA

Eredmények: A kölcsönös post-doc látogatások során közös kísérletek tervezésére, a kísérleti adatok elemzésére és értékelésére került sor. Közös publikációk száma: 1

Téma címe: Előítélet csökkentés „élő könyvtár” által.

Együttműködő partnerintézmény: University of Massachusetts Amherst, Amherst, USA

Eredmények: Előítélet csökkentő intervenciók kidolgozása. Közös publikációk száma: 1

Téma címe: Viselkedéses addikciók feltárása

Együttműködő partnerintézmény: University of Nottingham, UK

Eredmények: Közös publikáció a munkafüggőség témájában.

Téma címe: Effect of artificial gravity regimens on neurocognitive performance during head down tilt bedrest (NeuroGravity)

Együttműködő partnerintézmény: German Sport University, Köln

Egyezmény: közös pályázat és kutatás

Eredmények: nyertes pályázat és 2017-ben kezdődő kutatás: kognitív képességek és agyműködés űr analóg helyzetben (ESA/NASA Bedrest Study)

Téma címe: Psychological Status Monitoring by Content Analysis and Acoustic-Phonetic Analysis of Crew Talks and Video Diaries (CAPA)

Együttműködő partnerintézmény: University of British Columbia, Vancouver, Canada

Egyezmény: közös pályázat és kutatás

Eredmények: Sikeres közös pályázat és folyamatban lévő kutatás: déli-sarki kutatóállomáson áttelelő legénység naplójának tartalomelemzése.

Téma címe: Magas transzlációs értékkel bíró viselkedéses modell kifejlesztése kutyában

Együttműködő partnerintézmény: Richter Gedeon Vegyészeti Gyár NyRt., Magyarország

Egyezmény: Felek közti szerződés (KK/327/ 2016) tudományos együttműködésre, az autizmussal funkcionálisan analóg viselkedési tünetek leírására és azok genetikai hátterének tanulmányozására.

Eredmények: Mivel a jelenleg 2 éves időtartamra tervezett együttműködés csak 2016 novemberében kezdődött, a beszámolási évben még csak a kutatási előkészületek (előkísérletek végzése N=36 laboratóriumi beagle kutyán, a kutya társas kompetenciáját mérő kérdőíves eszköz kidolgozása, adatfelvétel N= 1000 alannal) történtek meg.

Téma címe: Multimodális és humán elvezetésre alkalmas elektrofiziológiai struktúrák kutatása

Együttműködő partnerintézmény: IMTEK, Freiburg, Németország

Egyezmény: Brain Links Brain Tools

Eredmények: Mikroelektromechanikai rendszereket terveztek multimodális elektrofiziológiai és két-foton mérésekhez. Teszt struktúrák tulajdonságait kutatták olyan elektrofoziológiai rendszerekhez, melyet a humán gyógyászatban és kutatásban egyaránt felhasználhatnak a jövőben. Közös publikációk száma: 1

Téma címe: Sok ezer csatornás elektrofiziológiai struktúrák kutatása

Együttműködő partnerintézmény: IMEC, Leuven, Belgium

Egyezmény: Neuroseeker konzorcium

Eredmények: Sok ezer csatornás elektrofiziológiai rendszert fejlesztettek ki és teszteltek sikeresen in vivo körülmények között. Közös publikációk száma: 1

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A pályázat címe: Automatikus és feladatfüggő információ-feldolgozás: válaszdetekció feladathelyzetben

A pályázat kódja: NKFIH 119587

A pályázat kezdete: 2016.10.01.

A pályázat időtartama: 48 hónap

A pályázat teljes összege: 47 781 E Ft

Vezető intézmény: MTA TTK KPI

A pályázat keretében 2016-ban végzett munka fontosabb eredményei: A kutatások kísérleti terveinek összeállítása, a téri figyelem és az automatikus válaszdetekció kapcsolatát vizsgáló kísérlet programozása.

A pályázat címe: Effect of artificial gravity regimens on neurocognitive performance during head down tilt bedrest

A pályázat kódja: ESA (European Space Agency) AO-16-BR

A pályázat kezdete: jelenleg nem ismert (2017)

A pályázat időtartama: 24 hónap

A pályázat teljes összege: jelenleg nem ismert

Vezető intézmény: German Sport University, Köln

Résztvevő intézmények: MTA TTK KPI, Jozef Stefan Institute, Ljubljana, Szlovénia

A pályázat címe: Agykérgi szinkron populációs aktivitás vizsgálata epilepsziás és nem epilepsziás tumoros betegeknél

A pályázat kódja: NKFIH K 119443

A pályázat kezdete: 2016. 10.01.

A pályázat időtartama: 48 hónap

A pályázat teljes összege: 47 680 E Ft

Vezető intézmény: MTA TTK KPI

A pályázat keretében 2016-ban végzett munka fontosabb eredményei: 2016 során előkészítő munka történt. Elkezdték a humán mérések szervezését.

A pályázat címe: Agy-gép interfészek új perspektívában: a neocortex egyidejű vizsgálata nagy sűrűségű mikroelektród rendszerekkel és kétfoton mikroszkópiával

A pályázat kódja: NKFIH PD 121015

A pályázat kezdete: 2016.12.01.

A pályázat időtartama: 36 hónap

A pályázat teljes összege: 15 087 E Ft

Vezető intézmény: MTA TTK KPI

A pályázat keretében 2016-ban végzett munka fontosabb eredményei: Beszerezték a vizsgálatokhoz szükséges speciális (GCaMP6f) egértörzset, és megtervezték a speciális in vivo elektródot, amelyet a mérésekhez fognak használni.

A pályázat címe: A periszomatikus beidegzés szerepe a spontán szinkron populációs aktivitások kialakulásában epilepsziás és nem epilepsziás (tumoros) betegek neocortikális szeletpreparátumaiban

A pályázat kódja: NKFIH PD 121123

A pályázat kezdete: 2016.10.01.

A pályázat időtartama: 36 hónap

A pályázat teljes összege: 15 087 E Ft

Vezető intézmény: MTA TTK KPI

A pályázat keretében 2016-ban végzett munka fontosabb eredményei: 2016 során előkészítő munka történt.

A pályázat címe: A kérgi visszacsatolás szerepe a talamokortikális aktivitásban

A pályázat kódja: NKFIH K 119650

A pályázat kezdete: 2016.12.01.

A pályázat időtartama: 48 hónap

A pályázat teljes összege: 47 504 E Ft

Vezető intézmény: MTA TTK KPI

A pályázat keretében 2016-ban végzett munka fontosabb eredményei: Megkezdtek a kísérletek előkészítését (optogenetika beállítása, előkísérletek végzése), valamint az analízishez szükséges programok megírását.

A pályázat címe: A kortikotalamikus innerváció szerepének vizsgálata a szomatoszenzoros talamikus magvakban

A pályázat kódja: NKFIH PD 121307

A pályázat kezdete: 2016.12.01.

A pályázat időtartama: 48 hónap

A pályázat teljes összege: 15 087 E Ft

Vezető intézmény: MTA TTK KPI

A pályázat keretében 2016-ban végzett munka fontosabb eredményei: A tavalyi évben elkezdtek a szabadon mozgó állatokkal tervezett optogenetikai kísérletek beállítását. Előkísérleteket végeztek hagyományosan beültetett elektródok segítségével, melyekben a szomatoszenzoros kérgi területekről vezettek el lokális mezőpotenciált optikai ingerléssel kombinálva. Ezen felül dolgoztak az in vivo EEG regisztráláshoz alkalmazni kívánt microdrive megtervezésén is.

A pályázat címe: A dajkabeszédre való reaktivitás összehasonlító vizsgálata kutyán és emberen

A pályázat kódja: NKFIH PD 121038

A pályázat kezdete: 2016.10.01.

A pályázat időtartama: 36 hónap

A pályázat teljes összege: 15 264 E Ft

Vezető intézmény: MTA TTK KPI

A pályázat keretében 2016-ban végzett munka fontosabb eredményei: Protokollok kidolgozása, pilóta tesztek megszervezése és elvégzése ezek eredményeinek feldolgozása.

A pályázat címe: Az oxytocin rendszer külső ingerekkel való stimulálásának hatása a kutya társas készségeire.

A pályázat kódja: BIAL Foundation, Portugália 503 323 055

A pályázat kezdete: 2017.01.01.

A pályázat időtartama: 36 hónap

A pályázat teljes összege: 41.500 EUR

Vezető intézmény: MTA TTK KPI

Részvevő intézmények: „Alexandru Ioan Cuza” University, Románia

A pályázat címe: Youth Activism, engagement and the development of new civic learning spaces

A pályázat kódja: Leverhulme Foundation, UK IN-2016-002

A pályázat kezdet: 2016.05.01.

A pályázat időtartama: 36 hónap

A pályázat teljes összege: 122 857 GBP

Vezető intézmény: University of York, UK

Részvevő intézmények: University of York (Anglia), University of South Australia (Ausztrália), Ontario Institute of Studies in Education, University of Toronto (Kanada), American University of Beirut (Libanon), Nanyang Technological University (Szingapur), MTA TTK KPI.

A pályázat keretében 2016-ban végzett munka fontosabb eredményei: Az összes résztvevő ország tanulmányt készített az ifjúsági aktivizmussal kapcsolatos tudományos kutatásokról és az aktív állampolgáriságra való nevelés történetéről és gyakorlatáról az országukban.

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Barkaszi I, Takács E, Czigler I, Balázs L: Extreme Environment Effects on Cognitive Functions: A Longitudinal Study in High Altitude in Antarctica. *Frontiers in Human Neuroscience*, 10: (2016)
<http://journal.frontiersin.org/article/10.3389/fnhum.2016.00331/full>
2. Fiáth R, Kerekes BP, Wittner L, Tóth K, Beregszászi P, Horváth D, et al. (1, Ulbert D): Laminar analysis of the slow wave activity in the somatosensory cortex of anesthetized rats. *European Journal of Neuroscience*, 44:(3) 1935-1951 (2016)
<http://real.mtak.hu/38757/>
3. Hagelkruys D, Böhm C, Motschnig R, Kertzman S, Sirota A, Bernard Lerer B, et al. (1, Gyarmathy E): Adapting a stand-alone computerized cognitive test battery for online use. A case-study in the context of users with special needs. *Computers in Human Behavior*, 63: 757-768 (2016) <http://real.mtak.hu/42300/>
4. Kardos Zs, Kóbor A, Takács Á, Tóth B, Boha R, File B, et al. (1, Molnár M): Age-related characteristics of risky decision-making and progressive expectation formation. *Behavioural Brain Research*, 312: 405-414 (2016) <http://real.mtak.hu/37957>
5. Kovács K, Kis A, Pogány Á, Koller D, Topál J: Differential effects of oxytocin on social sensitivity in two distinct breeds of dogs (*Canis familiaris*). *Psychoneuroendocrinology*, 74: 212-220 (2016) <http://real.mtak.hu/42020/>
6. Mittag M, Takegata R, Winkler I: Transitional probabilities are prioritized over stimulus/pattern probabilities in auditory deviance detection: Memory basis for predictive sound processing. *The Journal of Neuroscience*, 36:(37) 9572-9579 (2016)
<http://real.mtak.hu/38008/>
7. Tauzin T, Kovács K, Topál J: Dogs identify communicative agents in third-party interactions based on the observed degree of contingency. *Psychological Science*, 27:(8) 1061-1068 (2016) <http://real.mtak.hu/44988/>
8. Tóth B, Kocsis Z, Háden GP, Szerafin Á, Shinn-Cunningham B, Wler I: EEG signatures accompanying auditory figure-ground segregation. *Neuroimage*, 141: 108-119 (2016)
<http://real.mtak.hu/37880/>

MTA TERMÉSZETTUDOMÁNYI KUTATÓKÖZPONT
SZERVES KÉMIAI INTÉZET

1117 Budapest, Magyar tudósok körútja 2.
telefon: (1) 382 6400; e-mail: soos.tibor@tk.mta.hu
honlap: <http://www.ttk.mta.hu>

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

Az elmúlt évben a korábbi akadémiai intézetek bázisán létrejött Szerves Kémiai Intézet célja a különböző kutatási irányok összehangolása, és a kutatócsoportok közötti együttműködés hatékonyra tétele volt. A 2016-os év elején az MTA vezetése által felkért bizottság szakmai és működési szempontból áttekintette az intézet működését, és javaslataik alapján a TTK vezetése jelentős szervezeti átalakítást hajtott végre az intézetben. Az elsődlegesen szerkezeti kémia irányultságú csoportok a központi igazgatás alá tartozó és nagy műszereket üzemeltető Műszer Centrummal kerültek összevonásra 2016 második félévében. Így az intézet kutatási profilja letisztult, elsősorban a szerves kémia és biológiai kémia jellemzi, a kutatócsoportok céljai alapján gyógyszerkémiahoz, az organokatalízishez, a kémiai biológiához, elméleti kémiához, a szupramolekuláris kémiához, proteomikához, illetve funkcionális farmakológiához kapcsolódik. A Szerves Kémiai Intézetben zajló alap és alkalmazott kutatás mellett az intézet munkatársai nagy hangsúlyt fektetnek az oktatói munkára is, aktívan részt vesznek az ELTE, BME, SOTE egyetemeken zajló elméleti és gyakorlati oktatásokban, valamint PhD hallgatók témavezetésében.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

Gyógyszerkémiai Kutatócsoport

A kutatócsoport jelentős felfedezést tett a vérképzőszervi daganatos megbetegedések gyógyításában ígéretes Janus kináz JAK1 és JAK2 inhibitorok azonosításával. Ezen kutatásaikat a Floridai Egyetem Patológiai Centrumával végzik. A Nemzeti Agykutatási Program támogatásával és a Richter Gedeon NyRt-vel együttműködve új D-aminosav oxidáz gátló vegyületeket fedeztek fel, amelyek hatékonyságát in vivo vizsgálatokkal igazolták.

Organokatalízis Kutatócsoport

A kutatócsoport kutatói egy új organokaszád reakciót írtak le, amely segítségével új típusú szén kvaterner sztereocentrumot tartalmazó ciklohexén állítható elő nagyfokú enantioszelektivitással. Az így kapott alapvázatot sikeresen, többféle módon alakították tovább a terpenoid természetes vegyületek egyik kulcs építővázává, a dekalin vázzá. Kutatásaik eredményét a Chemistry-A European Journal-ban közzölték.

Az organokatalizátorok természetes vegyületek szintézisében való alkalmazása mellett új királis szintetikus startégiákat lehetőségeit is vizsgálta a kutatócsoport. Ezek a kutatások hozzásegítenek a katalizátorok működésének mélyebb megismeréséhez és használatuk további kiterjesztéséhez. Ilyen újszerű alkalmazás egy speciális kinetikus rezolválási eljárás a kénorganikus vegyületek körében. A módszer segítségével közvetlen addíciós reakcióval elő nem állítható királis kénorganikus vegyületeket tudnak kerülő úton előállítani jó hozammal és magas enantioszelektivitással. Az előállított vegyületek szintetikus hasznát is bizonyították: egy diasztereoselektív redukció, majd gyűrűzárás segítségével egyedülálló módon lehetőséget nyújtanak 2,4-diaril-tietánok szelektív előállítására.

Kémiai Biológia Lendület Kutatócsoport

A kutatócsoport munkatársai kutatásaik során polaritás-szenzitív fluorogén vegyületeket állítottak elő, melyeket sikeresen használtak előzőleg élő sejtekbe juttatott ciklooktinnal módosított oligonukleotidok szelektív jelölésére. A vegyületek lehetővé tették a nukleinsavak háttérfluoreszcencia mentes jelölését. Továbbá szintetizáltak egy új, kétpontos jelölést lehetővé tevő, kétszeresen tompított fluoreszcenciával jellemezhető fluorogén jelzővegyület-családot. Megállapították, hogy e jelzővegyületek alacsony háttérfluoreszcenciával jellemezhető jelölési eljárásokban lehetnek használhatók a jövőben. A kísérletek során sikerült azonosítani egy ideális, két ciklooktin egységet tartalmazó peptidszekvenciát, mely a jövőben ún. "self-labeling peptide tag" alapú jelölési eljárásokban alkalmazható. Ugyancsak sikeresen állítottak elő tetrazin-fenoxazon típusú bioortogonálisan alkalmazható, távoli vörös/NIR emisszióval jellemezhető két fluorogén jelzővegyület családot, melyek élő sejtek intracelluláris jelölését teszik lehetővé. Továbbá rézmentes azid-alkin cikloaddícióra alkalmas bifunkciós cisztein-specifikus kémiai hírvivőket fejlesztettek ki, melyek alkalmazásával sikerrel valósítottak meg fehérjék ciszteinen keresztüli fluoreszcens jelzését különféle fluorogén vegyületekkel.

Elméleti Kémiai Kutatócsoport

A kutatócsoport vizsgálta a széles körben alkalmazott Schreiner-féle elektron hiányos tiokarbamid organokatalizátor működését. Az eddigi elképzelések szerint a vegyület katalitikus hatása a tiokarbamid két N-H csoportjának köszönhető, mely dupla hidrogén-híd kölcsönhatással stabilizálja az anionos jellegű átmeneti állapotokat. A dihidropirán (DHP) és metanol katalitikus addíciójára elvégzett elméleti mechanisztikus tanulmányok rávilágítottak arra, hogy ebben a katalitikus folyamatban a tiokarbamid Brønsted savként (és nem dupla H-híd donorként) funkcionál. A számítások szerint az addíciós folyamatot (C-O kötés létrejöttét) a DHP protonálása segíti elő. Az Organokatalízis Kutatócsoporttal együttműködésben az újfajta mechanizmust kísérletileg is alátámasztották. Az új mechanisztikus elképzelés feltehetőleg más reakciókra is kiterjeszhető, és a gyakorlatban felhasználható organokatalizátorok kifejlesztésében. Eredményeiket az Amerikai Kémiai Társaság Catalysis folyóiratban közzé tették, ahol június hónapban az egyik legtöbbet olvasott közlemény volt.

Pirit (FeS_2) - víz határfelület reaktivitásának vizsgálatát végezték el az "Iron-Sulfur-World" elmélet keretei között. Sikeresen felderítették NO_x^- ionok NH_3 -hoz vezető redukciójának lehetséges útjait, amelyek a korábbi kísérletek eredményeivel összhangban voltak. A számítások során azonosított közti termékek figyelemreméltó analógjai a nitrid-reduktáz enzim működése során kimutatott közti termékeknek. Ez a hasonlóság eredhet a mindkét rendszerben megtalálható 5-ös koordinációjú vas reaktivitásának hasonlóságából. A számítások tisztázták a víz és a pirit felszín szerepét. A jelenlévő szuperkritikus víz egyszerre reaktáns, és alkalmas közeg a termodinamikai feltételek biztosításához. A pirit felszín pedig egyszerre reaktáns és hordozó: reagensként részt vesz az O atomok lépésenkénti absztrakciójában, míg hordozóként biztosítja a vízmolekulák és az NO_x^- specieszek szimultán kölcsönhatását a felszíni redukáló atomokkal. A kapott redukciós modell alkalmas arra, hogy megmagyarázza ammónia képződését hidrotermális áramokban a földi élet keletkezésének korai szakaszában. Az eredményeiket az Inorganic Chemistry folyóiratban publikálták, ahol a szerkesztőség az eredmény újdonsága és várható tudományos hatása miatt a cikket nyílt hozzáférésűvé választotta.

Kombinált kvantumkémiai és molekulamechanikai számítások segítségével tanulmányozták aromás gyűrűk O_2 -vel történő oxidációját a nem-hem divas enzimekben, a benzoil-koenzim A példáján keresztül. Megállapították, hogy általában mind a peroxo-divas(III), mind a bis- μ -oxo-divas(IV) szerkezet reagálhat aromás gyűrűkkel; jellemeztek különféle gyökös és

elektrofil oxidációs utakat. Mindez lehetővé tette a korábbi, irodalmi eredmények egységes képbe foglalását. A BoxB esetében a divas(IV) szerkezetet („Q”) találták a legreaktívabbnak annak ellenére, hogy a rokon metán monooxigenázhoz képest itt jelentősen destabilizált. Rávilágítottak, hogy az epoxidáció iránti kemoselektivitáshoz a szubsztrát elektronszerkezete és az enzim által megszabott geometria egyaránt hozzájárul. A kutatási eredmények a tekintélyes Journal of American Chemical Society hasábjain közzéttek.

Szupramolekuláris Kémiai Lendület Kutatócsoport

A kutatócsoport kutatói megmutatták, hogy a flexibilis difoszfín ligandumokból és arany(I) ionokból felépített új, kétmagvú komplexek intramolekuláris aurofil kölcsönhatásának a módosításával hangolható a szilárdfázisú fotolumineszcencia. Megmutatták továbbá, hogy ezek az új szupramolekulák a termokróm, mechanokróm és vapokróm lumineszcens tulajdonságuk mellett igen ritka gerjesztési hullámhosszfüggő lumineszcenciával is rendelkeznek. Igazolták, hogy a külső fizikai és kémiai hatások intramolekuláris aurofil kölcsönhatás kialakulását indukálhatják a kétmagvú arany-komplexekben, ami a lumineszcenciás tulajdonságok drasztikus megváltozását vonja maga után. A kísérleti munkával párhuzamosan a kutatócsoportban végzett kvantumkémiai számítások nagymértékben segítettek a fotolumineszcenciás tulajdonságok értelmezésében. A gyakran használt külső stimulusok (pl. nyomás, hőmérséklet, oldószerzőzők stb.) mellett a gerjesztési fényenergia hangolása újabb lehetőséget nyújt az arany-komplexek fotolumineszcens tulajdonságának a további módosítására.

Több éves munkával feltérképezték egy kétmagvú arany-komplex kristályainak termikus bomlását, mely elvezetett egy unikális cikloaurált Au–C kötést tartalmazó hárommagvú komplex felfedezéséhez. Értelmezték továbbá a C–Cl és C–H kötés aktiválásával járó kétmagvú és hárommagvú arany-komplex képződését. Megmutatták, hogy az aggregáció indukált emissziós aktivitást mutató hárommagvú arany-komplex potenciálisan felhasználható ezüst ionra szelektív választ adó szenzorként.

MS Proteomika Kutatócsoport

A kutatócsoport tömegspektrometria alapú proteomikai, glikoproteomikai és foszfoproteomikai vizsgálati módszerek kidolgozásával, fejlesztésével és biokémiai, orvosi-biológiai alkalmazásával foglalkozik. Kutatásaik során VKSZ pályázat keretében adaptáltak és optimalták glikozilációs mintázat meghatározására szolgáló módszereket bioszimiláris antitest minták jellemzésére. Továbbá növelték fehérjék HPLC-MS/MS alapú aminosav szekvencia lefedettségét. Ezenkívül módszert dolgoztak ki monoklonális antitestek gazdasejt fehérje (HCP) szennyezésének analizálására.

A Nemzeti Agykutatás Program keretében jellemezték a szinaptikus fehérjék poszt-transzlációs módosulásait (foszforiláció és glikoziláció), és megállapították, hogy az alvásdepriváció ezt jelentősen befolyásolja.

A Kutatócsoport módszereket dolgozott ki a biomolekulák tömegspektrometriai energetikai jellemzéséhez. Olyan új szoftvert fejlesztettek ki, amelynek segítségével MS/MS spektrumokból energetikai információk nyerhetők ki igen nagy mennyiségű (több ezer) HPLC-MS/MS felvételből.

MS Metabolomika Kutatócsoport

A kutatócsoport munkatársai számos kihívást jelentő analitikai feladatot oldottak meg, illetve módszert fejlesztettek ki ezek megoldására együttműködő partnereikkel. E kutatásaik keretében módszert fejlesztettek ki és alkalmaztak biológiai mintákban DNS metilációs

profiljának meghatározására; Baicalin, Quercetin-szulfát és Quercetin-glükuronid mérését membrán vezikulumokból; oxitocin mennyiségi meghatározására különböző állati (kutya) és humán eredetű mintákból. Továbbá módszert fejlesztettek ki szteroidok meghatározásra humán eredetű mintából, illetve megvizsgálták a származékképzésének a hatását a kimutatási határ csökkentése érdekében.

Tiol-specifikus kovalensen kötő fragmens molekulák peptidekhez történő kapcsolását vizsgálták LC-MS/MS módszerrel, meghatározták a kötőhely pontos helyét. Vizsgálták Cisztein-specifikus fluoreszcens jelzőmolekulák peptidekhez, proteinekhez történő kötődését. Relatív kvantitatív mérésekkel azonosították a kötőhelyet, és meghatározták a kötődés mértékét. A Szupramolekuláris Kémiai Lendület Kutatócsoporttal együttműködve arany komplexek szerkezetének meghatározásában vettek részt.

NMR Kutatócsoport

A kutatócsoport kutatói a Pannon Egyetem Nanotechnológia Tanszékének kutatócsoportjával együttműködve meghatározták egy a flagelláris transzportfolyamatokban szerepet játszó szignál peptid térszerkezetét, valamint jellemezték a FliS flagelláris chaperon szerkezeti sajátosságait. Eredményeiket a Biochemical and Biophysical Research Communications és a FEBS Letters folyóiratokban publikálták. Az intracelluláris lipiddkötő fehérjék feltekeredési folyamatait vizsgálva azonosítottak több, stabilitás szempontjából meghatározó kooperatív kölcsönhatást a humán epesav kötő fehérjében, mely munkából készült kézirat bírálólat alatt áll. Tanulmányozták az SH3 domének foszforilációjának és lipid-kölcsönhatásainak szerkezeti aspektusait és ezek szerepét a jelátvitelben. A BME és a Szegedi Tudományegyetem munkatársaival közösen módszert dolgoztak ki a kristályosság mértékének meghatározására a gyógyszeriparban is alkalmazott többrétegű pelletekben, melyet az International Journal of Pharmaceutics folyóiratban tettek közzé.

Kémiai Krisztallográfia Kutatócsoport

A kutatócsoport kutatói szerves vegyületek és komplexek konstitúciós és sztereokémiai jellemzésében nyújtanak elengedhetetlen segítséget. Kiterjedt magyar és nemzetközi együttműködéseiken keresztül számos szilárdfázisban vizsgálják a másodlagos kölcsönhatásokat, illetve az ezeket befolyásoló tényezőket. Továbbá szilárd fázisban lejátszódó kémiai átalakulásokat, átrendeződéseket is kutattak. ESR spektroszkópiával kiegészítve biológiailag aktív réz(II)-komplexeket tanulmányoztak.

Funkcionális Farmakológia Kutatócsoport

A kutatócsoport kutatói feltárták, hogy az asztrociták jelentős szerepet játszanak a neuronális oszcillációk kialakulásában mind fiziológias (lassú hullám oszcillációk), mind patofiziológias (epileptikus rohamok) körülmények között. Kalcium-szenzor fehérjét expresszáló transzgenikus patkányt alkalmazva *in vivo* kimutatták, hogy az asztrogli hálózatok a fenti állapotokban szinkronizált aktivitást mutatnak, sőt az asztrocita szinkronizáció gátlása csökkenti a neuronális szinkronizáció mértékét is. Igazolták a potenciálisan gyógyszercélpont részkapcsolat fehérjék szerepét ezen folyamatokban. Új inhibitor vegyületeket szintetizáltak és karakterizáltak az asztroglialis GABA transzporterek specifikus gátlására.

Igazolták, hogy a hepatocita-Kupffer sejt ko-kultúra alkalmasabb modell toxikus mellékhatások előrejelzésére, mint a hagyományos hepatocita mono-kultúra. Igazolták, hogy a Kupffer sejtek megnövelik a hepatociták Bsep és Ntcp transzporter expresszióját a sejtmembránon, és ezáltal növelik a sejtek epesó transzportját. A Solvo Biotechnológia Zrt-vel közös pályázatot nyertek ennek az *in vitro* modellnek a kidolgozására és validálására.

Kimutatták, hogy patkány májban a portális véna leköttése után a nem leköttött lebenyek képesek átvenni a leköttött lebenyek funkcióját.

Előállították az irodalomban eddig nem közölt fluoreszcens epesav származékot, az N-(24-[7-(4-nitro-2,1,3-benzoxadiazol)]amino-3 α ,7 α ,12 α -trihidrox-27-nor-5 β -kolesztán-26-ol)-2'-aminoetán-szulfonátot (tauro-THCA-24-NBD) organikus anion transzporter polipeptidek vizsgálatához.

b) Tudomány és társadalom

A Szerves Kémiai Intézet kutatói témavezetőként aktívan részt vettek a kutatóközpont által már sok éve megrendezésre kerülő AKI Kíváncsi Kémikus középiskolai tudománynépszerűsítő táborban.

A Kölcsey Ferenc Gimnázium, Szinyei Merse Pál Gimnázium és az ELTE Apáczai Csere János Gyakorló Gimnázium érdeklődő diákjai számára szerveztek intézet látogatást, amely során a középiskolások bepillanthattak a kutatói munka szépségeibe.

Az ELTE Eötvös Collegiumában tartottak tudománynépszerűsítő előadást.

Az intézetben folyó kutatásokkal kapcsolatos módszereket és eredményeket az együttműködő egyetemek hallgatói körében laboratóriumi gyakorlatokon népszerűsítették.

Az intézet munkatársai részt vesznek a középiskolai tehetséggondozásban a Középiskolai Kémiai Lapok, az Országos Közoktatási Tanulmányi Verseny, valamint a Nemzetközi Kémiai Diákolimpiai csapat felkészítésén keresztül.

A kutatóintézetben működik a Cambridge Krisztallográfiai Adatbázis Magyar Nemzeti Központja.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

Hazai kapcsolatok

A Gyógyszerkémiai Kutatócsoport a Richter Gedeon NyRt-vel együttműködésben Dopamin D2/D3 receptorokra ható vegyületek kutatását végzik. Az EGIS ZRt-vel közösen generikus hatóanyag laboratóriumi eljárás-fejlesztését végzik, míg a TEVA Pharmaceuticals-al generikus hatóanyagok szennyezésének azonosításában vesznek részt.

Az Organokatalízis Kutatócsoport a Servier Gyógyszerkémiai Kutatóintézet zRt-vel új (hetero)ciklusos vegyületeket hoztak létre, amelyek az együttműködő partner gyógyszerkémiai kutatásaiba illeszkedtek. A felmerült szintetikus kémiai kihívások megoldására új szerves kémiai módszereket, eljárásokat fejlesztettek ki, és kimutatták azok alkalmazhatóságát alapkutatói vizsgálataik során.

A Kémiai Biológia Lendület Kutatócsoport kutatói által fejlesztett jelzővegyületek és bioortogonális reagensek alkalmazhatóságát elméleti módszerek segítségével vizsgálja a BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszékével együttműködésben. Közös kutatásuk során elméleti kémiai számításokkal igazolták tetrazinok reakciókészségét, illetve meghatározták kettősen tompított fluoreszcenciájú bisz-azidok és peptidek konjugátumainak konformációját. A közös kutatás 2016-ban egy közös publikációt eredményezett.

Az Elméleti Kémiai Kutatócsoport együttműködésen keresztül segíti a Ximo AG-t olefin metatézis reakciókat elősegítő új Mo és W katalizátorok fejlesztésében és reaktivitásuk értelmezésében.

Az MS Proteomika Kutatócsoport a Richter Gedeon Nyrt. által fejlesztett és vizsgált terápiában alkalmazott fehérjék glikozilációs mintázatának meghatározásában vesz részt.

A Funkcionális Farmakológia Kutatócsoport a SOTE I. sz. Sebészeti Klinikájával együttműködve májregenerációs vizsgálatokat végez portális véna lekötés után patkány modellben. Kutásaik során megállapították, hogy a patkány máj 2/3 részének portális keringését lekötvén a nem leköttött 1/3 rész 14 nap alatt átveszi a teljes máj szerepét méretben és működésben egyaránt. Az epeszekréció mértéke ez idő alatt nem csökken, de az epe összetétele a transzporterek expressziója és aktivitása változik. A lekötés utáni 14. napra a leköttött lebenyek mérete és aktivitása jelentősen csökken.

Az MS Metabolomika Kutatócsoport a Richter Gedeon NyRt-vel VKSZ pályázat keretében fermentáció során keletkező metabolitok azonosítását és mennyiségi meghatározását végezték el. Így a korábban kifejlesztett módszert validálták, és eredményesen alkalmazták fermentációs folyamatok során keletkező metabolitok mennyiségi meghatározására.

Az NMR Kutatócsoport a TTK Enzimológia Intézet és a Pannon Egyetem Nanotechnológia Tanszékével együttműködve NMR spektroszkópiai és biofizikai módszerekkel tanulmányozták a Salmonella flagelláris transzportjában szerepet játszó fehérje kölcsönhatásokat. Ennek részeként egy a transzportfolyamatokban meghatározó szignál peptidről megállapították, hogy alfa-hélix konformáció iránti preferenciát mutat, és in vitro körülmények között membrán aktivitással rendelkezik. Egy másik munkában a FlIS flagelláris chaperon fehérjéről kimutatták, hogy kompakt maggal rendelkező, vélhetően atipikus molten globula szerű fehérje, melynek konformációs plaszticitása a chaperon funkció elengedhetetlen feltétele. A közös kutatásokból kettő közlemény készült.

A BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszékével és a Szegedi Tudományegyetem Gyógyszerkeletológiai Intézetével együtt kutatva többrétegű pelletekben (gyógyszeriparban is alkalmazott formula) vizsgálták a hatóanyag morfológiáját, és minta előkészítés nélkül is alkalmazható módszert dolgoztak ki a kristályosság mértékének meghatározására. Polimer gélekben és polimer oldatokban NMR spektroszkópiai módszerekkel jellemezték a hatóanyag leadás időprofilját meghatározó hatóanyag-polimer kölcsönhatások erősségét, és azonosították a kölcsönható funkciós csoportokat. Eredményeik kettő publikáció alapját képezték.

A Kémiai Krisztallográfia Kutatócsoport a BME Szeretlen és Analitikai Kémiai Tanszékével η^1 -szilolil-FeCp(CO)₂ komplexek szintézisét és kristályszerkezetének feltárását végezték szila-ferrocének előállításának céljából. A Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszékkel együttműködésben királis 1-ciklohexiletaminok rezolválását, termikus vizsgálatát és szerkezetigazolását valósították meg. Az ELTE Kémiai Intézetével együttműködésben kroméno-kinolonok moduláris réz katalizált szintézisét és szerkezeti analízisét végezték. A Pannon Egyetemmel együttműködve az NMR krisztallográfia fejlesztése céljából bis(glicinato) réz komplexek összehasonlító NMR és krisztallográfiai szerkezetelemzését valósították meg.

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

Nemzetközi kapcsolatok

A Gyógyszerkémiai Kutatócsoport a Lengyel Tudományos Akadémia Farmakológiai Intézetével (Institute of Pharmacology, Polish Academy of Sciences) együttműködésben 5HT₆ receptoron hatásos antagonistákat fedezett fel. A Ljubjanai Egyetem, Gyógyszerkémiai Tanszékével (Department of Pharmaceutical Chemistry, University of Ljubljana) közös kutatás során vendégkutatót fogadtak és cisztein proteázok kovalens gátlására alkalmas vegyületeket vizsgáltak. A kovalens fehérjemódosítókat vizsgáltak további nemzetközi

együttműködésben a University College London-nal, amely során antitest-gyógyszer konjugátumok előállítására alkalmas kovalens fehérjemódosításokat vizsgáltak. Továbbá a VIB Vrije Universitet Brussels kutatóival együtt rendezetlen fehérjék kovalens módosításra alkalmas vegyületeket tanulmányoztak. A kutatócsoport a nemzetközi kapcsolatainak tovább fejlesztéséhez 2016-során elnyert egy magyar-szlovén TÉT pályázatot a Department of Pharmaceutical Chemistry, University of Ljubljana, DAAO inhibitorok kutatására, valamint egy COST pályázat tagja, melynek címe CM1207 GLISTEN the European GPCR Network.

A Kémiai Biológia Lendület Kutatócsoport az ERA-Chemistry pályázat keretei között működik együtt a németországi Karlsruhe Institute of Technology-val, amely során a kutatócsoportban kifejlesztett bioortogonális reagenseket az együttműködő partner oligonukleotidokban teszteli. A magyar fél meghívott előadóként részt vett e KIT által szervezett előadás-sorozaton (Pforzheim) és a közös munkából egy közlemény készült. A Freiburgi Egyetem munkatársai a kifejlesztett fluoreszcens bioortogonális reagenseket az együttműködő partner mesterséges organellumok jelölésére használta fel, és eredményeiből egy közlemény született. A heidelbergi European Molecular Biology Laboratory-val való kooperációjuk során az együttműködő partner a magyar laboratóriumban előállított vegyületeket modellfehérjék genetikai módosítására használja fel, illetve vizsgálja a kifejlesztett jelző vegyületeket. Közös kutatásaikat kettő publikációban közölték.

Az Elméleti Kémiai Kutatócsoport az év során két vendégkutatót fogadott (Helsinki University, illetve Concordia University, Montreal) és ők bekapcsolódtak a náluk folyó kutatásokba.

A Szupramolekuláris Kémiai Lendület Kutatócsoport együttműködése a New York University Abu Dhabi-val (Egyesült Arab Emírségek) során az előállított új szupramolekuláris arany komplexek korszerű szerkezet- és anyagvizsgálata, valamint a szerkezet és tulajdonságok közötti összefüggések együttes feltárása valósult meg. Eredményeiket kettő közleményben írták le.

Az MS Proteomika Kutatócsoport az MTA és a CNR (Olasz Kutatási Tanács) bilaterális egyezménye által támogatva vesz részt a Mass Spectrometry and Proteomics Laboratory at Institute of Biosciences and Bioresources Napoli of National Research Council of Italy kutatócsoporttal a NutriC@rgo: Növényi nanovezikulák molekuláris jellemzése című projektben. A klementin gyümölcs levéből izolált vezikulumokat közvetlen oldatban történő tripszines emésztést követően vizsgálták. A triptikus peptidek nanoHPLC-MS analízise során 664 fehérjét sikerült legalább 2 peptiddel azonosítani, és 116 fehérje funkcionális annotációja volt ismert. A korábban az olasz partnernél SDS-PAGE gél-elektroforézist követően azonosított fehérjék a fő találatok között szerepeltek ezekben a mérésekben is. További céljuk az ismeretlen fehérjék manuális annotációja. Elért eredményeiket közös publikációban jelentették meg.

A Kémiai Krisztallográfia Kutatócsoport a Freiburgi Műszaki Egyetem (Bergakademie) Szerves Kémiai Intézetével sztérikus és elektrosztatikus kölcsönhatásokon keresztül intermolekuláris kölcsönhatások finomhangolását valósították meg. A Cape Peninsula Műszaki Egyetemmel együttműködésben a molekulák és molekula egységek szimmetria kontrollált átrendeződését tanulmányozzák kristályban. A dublini Institute of Technology, Tallaght-val együttműködésben bioaktív réz(II) komplexek összehasonlító vizsgálatát végzik szilárd fázisban egykristály röntgendiffrakciós és oldatban ESR mérésekkel.

A Funkcionális Farmakológia Kutatócsoport az MTA KOKI, a Femtonics Kft., a Semmelweis Egyetem, a Johannes Gutenberg University (Mainz) és az Australian National

University (Canberra) tudományos kutatásai megmutatták, hogy az asztrociták jelentős szerepet játszanak a neuronális oszcillációk kialakulásában mind fiziológias (lassú hullám oszcillációk), mind patofiziológias (epileptikus rohamok) körülmények között. Azonosították a réskapcsolat fehérjék szerepét ezen folyamatokban. Eredményeikből egy közlemény született. Az University Leuvennel ERA-Chemistry kutatási pályázaton keresztül fejlesztenek asztroglialis GABA transzporter altípus specifikus vegyületeket. A neuroprotektív Glu/GABA mechanizmus gyógyászati célú kiaknázásának céljából 33 új spirobicyclusos származékot, illetve prekuzort állítottak elő és vizsgáltak. A prekuzolok közül 4 altípus szelektívnek bizonyult. Kutatásaik eredményit két közleményben írták le.

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Pályázat: NKFIH-NVKP (16-1-2016-0037)

Pályázati téma: A rossz prognózisú gyermekkori szolid tumorokra predisponáló mutációk szűrése és biomarkerek azonosítása az egyénre szabott kezelésük optimalizálására

A pályázati támogatás mértéke: Összesen: 589 M Ft, 2016-ben: 0 Ft

Projekt kezdete: 2017.01.01.

Résztevő intézmények: Semmelweis Egyetem (vezető intézmény), Meditop Gyógyszeripari Kft.

Pályázat: NKFIH OTKA (PD 121070)

Pályázati téma: Új elméleti módszerek fejlesztése és alkalmazása (bio)katalitikus reakciók vizsgálatára

A pályázati támogatás mértéke: Összesen: 15 M Ft, 2016-ben: 0 Ft

Projekt kezdete: 2017.01.01.

Pályázat: NKFIH OTKA (K 119459)

Pályázati téma: Fehérjék glikozilációjának összehasonlító vizsgálata Rheumatoid Arthritisben

A pályázati támogatás mértéke: Összesen: 45,8 M Ft, 2016-ben: 0,8 M Ft

Projekt kezdete: 2016.12.01.

Résztevő intézmények: Semmelweis Egyetem Genetikai, Sejt és Immunbiológiai Intézete; Budai Irgalmasrendi Kórház II. Reumatológia; Eötvös Loránd Tudományegyetem, Immunológiai Tanszék; ELTE MTA Peptidkémiai Kutatócsoport; Bajcsy Zsilinszky Kórház

Pályázat: NKFIH OTKA (PD 121187)

Pályázati téma: Proszтата daganat biomarkerek tömegspektrometrián alapuló azonosítása szöveti mikroarray-ek vizsgálatán keresztül

A pályázati támogatás mértéke: Összesen: 15 M Ft, 2016-ben: 0,4 M Ft

Projekt kezdete: 2016.12.01.

Pályázat: GINOP-2.1.1-15

Pályázati téma: Membrán transzporter panel kialakítása és karakterizálása gyógyszerek toxicitásának, mellékhatásainak tesztelésére

A pályázati támogatás mértéke: Összesen: 94 M Ft,

Projekt kezdete: 2016.04.01

Résztevő intézmények: Solvo Biotechnológiai zRt. (vezető intézmény)

Eredmények 2016-ban: 3D humán és patkány hepatocita-Kupffer ko-kultúra modellt fejlesztettek ki, jellemeztek és validáltak gyógyszerek toxicitásának vizsgálatára.

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Keserű GM, Erlanson DA, Ferenczy GG, Hann MM, Murray CW, Pickett SD: Design Principles for Fragment Libraries: Maximizing the Value of Learnings from Pharma Fragment-Based Drug Discovery (FBDD) Programs for Use in Academia. *Journal of Medicinal Chemistry*, 59: 8189-8206 (2016) <http://real.mtak.hu/46271/>
2. Berkes B, Ozsváth K, Molnár L, Gáti T, Holczbauer T, Kardos G, et al. (1, Soós T): Expedient and Diastereodivergent Assembly of Terpenoid Decalin Subunits having Quaternary Stereocenters through Organocatalytic Robinson Annulation of Nazarov Reagent. *Chemistry-A European Journal*, 22: 18101-18106 (2016) <http://real.mtak.hu/46273/>
3. Demeter O, Fodor EA, Kállay M, Mező G, Németh K, Szabó PT, et al. (1, Kele P): A Double-Clicking Bis-Azide Fluorogenic Dye for Bioorthogonal Self-Labeling Peptide Tags. *Chemistry-A European Journal*, 22: 6382-6388 (2016) <http://real.mtak.hu/37518/>
4. Madarász Á, Dósa Zs, Varga Sz, Soós T, Csámpai A, Pápai I: Thiourea Derivatives as Bronsted Acid Organocatalysts. *ACS Catalysis*, 6: 4379-4387 (2016) <http://real.mtak.hu/38061/>
5. Rokob TA: Pathways for Arene Oxidation in Non-Heme Diiron Enzymes: Lessons from Computational Studies on Benzoyl Coenzyme A Epoxidase. *Journal of the American Chemical Society*, 138: 14623-14638 (2016) <http://real.mtak.hu/45629/>
6. Jobbágy Cs, Baranyai P, Marsi G, Rácz B, Li L, Naumov P, et al. (1, Deák A): Novel gold(I) diphosphine-based dimers with aurophilicity triggered multistimuli light-emitting properties. *Journal of Materials Chemistry C*, 4: 10253–10264 (2016) <http://real.mtak.hu/46016/>
7. Bazso FL, Ozohanics O, Schlosser G, Ludanyi K, Vekey K, Drahos L: Quantitative Comparison of Tandem Mass Spectra Obtained on Various Instruments. *Journal of the American Society for Mass Spectrometry* 27: 1357-1365 (2016) <http://real.mtak.hu/39802/>
8. Horváth G, Bencsura Á, Simon Á, Tochtrop GP, DeKoster GT, Covey DF, et al. (2, Tőke O): Structural determinants of ligand binding in the ternary complex of human ileal bile acid binding protein with glycocholate and glycochenodeoxycholate obtained from solution NMR. *FEBS Journal* 283:541-555 (2016) <http://real.mtak.hu/46468/>
9. Kirischuk S, Héja L, Kardos J, Billups B: Astrocyte sodium signaling and regulation of neurotransmission. *Glia*, 64:1655-1666 (2016) <http://real.mtak.hu/46011/>
10. Kardos J, Szabó Z, Héja L: Framing neuro-glia coupling in antiepileptic drug design. *Journal of Medicinal Chemistry*, 59:777-787 (2016) <http://real.mtak.hu/46012/>

**AZ MTA TERMÉSZETTUDOMÁNYI KUTATÓKÖZPONT FŐBB MUTATÓI ÉS
PÉNZÜGYI ADATAI 2016-BAN**

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatóhely neve: Természettudományi Kutatóközpont

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlagléttség ¹ :	456	Ebből kutató ² :	318
PhD, kandidátus:	167	MTA doktora: 28	Rendes tag és levelező tag: 6
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			6
35 év alatti, kutatócsoportban levő kutatók száma ⁴ :			146
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			416
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			410
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			15
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			16
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			352
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			344
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	1
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 6	idegen nyelven:	7
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ⁷ :	1433,161	Összes független hivatkozás száma (2015):	18045
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			20881
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD:	MTA doktora:	0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	2	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	1
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			211
		poszterek száma:	223
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	38	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	68
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			15
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			97
Témavezetések száma: TDK munka:	63	Diplomamunka (BSc):	134
Diplomamunka (MSc):	112	PhD:	173
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :	2904 359	E Ft	
Fiatal kutatói álláshelyen fogl. sz. ¹⁶ :	42	Teljes saját bevétel:	2470 178 E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:			E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			99
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	470 666	E Ft
Az év folyamán az egyéb NKFIH forrásból támogatott témák száma:			13
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	831 250	E Ft
Az év folyamán az összes uniós forrásból támogatott témák száma:			112
	A tárgyévre vonatkozó bevétel ¹⁷ :	619 050	E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			5
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	190 949	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :		358 263	E Ft

VI/A. A kutatóhely részletezett pénzügyi adatai 2016-ban

A kutatóhely neve: Természettudományi Kutatóközpont

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege:	2904 359	E Ft
Az időszak folyamán a teljes saját bevétel összege:	2470 178	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		E Ft
OTKA - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	470 666	E Ft
Egyéb NKFIH forrásból - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	831 250	E Ft
ÚMFT - a tárgyévre vonatkozó bevétel:		E Ft
Egyéb hazai pályázatok - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	471 309	E Ft
EU-s pályázatok - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	147 741	E Ft
Egyéb külföldi pályázatok - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	190 949	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozásoktól származó bevétel - kutatásra:	133 237	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozásoktól származó bevétel - egyéb:	88 679	E Ft
A tárgyévre vonatkozó egyéb kutatási bevétel:	136 144	E Ft
A tárgyévre vonatkozó egyéb nem kutatási bevétel:	203	E Ft

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatóhely neve: TTK központ vezetése alá tartozó csoportok

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	52	Ebből kutató ² :	25
PhD, kandidátus:	12	MTA doktora:	3
		Rendes tag és levelező tag:	1
A kutatócsoportokhoz kötődő akadémikusok száma ³ :			1
35 év alatti, kutatócsoporti állományban levő kutatók száma ⁴ :			11

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			11
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			11
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			8
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			8
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	0

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	26,619	Összes független hivatkozás száma (2015):	51
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			60

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN

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

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

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

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			31
		poszterek száma:	38
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	4	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	3
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			3

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			9
Témavezetések száma: TDK munka:	3	Diplomamunka (BSc):	27
Diplomamunka (MSc):	7	PhD:	18

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatóhely neve: TTK Anyag- és Környezetkémiai Intézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	121	Ebből kutató ² :	92
PhD, kandidátus:	56	MTA doktora:	8
		Rendes tag és levelező tag:	2
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			1
35 év alatti, kutatócsoporti állományban levő kutatók száma ⁴ :			31

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :	156		
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :	151		
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:	7		
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:	13		
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:	121		
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció	117		
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	2

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	418,209	Összes független hivatkozás száma (2015):	4970
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			5728

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD:	2	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 :	89		
	poszterek száma:	59	
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	10	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	22
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			1

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			30
Témavezetések száma: TDK munka:	30	Diplomamunka (BSc):	35
Diplomamunka (MSc):	36	PhD:	34

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatóhely neve: TTK Enzimológiai Intézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	150	Ebből kutató ² :	109
PhD, kandidátus:	55	MTA doktora:	6
		Rendes tag és levelező tag:	2
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			2
35 év alatti, kutatócsoporti állományban levő kutatók száma ⁴ :			51

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			122
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			121
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			115
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			111
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 2	idegen nyelven:	3

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	588,791	Összes független hivatkozás száma (2015):	3703
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			4396

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 5	MTA doktora:	0
---	--------	--------------	---

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 :			31
		poszterek száma:	48
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	8	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	19
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			6

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			22
Témavezetések száma: TDK munka:	8	Diplomamunka (BSc):	17
Diplomamunka (MSc):	20	PhD:	56

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatóhely neve: TTK Kognitív Idegtudományi és Pszichológiai Intézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	62	Ebből kutató ² :	42
PhD, kandidátus:	17	MTA doktora: 5	Rendes tag és levelező tag: 0
A kutatóhelyhez kötődő akadémikusok száma ³ :			1
35 év alatti, kutatóhelyi állományban levő kutatók száma ⁴ :			24

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			59
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			59
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			5
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			3
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			45
mindezekből recenzió, kritika magyarul: 0		idegen nyelven:	0
Megjelent könyv/monográfia, atlasz magyarul: 0		idegen nyelven:	0
könyvrész, könyvfejezet, térkép magyarul: 4		idegen nyelven:	1
Könyv szerkesztése ⁷ magyarul: 0		idegen nyelven:	0
Folyóirat, vagy sorozatszerkesztés magyarul: 2		idegen nyelven:	1

3. IDÉZETTSÉGI MUTATÓK (2015)

Összes hivatkozás száma ⁸ :	3618	Összes független hivatkozások száma:	3052
--	------	--------------------------------------	------

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 4	MTA doktora:	0
---	--------	--------------	---

5. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Tud. előadások száma nemzetközi rendezvényen ¹⁰ :	38	hazai:	44
Nyilvános esemény megrendezése:	6	kulturális rendezvények:	0
Tanácsadói tevékenységek száma ¹¹ :			1
Nemzetközi tudományos bizottsági tagság:	6	hazai:	18
Nemzetközi folyóirat szerkesztőségi tagság:	12	hazai:	3

6. A HAZAI FELSOROKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹² :			22
Témavezetések száma: TDK munka: 6		Diplomamunka (BSc):	36
Diplomamunka (MSc): 33		PhD:	31

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatóhely neve: TTK Szerves Kémiai Intézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	71	Ebből kutató ² :	50
PhD, kandidátus:	27	MTA doktora:	6
		Rendes tag és levelező tag:	0
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			1
35 év alatti, kutatócsoporti állományban levő kutatók száma ⁴ :			28

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			87
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			87
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			3
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			82
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			77
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	1
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	1

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	308,975	Összes független hivatkozás száma (2015):	2515
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			2985

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 5	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 :			22
		poszterek száma:	36
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	10	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	12
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			4

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			14
Témavezetések száma: TDK munka:	16	Diplomamunka (BSc):	19
Diplomamunka (MSc):	16	PhD:	34