

Beszámoló a 2009. évi tudományos tevékenységről



TARTALOM

KÉMIAI KUTATÓKÖZPONT	5
Anyag- és Környezatkémiai Intézet	11
Biomolekuláris Kémiai Intézet.....	29
Nanokémiai és Katalízis Intézet	43
Szerkezeti Kémiai Intézet	59

KÉMIAI KUTATÓKÖZPONT

1025 Budapest, Pusztaszeri út 59-67, 1525 Budapest, Pf. 17.
Telefon: 438-1111, Fax: 438-1143
e-mail: palg@chemres.hu, honlap: <http://www.chemres.hu>

Anyag- és Környezetkémiai Intézet

1025 Budapest, Pusztaszeri út 59/67.
(1525 Budapest, Pf. 17.)
Tel.: 438-1130, Fax.: 438-1147
e-mail: szepvol@chemres.hu

Biomolekuláris Kémiai Intézet

1025 Budapest Pusztaszeri út 59/67.
(1525 Budapest, Pf. 17.)
Tel.:438-1110, Fax: 438-1145
e-mail: ghajos@chemres.hu

Nanokémiai és Katalízis Intézet

1025 Budapest Pusztaszeri út 59/67.
(1525 Budapest, Pf. 17.)
Tel.: 438-1132, Fax: 438-1164
e-mail: valyon@chemres.hu

Szerkezeti Kémiai Intézet

1025 Budapest Pusztaszeri út 59/67.
(1525 Budapest, Pf. 17.)
Tel.: 438-1120, Fax: 438-1143
e-mail: kubinyi@chemres.hu

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

A kutatóközpont alapvető közfeladatai a következők voltak 2009-ben:

- a kémia és a vele rokon szaktudományok fontos területein olyan alapvető és nemzetközi színvonalú tudományos kutatások folytatása, amelyek a kutatók összehangolt tevékenységét, valamint korszerű nagyműszerek koordinált alkalmazását igénylik;
- kutatási infrastruktúra üzemeltetése;
- részvétel a graduális és posztgraduális szakemberképzésben;
- alap- és alkalmazott kutatásokhoz szükséges módszerek és eszközök fejlesztése;
- a tudományos eredmények hasznosításának kezdeményezése és elősegítése;
- hazai és nemzetközi tudományos rendezvények szervezése;
- részvétel a nemzetközi tudományos életben és a tudományos szervezetekben.

A központ tevékenységében lényeges szerepük van a hazai, ill. az európai iparvállalatokat segítő, a versenyképesség fokozását, korszerű termékek és eljárások kidolgozását szolgáló kutatási programoknak. Ebből a szempontból kiemelkedő jelentősége volt a „Kémia az életminőség javításáért, Kémiai Kooperációs Kutatási Központ tevékenységének megerősítése, a technológiai folyamatok elősegítése” c. (Új Magyarország Fejlesztési Terv, Közép-Magyarországi Operatív Program) pályázat feladatai 2009. évi teljesítésének. Az említett projekten kívül több más, az NKTH-által támogatott témában is részt vettek a Központ kutatói 2009-ben. Ezeknek a programoknak az eredményei, reményeink szerint, hozzájárulnak az ország gazdasági stabilizációjához, valamint az akadémiai-egyetemi kutatóhelyeknek a vállalati kutatási-fejlesztési programokba való bevonásához. A kitűzött célok elérését jelentős mértékben segítette az EU-FP-7 kutatási programjaiban való aktív részvétel is.

Az MTA Kémiai Kutatóközpont 2009. évi tudományos kutatásait a potenciálisan *funkcionális anyagok kémiai kutatása*, előállításuknak, szerkezetüknek és tulajdonságaiknak vizsgálata foglalta egységes keretbe.

A kutatási tevékenység fő irányai 2009-ben a következők voltak.

Anyag- és Környezetkémiai Intézet

- Nemzetközi színvonalú tudományos kutatások folytatása az anyagtudományi és környezeti kémiai kutatások területén, amelyek elsősorban környezetkímélő előállítási technológiák kifejlesztésére, nanorétegek, különleges kerámia bevonatok, fémkomplexek, funkciós polimerek és polimer kotérhálók előállítására, továbbá vizsgálatára, valamint a biomassa hasznosítására, légkörkémiai kutatásokra és a műanyagok újrahasznosítására terjednek ki.

Biomolekuláris Kémiai Intézet

- Nemzetközi színvonalú tudományos kutatások folytatása a biomolekuláris kémia területén, amelyek magukban foglalják különböző, gyógyszerkémiai vagy finomkémiai szempontból fontos szintézismódszerek kidolgozását, különös hangsúllyal az eredeti heterociklusos szerves vegyületek és szénhidrátok előállítására; ismert és nem ismert célmolekulák alapvető biokémiai, fiziológiai szerepének vizsgálatát; új diagnosztikai lehetőségek feltárását.

Nanokémiai és Katalízis Intézet

- Nemzetközi színvonalú tudományos kutatások folytatása a nanokémia és a katalízistudomány területén, amelyek magukban foglalják nanoszerkezetű anyagok szintézisét és tanulmányozását, önszerveződő nanorétegek vizsgálatát, felületek jellemzését és módosítását, valamint heterogén katalizátorok és katalitikus reakciók kutatását, továbbá alternatív energiaforrások kutatását.

Szerkezeti Kémiai Intézet

- Nemzetközi színvonalú tudományos kutatások folytatása a szerkezeti biológia és kémia területén, különös tekintettel a szupramolekuláris kémiai (önszerveződő) rendszerek tanulmányozására, nagyműszeres szerkezetvizsgálatokra a gyógyszerkutatások támogatásának érdekében, orvosi analitikai kémiai témákra, valamint funkcionális vegyületek (polimerek, fluoreszcens próbák, fotokrom vegyületek) vizsgálatára.

A 2009. évi munkáról szóló beszámoló részletei az egyes intézetek anyagában olvasható.

Az MTA Kémiai Kutatóközpont 2009. évi tudományos teljesítményének néhány mutatója

Átlagléttség:	340	Ebből kutató:	202
PHD v. kand.:	79	MTA doktora:	39
MTA levelező tag:	0	MTA rendes tag:	1
<i>Az intézetekhez kötődő akadémikusok száma:</i>	10		
35 év alatti, intézeti állományban levő kutatók száma:	85		

Publikációk

Az év folyamán megjelent összes (tudományos és ismeretterjesztő) publikációk száma:	273
Az év folyamán megjelent tudományos publikációk száma:	259

Tanulmány, cikk

impakt faktoros publikáció magyarul:	0	~ idegen nyelven:	183
nem impakt faktoros tudományos cikk magyarul:	7	~ idegen nyelven:	27
hazai tudományos folyóiratban magyarul:	7	~ idegen nyelven:	7
külföldi folyóiratban magyarul:	0	~ idegen nyelven:	203
nemzetközi együttműködés keretében:	142		
SCI által regisztrált folyóiratban:	148		
összesített impakt faktor:	479.506		
összes hivatkozás száma:	4672	összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:	3832

Könyv

könyv/monográfia magyarul:	0	~ idegen nyelven:	0
könyvfejezet (kevesebb mint 20 old.) magyarul:	15	~ idegen nyelven:	19
könyvfejezet (több mint 20 old.)magyarul:	1	~ idegen nyelven:	0
könyvfejezet magyarul:	16	~ idegen nyelven:	19
lexikoncikk: 2 ívig:	1		
tanulmánykötet szerkesztése magyarul:	2	~ idegen nyelven:	4
Tudományos ismeretterjesztő írás magyarul:	14	~ idegen nyelven:	0

Tudományos fokozat, ill. cím megszerzése (2007-2009. évi átlag):

PhD:	13.666	MTA doktora cím:	1.333
MTA levelező tag:	0	MTA rendes tag:	0

Szellemi alkotások védelme:

Nemzeti úton megadott oltalmak száma:	0
Megadott külföldi oltalmak száma:	1
Értékesített szabadalmak száma:	0
Szerzői jogvédelem alá tartozó alkotások száma:	0

Részvétel a tudományos és kulturális életben:**Rendezvények:**

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma:	99	~posztterek száma:	137
Hazai rendezvényen tartott tudományos előadások száma:	129	~posztterek száma:	17
ismeretterjesztő előadások száma:	9		
Tudományos rendezvények szervezése hazai:	8	nemzetközi:	13
Jelentős nyilvános kulturális esemény megrendezése:	1		

Szakértői tevékenység:

tanácsadói tevékenységek száma:	0		
egyéni szaklektori vélemény összesen:	339	ebből külföldre:	315
opponensi vélemény összesen:	103	ebből külföldre:	52
egyéb szakértői vélemény:	56	ebből külföldre:	9

Részvétel tudományos testületben

Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	32	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	27
Nemzetközi tud. bizottsági elnökség:	4	Hazai folyóirat szerk. tagság:	3
Hazai tud. bizottsági elnökség:	24	Hazai tud. bizottsági tagság:	112

Felsőoktatásban végzett tevékenység:

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma:	62		
Ebből doktori iskolákban oktatók száma:	7	Doktori iskolát vezetőik száma:	0
Elméleti kurzusok száma:	56	Gyakorlati kurzusok száma:	50
TDK-t készítő hallgatók száma:	12		
Diplomamunkát készítő hallgatók száma (BSc):	15		
Diplomamunkát készítő hallgatók száma (MSc):	19		
PHD-t készítő hallgatók száma:	72		
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma:	3846		

Az MTA Kémiai Kutatóközpont 2009. évi tevékenységének egyéb bemutatható jellemzői

- Bejelentett szabadalmak és egyéb szabadalmi jellegű alkotások száma: 7
 - a Magyarországon bejelentettek: 5
 - a nem Magyarországon bejelentettek: 2
- A kutatónők száma: 69
 - vezető beosztásokban: 9
 - nem vezető beosztásokban: 60
- A mobilitással kapcsolatban az intézetből az állásukat megtartott, munkaviszonyban levő diplomások közül hat hónapnál hosszabb időre távollevők száma: 8
 - Magyarországon: 0
 - egyetemen, kutatóintézetekben: 0
 - gazdasági társaságnál: 0
 - Nem Magyarországon: 8
 - egyetemen, kutatóintézetekben: 8
 - gazdasági társaságnál: 0
- az adott intézethez érkező kutatók száma: 18
 - 1-6 hónap időtartamra: 14
 - Magyarországról: 0
 - nem Magyarországról: 14
 - 6 hónapnál hosszabb időre: 4
 - Magyarországról: 3
 - nem Magyarországról: 1
- Vállalati kapcsolatok
 - jelentősebb ipari partnerek (a kapcsolat típusa: közös K+F és kutatási megbízás):
BASF AG; British American Tobacco Ltd.; Süd Chemie AG (Németország);
Industrial Technology Research Institute (Tajvan); Momentive Perform. Mater.
GmbH;

Cyclolab Kft.; EGIS Nyrt.; EPCOS Kft.; GE Hungary Ltd.; Glycom A/S;
Graboplast Padlógyártó Zrt.; Inotal Zrt.; JOSAB Magyarország Kft.; Kontakt-
Elektro Kft.; MOL Nyrt.; MULTIPROJEKT Kft.; Bogdánypetrol,
Nyírbogdány; Országos Villamostávvezeték Zrt.; Richter Gedeon NyRt.;
Servier Nyrt.; Terra Humana Kft.; Teva Zrt.; TVK Nyrt.; UWATECH Kft.
 - az intézet holdudvarába tartozó kisvállalkozások száma: 42
- A társadalmi párbeszéd eredményei:
 - Az általános tudománynépszerűsítő közlemények száma 11
 - Az intézet tevékenységét népszerűsítő rendezvények száma 4

I. Az intézet fő feladatai a beszámolási évben

Az intézetben 2009-ben művelt témák az anyagtudományi és környezeti kémiai kutatások közé sorolhatók, de ez az osztályozás nem szigorúan értendő az egyes kutatási projektekre. Az anyagtudományi témák szinte mindegyikénél érvényesülnek közvetlenül vagy közvetve környezetvédelmi szempontok, mint például: környezetkímélő előállítási technológiák kifejlesztése, alkalmazása; szerkezeti anyagok élettartamának növelését célzó kutatások; biológiailag lebomló komponensek alkalmazása. Hasonlóképpen az elsődlegesen környezetkémiai témák művelése sok esetben nem fejeződik be a kárenyhítésnél, hanem kiterjed arra is, hogy a hulladékokat hasznos alapanyaggá lehessen átalakítani.

Tevékenységük jellemzője, hogy a tudományos kérdésekre komplex módon, többféle módszer alkalmazásával, a gyakorlati vonatkozásokat is figyelembe véve keresik a válaszokat.

II. Az év folyamán elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények, azok gazdasági-társadalmi haszna

Különleges kerámia bevonatok előállítása

Radarsugárzást magas hőmérsékletű környezetben is elnyelő, újszerű, nanoszerkezetű kerámia bevonatokat állítottak elő atmoszférikus plazmaszórással. A munka során egyrészt kifejlesztettek olyan mátrix anyagokat, amelyek a radarsugárzást nem verik vissza, másrészt olyan adalékanyagok (BN/MWNT nanokompozitok, SiC nanoszálak, ferrit nanoporok) előállítását kísérelték ki, amelyek a radarsugárzás energiáját hő/elektromos/mágneses veszteség formájában nyelik el. Eljárást dolgoztak ki nem olvadó (nitrid, karbid, borid) kerámia porok plazmaszórására, és optimalták a plazmaszórás paramétereit. Az intézetben kifejlesztett különleges kerámia bevonatokat Svédországban, repülőgép sugárhajtóműbe építve tesztelték, és ezek a tesztek megfelelő eredményt hoztak. A biztató eredményeknek köszönhetően a projekt várhatóan folytatódik 2010-ben is. Résztvevő vállalkozások: Volvo Aero, Saab. Az, hogy magyar kutatóhelyek aktív részt vállaltak egy demonstrációs célú sugárhajtómű-konstrukció kialakításában, gazdasági előnyökkel is járhat a projekt finanszírozásában részt vevő hazai szervezeteknél.

Nanorétegek előállítása és vizsgálata

Plazma-alapú ionimplantációval kezeltek nitrogénben poliamid (PA) és polikarbonát (PC) felületet. PA esetében imin, protonált amin és uretán-szerű kötések képződtek, míg PC esetében imin, terciér amin és amid-szerű csoportok alakultak ki a felületen. A hidrofilitulajdonságok megnöttek, a felületi elektromos ellenállás pedig több nagyságrenddel csökkent mindkét anyagnál. A kopási térfogat PA-nál az eredetinek 11 %-ára, és PC-nél 59 %-ára csökkent. A kopásállóság főleg az iongyorsító feszültség és a felületegységre eső

részecske-dózis növelésekor javult. PA esetében a beépülő N-tartalom kismértékű növekedése javította, további növekedése azonban rontotta a kopásállóságot. PC esetében a kopásállóság nem a teljes N-tartalom növelésével, hanem a térhálósodást kiváltó, hármaskoordinációjú, tercier amin típusú N-atomok koncentrációjának növelésével növekedett, elsősorban a felületegységre eső részecske-dózis és dózisteljesítmény emelésekor.

Cr-, Si- és Cr+Si-tartalmú szénrétegeket választottak le Si hordozóra kettős magnetronporlasztással. XPS és XAES vizsgálatokkal a rétegekben döntően C-Si és C-Cr kötéseket, illetve - nagy króm-tartalom esetén - Cr-szilicidet azonosítottak. Nanomechanikai vizsgálatok tanúsága szerint a háromkomponensű filmek keménysége $H=13-16$ GPa, redukált modulusa pedig $E=120-140$ GPa között volt. A kétkomponensű, Cr-tartalmú szénfilmek hasonló értékei jóval nagyobbak bizonyultak ($H\approx 22$ GPa, $E\approx 170$ GPa).

Fémkomplexek előállítása és vizsgálata

A vashiányos anémia a világon mindenhol probléma és hatásos kezelése kiemelt feladat. Amint az állatkísérletekben és humán vizsgálatokkal már bizonyítást nyert, a vas-poligalakturonátból a vas könnyen felszívódik, és a szervezetben jól hasznosul. A vegyület hatásossága sok tényezőtől függ, ilyen például a dózis, a vas oxidációs állapota és koordinációja. Ezért ^{57}Fe Mössbauer spektroszkópiával megvizsgálták a vas-poligalakturonát vaskoncentrációjának hatását a vas oxidációs állapotára és mikrokozonyzetére. A Mössbauer spektrumokon három jellegzetesen megkülönböztethető kvadrupólus felhasadás látható, melyből kettő a vas(II) és egy a vas(III) mikrokozonyzetéhez kapcsolható. A három jellegzetes szerkezeti komponens előfordulása telítési tendenciát mutat a vaskoncentráció növekedésével. Az alkalmazott koncentráció-tartományban a vas(III) előfordulása nőtt a vaskoncentrációval. Az eredmények alapján látható volt, hogy a vas-poligalakturonátban előforduló háromféle vas species a komplexben kötött vas különböző mikrokozonyzetéhez tartozik.

Nanoszerkezetű amfifil polimer kotérhálók

Tovább folytatták a poli(N,N-dimetil-akrilamid)-l-poliizobutilén amfifil kotérhálókval kapcsolatos kutatásaikat. Fémezüst bevitelével a kapott nanohibrid anyagok katalizátorként használhatók szerves kémiai reakcióban. Létrehoztak TiO_2 tartalmú nanohibrid anyagokat is. Különböző oldalhosszúságú poli(etilén-oxid)-metakrilátok és akrilátok, valamint módosított láncvégű, telekelikus poliizobutilén makroiniciátor felhasználásával jól definiált szerkezetű amfifil blokk-kopolimereket állítottak elő. Ezek a blokk-kopolimerek és kotérhálók, mivel összetevőik biokompatibilisnek bizonyultak, gyógyászati alapanyagként is alkalmazhatók lesznek a jövőben. Vizsgálatokat végeztek nanoméretű réz előállítására kotérhálókban, illetve azok Ullmann-reakcióban megmutatózó katalitikus aktivitására. Előállítottak kettős intelligenciájú amfifil kotérhálókat, melyek a pH mellett a hőmérsékletre is érzékenyek. Az amfifil kotérhálók egy új csoportjaként hőre érzékeny, poli(N,N-dietil-akrilamid)-ot és poli(dimetil-sziloxán)-t, illetve poliizobutilént tartalmazó kotérhálókat szintetizáltak. Az ilyen anyagoknak széles körű speciális alkalmazási lehetőségei vannak a gyógyásztól, a biotechnológiától a szenzorokig bezárólag. Politetrahidrofurán makromonomerek felhasználásával poli(N-vinil-imidazol)-l-politetrahidrofurán kotérháló sorozatot állítottak elő. A kotérhálók fémionokkal komplexeket képző rendszereiben a különböző fém nanorészecskék antibakteriális hatásait különböző felszaporított tiszta baktérium törzseken bizonyították.

Új típusú polimerek kvázielő gyökös polimerizációval

A közelmúltban olyan komplex szerkezetű polimereket állítottak elő gazdaságosan és környezetileg előnyösen kvázielő gyökös polimerizációs eljárásokkal, amelyek felülmúlják számos eddig használt polimer fizikai és kémiai tulajdonságait. Új szintézis módszert dolgoztak ki hiperelágazásos polimerek előállítására. Ezzel nemcsak a laboratóriumban előállított speciális szerkezetű, hanem kereskedelmi forgalomban kapható monomerek (sztirol és akrilátok) felhasználásával is egy lépésben előállíthatók nagyszámú funkciós csoporttal rendelkező hiperelágazásos polimerek. Az e téren szerzett új ismereteket fogászati alkalmazásokban és ipari együttműködésekben is megpróbálják kamatoztatni.

Jól definiált szerkezetű poli(etilén-oxid) és poliizobutilén blokkokból álló új típusú ABA triblokk-kopolimert szintetizáltak. Ez biokompatibilitása révén nagy jelentőségű lehet például gyógyászati felhasználásoknál.

Különböző tulajdonságú monomerek kvázielő gyökös polimerizációját is sikeresen megvalósították egy környezetbarátnak tartott, halogénmentes oldószerben.

Az előállított új szerkezetű polimereket minden esetben modern analitikai módszerekkel, mint pl. fényszóródás, törésmutató és viszkozitás detektorokkal felszerelt multidetektoros géppermeációs kromatográfiával és NMR spektroszkópiával elemezték és jellemezték.

Funkciós polimerek kationos polimerizáció alkalmazásával

Tovább tanulmányozták a karbokationos polimerizáció során alkalmazható környezetileg előnyös körülményeket. A lineáris polimerek mellett különleges szerkezetű és tulajdonságú hiperelágazásos polimereket is előállítottak környezetbarát oldószerben, szobahőmérsékleten. Megvizsgálták a szükséges minimális katalizátormennyiséget két gyakran használt átmenetifém katalizátor esetében is (TiCl_4 , SnCl_4). A körülmények optimalizálása mellett a leírt esetekben a reakciók kinetikáját is nyomon követték.

Kísérleteket végeztek az általuk kidolgozott eljárással előállított karboxil funkciós poliizobutilének alkalmazásának lehetőségeire. Megállapították, hogy a víz és hexán nem elegendő oldószerpár esetében ezen polimer felületaktív tulajdonságai így felhasználhatók például motorolajadalekokban. A poliizobutilén karboxil funkciós csoportok reakcióival igazolták, hogy további módosításokkal anyagtudományi kutatásokban felhasználható makromonomerek előállítása is megvalósítható.

Poliolefinek szerkezet-tulajdonság összefüggéseinek feltárása és módosítása

Folytatták a különböző katalizátorokkal gyártott poliolefinek (polietilén és polipropilén) szerkezetét befolyásoló tényezők tanulmányozását feldolgozási és alkalmazási körülmények között. Tanulmányozták a polimerizációs körülmények (katalizátor típusa, gyártási paraméterek) hatását a polietilén és a polipropilén jellemzőire. Összefüggést állapítottak meg a polimer por jellemzői és a feldolgozás során végbemenő kémiai folyamatok között. Megállapították, hogy a polipropilén szerkezete és tulajdonságai erősen függenek a külső donor típusától. Meghatározták a fenolos és foszfortartalmú antioxidánsok szerepét és hatásmechanizmusát a polietilén feldolgozási stabilizálásában. Megállapították, hogy a polietilén feldolgozása során lejátszódó kémiai lebomlások elsősorban a foszfortartalmú antioxidáns hatékonyságától függenek, amit a stabilizátor kémiai szerkezete és termikus stabilitása jelentősen befolyásol. Elemezték a savmegkötő hatású adalekok szerepét a stabilizátorok hatékonyságában és fogyásában a polietilén feldolgozása során. Folytatták a polietilén csövek hidrolitikus stabilitásának vizsgálatát. A különböző kísérletek eredményei

egyértelműen azt bizonyították, hogy az adalékok hatását nagymértékben meghatározza a teljes adalékcsoport összetétele mind a polietilénben, mind pedig a polipropilénben. A kutatást a TVK-val, a poliolefin gyártójával együttműködésben végezték. A kutatás eredményei közvetlenül hasznosulnak a különböző poliolefin adalékrendszerének kidolgozásában, ezzel javítják a TVK versenyképességét.

Természetes és szintetikus polimerek és társított rendszereik

Tovább folytatták különböző polimerek és társított rendszereik szerkezet-tulajdonság összefüggéseinek és a terhelés hatására végbemenő deformációs folyamatainak tanulmányozását. Különböző szemcseméretű töltőanyagot tartalmazó PP/falaszt kompozitok deformációs és tönkremeneteli mechanizmusát vizsgálták. Megállapították, hogy a tulajdonságokat elsősorban az erősítőanyag szemcseszerkezete befolyásolja. A termék tönkremenetelét több mikromechanikai folyamat iniciálhatja. Terhelés hatására bekövetkezhet a szálak kereszt- és hosszirányú törése is, ezért a szálak saját szilárdsága a kompozit tulajdonságok javításának egyik fontos tényezője. Jelentős haladást értek el a delaminációval előállított rétegszilikát nanokompozitok tanulmányozásában. A korábban kidolgozott módszereket rutinszerűen alkalmazzák a szerkezet jellemzésére. Egy kísérlet sorozat segítségével meghatározták a kompozitokban kialakuló határfázis vastagságát és tulajdonságait. A szilikát lemezek, valamint a lemezek és a polimer közötti kölcsönhatásokat további adalékokkal módosították. További kísérleteket végeztek a természetes polimerek és a gyógyászatban alkalmazott poliuretánok szerkezetének felderítésében. Különböző módszerek segítségével megállapították a heterogén szerkezet felépítését és a tulajdonságokat döntően meghatározó tényezőket. Egyre jobban előtérbe kerül a biológiailag lebontható polimerek és társított rendszereik kutatása is. A kutatások jelentős része hazai vagy nemzetközi együttműködéshez, illetve pályázathoz kapcsolódik.

Biomassza anyagok hasznosítását megalapozó kutatások

A második generációs bioetanol előállítására alkalmas cellulóz tartalmú biomassza anyagok előkezelésének hatását tanulmányozták termikus módszerekkel. Megállapították, hogy a gőzrobbantás és a lúgos kezelés nemcsak a rostokat roncsolja szét, hanem megváltoztatja a lignocellulózok kémiai összetételét is. Összefüggést mutattak ki a lignin funkcionális csoportjainak mennyisége és a polietilén-glikol enzim hidrolízisre gyakorolt hatékonysága között gőzrobbantott biomassza mintáknál. Fentiekén kívül még a nyomás és hevítés kombinációjával előkezelt biomassza mintákból történő aktív szén-előállítás folyamatairól is új ismereteket nyertek. Új típusú, az eddigieknél pontosabb modellt dolgoztak ki a szilárd, növényi eredetű anyagok égésének két kémiai részfolyamatára. A modell az oxigén jelenlétében a hőbomlás összesített tömegveszteségét és az eközben képződő szén maradék kiégését írja le egyidejűleg.

Légkörkémiiai kutatások

Meghatározták a propionil-aldehid OH-gyökkel végbemenő elemi reakciójának sebességi együtthatóját. A reakcióban propionilgyök, C_2H_5CO , keletkezik, ami a légkörben O_2 -molekulával reagál tovább. A csoport kutatói gyorsáramlásos kinetikai kísérletekkel igazolták, hogy kis nyomásokon a $C_2H_5CO + O_2$ reakcióban nagy elágazási aránnyal OH-gyök keletkezik, az elágazási arány azonban rohamosan csökken a nyomás növelésével.

Benzofenon származékok fotoredukciós folyamatainak vizsgálata alapján megállapították, hogy ezen alapvető jelentőségű folyamatok kinetikája termodinamikailag szabályozott.

Stacionárius, valamint mikro-, nano-, pico- és femtoszekundum időfelbontású kinetikai mérésekkel igazolták, hogy az N-fenil-pirrol típusú molekulák fotofizikájának leírásakor az általánosan elfogadott nagy amplitúdójú szerkezeti relaxációt (TICT) feltételező mechanizmus alapvetően hibás. Ezt bizonyítja az is, hogy fluorazin molekula esetében, ahol TICT jellegű relaxáció nem játszódhat le, nagyon hasonló fotofizikai tulajdonságokat tapasztaltak.

Környezeti elektrokémia

A már szobahőmérsékleten is folyékony szerves sóknak, az ún. ionos folyadékoknak nagy jövőt ígérnek a modern, környezetbarát elektrokémiai technológiákban. Az ezek kidolgozásához szükséges alapadatok jelenleg hiányosak, ezért ilyenek meghatározására alap-elektrokémiai méréseket végeztek Au(111) egykristály elektródon 1-butil-3-metil-imodazólium hexafluorofoszfát (BMImPF₆) elektrolitban. Voltammetriás és elektrokémiai impedancia mérésekkel meghatározták a rendszer töltésmentes potenciálját. Megállapították továbbá, hogy az ilyen rendszerek határréteg-dinamikáját értelmező jelenlegi elméletek nem írják le a ténylegesen mérhető hatásokat.

Az MTA Atomenergia Kutatóintézet magas hőmérsékletű elektrokémiai rendszeréhez használható speciális sokelektrodos potenciosztátot, továbbá három különböző, femtoamperes felbontású bipotenciosztátot fejlesztettek ki. Az utóbbiakat osztrák ill. svájci laboratóriumokban használt pásztázó elektrokémiai mikroszkóphoz ill. elektrokémiai atomerőmikroszkóphoz illesztették.

Műanyagok környezetbarát újrahasznosítását megalapozó kutatások

Polimerek környezetileg előnyös lebontása és átalakítása témában tovább tanulmányozták a PVC termikus valamint termooxidatív lebontását. Előbbit egyes funkciós csoportokat tartalmazó vegyületek jelenlétében végezték. Úgy találták, hogy ez az eljárás alkalmas lehet reaktív kettős kötéseket tartalmazó, erősen elszíneződött PVC-ben a kettős kötések telítésére, ezáltal új szerkezetű, módosított PVC előállítására. A termooxidatív lebontással elődegradált PVC-t elegyítették biológiailag lebomló politejsavval, így egy biológiailag részlegesen lebomló polimer keveréket tudtak előállítani.

Nitrogéntartalmú műanyag pirolízisolvajának átalakítására alkalmazott Y típusú zeolitok aktivitás csökkenését és regenerálhatóságát tanulmányozták. Az eredeti zeolittal gyakorlatilag azonos aktivitású regenerált zeolitot sikerült nyerniük a lecsökkent aktivitású katalizátorból levegőáramban hevítéssel. XRD vizsgálatok igazolták, hogy az Y zeolitok kristályszerkezete nem károsult számottevően a regenerálás következtében. A katalitikus aktivitás elvesztését okozó szénlerakódás minőségét és mennyiségét oxidatív atmoszférában végzett termogravimetriás-tömegspektrometriás (TG-MS) méréssel vizsgálták. Megállapították, hogy a HUSY zeoliton lerakódott szén oxidációja nagyobb hőmérsékleten, és nagyobb sebességgel játszódik le, mint a NaY zeoliton. Ez arra utal, hogy a katalizátoron lerakódott szenes bevonat eltérő minőségű a két különböző kationt tartalmazó zeoliton.

Folyamatos üzemű berendezés poliklórozott aromás vegyületek dehalogénezésére

Olyan dehalogénező üzem létrehozásán dolgoznak, mely alkalmas poliklórozott aromás hulladékok, köztük a poliklórozott bifenilek környezetvédelmi szempontból biztonságos ártalmatlanítására. Az üzem méretét és kapacitását (a hulladék klórtartalmától függően 150-500 t/év) úgy tervezték, hogy az közúton vagy vasúton is szállítható legyen. A technológia fő

lépései a szerves anyag dehalogénezése és a klórmentes termék fűtőértékének hasznosítása. Az új technológia olcsó és könnyen hozzáférhető mészkövet használ dehalogénező reagensként és egyben a lehasított klór rögzítésére. Mészkőzuzalékkal megtöltött folyamatos csőreaktorban vizsgálták a dehalogénezési, klórmegkötő és a szerves szennyezők oxidációját eredményező reakciókat. A projekt keretében kinetikai és termodinamikai számításokat végeztek a tervezett technológia optimális működési paramétereinek meghatározására. Optimalizált körülmények mellett mind a dehalogénezés, mind pedig a klórmegkötés közel 100%-os hatásfokkal lejátszódott a hulladék teljes mineralizációját eredményezve. A képződő CaCl_2 -t elválasztás és tisztítás után az ipar különböző területein kívánják értékesíteni. A kifejlesztett eljárás hasznosításában hazai kisvállalkozások vesznek részt.

Talajok olajszennyezésének felkutatása és kárenyhítés

Geoelektromos módszeren alapuló laboratóriumi kísérleteket folytattak talajellenállás feltérképezésén alapuló technológia kidolgozására, melynek célja a talajban lévő olajszennyezések felkutatása. Részletesen vizsgálták, hogy miképpen hatnak a különböző talaj- és szennyezéstípusok a szennyezett talaj mérhető ellenállására. Elemezték, hogy miképpen lehet az olajszennyezések és a rétegvizek migrációját megakadályozni, és a szennyezéseket helyhezkötni. Az olajszennyezések helyszíni kezelésére, a kárenyhítésre oxidációs kezelést dolgoztak ki. Analitikai módszerekkel (GC/MS, HPLC, UV/VIS) megállapították a hazánkban előforduló olajtípusok tulajdonságait, ezeket az adatokat felhasználták a technológia kidolgozásában és a folyamatok ellenőrzésében. Laboratóriumi kísérletekkel modellezték, és analitikai vizsgálatokkal követték a különböző olajok talajból történő extrakcióját. A technológia hasznosításában a MOL Nyrt. vesz részt.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Hazai kapcsolatok

Az AKI munkatársai 2009-ben is számos hazai kutatóhellyel dolgoztak együtt sokféle kutatási témában. Különösen intenzívek voltak kutatási együttműködések az MTA intézeteivel, így a Kémiai Kutatóközpont másik három intézetével, valamint nanonanokkompozit rétegek jellemzése témában a Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Kutatóintézetrel. A hazai egyetemek közül funkcionális nanorészecskék témában a Pannon Egyetemmel, műszaki műanyagok részecskesugaras felületmódosítása terén a Szent István Egyetem Gépipari Technológiai Intézet kutatóival, sokkomponensű biológiai rendszerekben a Semmelweis Egyetem munkatársaival végeztek közös kutatásokat. A Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszékkal cellulóz alapú bioetanol gyártás hatékonyabbá tételén dolgoztak.

Az intézet munkatársai magas óraszámban vettek részt a felsőoktatásban: graduális és posztgraduális előadásokat tartottak, szemináriumokat és laborgyakorlatokat vezettek a BME Vegyész- és Biomérnöki Karán és az Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Karán. Az ELTE, a BME, a Budapesti Corvinus Egyetem, a Pannon Egyetem és a Semmelweis Egyetem hallgatóinak BSc, MSc és PhD munkáit irányították.

Az intézet a Pannon Egyetem Műszaki Informatikai Karának Műszaki Kémiai Intézetével közös professzori laboratóriumot működtet, és funkcionális nanorészecskék témában folytat együttműködést. Az Alkalmazott Polimer Fizikai Kémiai Osztály az intézet és a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék közös

szervezeti egysége, mely különböző műanyagok szerkezet – tulajdonság összefüggéseit vizsgálja.

Nemzetközi kapcsolatok

Műszaki műanyagok felületét módosították plazmaimmerziós ionimplantáció alkalmazásával, az így kialakított ultra-nagy molekulatömegű polietilén felületet jellemezték XPS módszerrel. Együttműködő partnerintézmény: National Institute for Space Research, Sao Jose dos Campos, Brazil. Szén bevonatú mágneses nanorészecskék előállításán dolgoztak, a vizsgálatokhoz RF plazmában mintákat készítettek a Varsói Egyetem Kémia Tanszékével közös kutatásban.

A Marie Curie-Tudástranszfer megállapodás keretében a Maribori Egyetemről szlovén kutatót fogadtak, és nyújtott illatanyag leadású mikrokapszulákat fejlesztettek ki. TÉT pályázat keretében gyógyászatban használt polimereket vizsgáltak a hollandiai Twente Egyetem kutatóival. Biológiailag lebontható politejsav/CaSO₄ kompozitok szerkezetét és tulajdonságait kutatták a belgiumi University of Mons-Hainaut-tal. A Pisai Egyetemmel közösen természetes szállal erősített kompozitokat, ezen belülis PP és PLA/fa kompozitokat állítottak elő, és meghatározták jellemzőiket. A romániai Petru Poni Makromolekuláris Intézettel együttműködésben optoelektronikában alkalmazható termékeket fejlesztettek ki.

Energetikai célokra alkalmazható biomassza anyagok hőbomlási tulajdonságait határozták meg, valamint a cellulóz egy új típusú hasznosítási lehetőségét vizsgálták a Dongying városban működő China University of Petroleum kutatóival. A trondheimi Norwegian University of Science and Technology-val közösen dolgoztak a faszén széndioxiddal történő elgázosításának lehetőségén, és a folyamatok kinetikájának pontos felderítésén.

Magyar-Lengyel TÉT együttműködés keretében az éghajlatváltozás és a légkör kémiájának kölcsönhatása témán, gázfázisú elemi reakciók kísérleti és elméleti vizsgálatán dolgoztak az University of Medicine in Wrocław munkatársaival. Ugyanezzel az intézménnyel Magyar-Lengyel Akadémiai Együttműködés keretében meghatározták egyes, a troposzféra halogénkémiájában fontos szerepet játszó elemi reakciók mechanizmusát és kinetikáját. A légkör fizikai kémiája témában a Lille-i Egyetemmel közös PhD témát vezettek, kinetikai és fotokémiai kísérleteket folytattak. A göttingeni Max-Planck-Institute for biophysikalische Chemie munkatársaival közösen jellemezték az N-fenil-pirol/fluorazin rendszer fotofizikai tulajdonságait.

MTA - DFG együttműködés keretében az Ulmi Egyetemmel közösen elektrokémiai impedanciaméréseket folytattak egykristály elektródokon, vizes oldatokban annak demonstrálására, hogy az elektrokémiai kettősréteg dinamikai tulajdonságait az adszorpciós folyamatok határozzák meg a kettősréteg-tartományban. Molekuláris vezetőképesség mérésére szolgáló femto Amper érzékenységű műszereket fejlesztettek ki a Berni Egyetem részére. Magyar – argentin TÉT együttműködés keretében a La Plata-i Festékkutató Intézettel közösen vízhibítású festékekből készült környezetbarát bevonatokat alakítottak ki, és impedancia módszerrel vizsgálták a korrózióvédő tulajdonságaikat.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

Hazai pályázatok

Az intézet kutatói 2009-ben a következő OTKA illetve OTKA-NKTH pályázatokon dolgoztak, és az alábbi figyelemre méltó eredményeket érték el:

- Hordozható XRF készülékkel nagyszámú mérést végeztek Győr és Budapest környéki ásatásokból származó téglaleletanyagokon, továbbá mázakat és pigmenteket vizsgáltak múzeumokban, restaurátor műhelyekben, régészeti gyűjteményekben (PD-75740).
- Polietilén-tereftalátot, poliamidot és polikarbonátot kezeltek nitrogén plazmaimmerziós ionimplantációval és meghatározták a kiváltott felületkémiail, felületi energetikai és csúszósúrlódás típusú tribológiai változásokat (K-67741).
- Poli-tejsav-glikolsav (PLGA) kopolimerekre kötött lineáris és csillagszerkezetű polietilén-glikol (PEG) rétegeket jellemeztek XPS módszerrel (K-68120).
- Hiperelágazásos polimerek szerkezete és a kiindulási lineáris polimer karok molekulatömege közötti összefüggést állapították meg, valamint új szintézis módszert dolgoztak ki hiperelágazásos polimerek előállítására (T-48409).
- Szabályosan alternáló szerkezetű amfil polimer kotérhálókat tanulmányoztak. Új fajta hiperelágazásos és csillag polimerek előállítását dolgozták ki multifunkciós inimerkek alkalmazásával (F-61299).
- PP/rétegszilikát kompozitokban az exfoliáció és a határfelületi kölcsönhatások, valamint a kompozit tulajdonságai és szerkezete közötti összefüggéseket, továbbá a kompozitok termooxidatív stabilitását befolyásoló paramétereket határozták meg (K-67936).
- Hagyományos töltőanyagokat (kréta, üveggyöngy, faliszt), valamint rétegszilikátokat tartalmazó polimer kompozitokat állítottak elő, és vizsgálták a társított polimerek tulajdonságait meghatározó két fontos tényező, a komponensek között kialakuló határfelületi kölcsönhatások, valamint a kompozit szerkezetének hatását a tulajdonságokra (F-68579).
- A fenolos és foszfortartalmú antioxidánsok hatékonyságát és hatásmechanizmusát meghatározó tényezőket tanulmányozták a polietilén feldolgozási körülményei között (K-77860).
- Meghatározták egy jellegzetes fém/ionos folyadék határfelület (Au(111) egykristály / 1-butil-3-metil-imodazólium hexafluorofoszfát) töltésmentes potenciálját (K-67874).
- Jellemezték a nitrogéntartalmú polimerek pirolízisolvajának módosítására alkalmazott Y zeolitok felületén felhalmozódó szénlerakódást, és meghatározták az ennek eltávolítására alkalmas optimális regenerálási körülményeket (K-68752).
- Részlegesen karboximetilezett cellulóz mintákon meghatározták a molekulában jelenlevő savas csoportok, valamint a cink és kalcium ionok hatását a hőstabilitásra és a hőbomlás mechanizmusára (K-61504).
- Olyan alapismereteket nyertek, melyek elősegítik a biomassza jobb hasznosítását erőművekben folyékony üzemanyagként, valamint szennyvíztisztításra alkalmas termékekben (K-72710).
- Meghatározták a propionaldehid és a propionilgyök légkörkémiában fontos elemi reakcióinak kinetikai paramétereit (K-68486).
- Reakciókinetikai és fotokémiai vizsgálatokkal megállapították, hogy a gamma-valerolakton légköri lebomlási élettartama 4 nap (CNK-78079).

Az intézet kutatói a következő egyéb hazai kutatási pályázatok művelésében vettek részt, és az alábbi eredményeket érték el:

- Nanotechnológia alkalmazásával kerámia bevonatokat állítottak elő sugárhajtómű terelő lemezeire, majd a hajtóműben fellépő termikus igénybevétel hatásait tesztelték (OMFB-00252/2007).
- Vizsgálták, hogy miképpen lehet különböző fémek termikus plazmába adagolásával befolyásolni ipari hulladékok feldolgozhatóságát (JÁP_TSZ_P0400808).
- Nanofázisú polimer kotérhálókat és nanohibridjeiket fejlesztettek ki baktericid gyógyászati eszközök, intelligens hatóanyag-bevitelű és bőrsejttenyésztési mátrixok céljára (MTA Kémiai Kutatóközpont Nanomedicina témapályázata)
- Laboratóriumi kísérletekben optimalizálták a poliklórozott aromás vegyületek dehalogénezésére és a klórmegkötésre kifejlesztett technológia működési körülményeit (TECH_08-A462-2008-0160).

Nemzetközi pályázatok

Az intézet kutatói az alábbi EU pályázatok kidolgozásában vettek részt 2009-ben:

- Nagy hozzáadott értékű termékek használt gumiabroncs elgázosítási maradékból témájú pályázat keretében kísérletek történtek használt gumiabroncsok pirolízis maradékának feldolgozására termikus plazmában (Támogatási szerződés száma: 226549).
- A Stratosphere-Climate Links with Emphasis on the UTLS pályázat résztvevőjeként javaslatot tettek az aceton és metil-etil-keton légköri fotokémiájának részletes mechanizmusára (GOCE-CT-2004-505390-SCOUTO3).

Egyéb nemzetközi vagy külföldi forrásból művelt témák:

- Új típusú multifunkciós polimerek kutatásán dolgoztak a DuPont (USA) Research Award támogatásával.
- A kristályos szerkezet és a tulajdonságok kapcsolatát vizsgálták polipropilénben, ezen belül a göcképzés hatását a PP optikai jellemzőire. Együttműködő partnerintézmény: Borealis GmbH, Ausztria.
- Polimer stabilizátorok hatásmechanizmusát határozták meg a Clariant Huningue S.A., France megbízásából.
- A British American Tobacco southamptoni Kutatási és Fejlesztési Központjával végzett munkában dohány hőbomlásáról és égéséről valamint nikotin és formaldehid aeroszorból való felszabadulásának kinetikájáról szereztek ismereteket.
- Speciális elektrokémiai műszereket fejlesztettek ki a CEST Kompetenzzentrum für elektrochemische Oberflächentechnologie GmbH (Wiener-Neustadt, Austria) számára.
- Speciális kerámia nanoporokat állítottak elő, és vizsgálták azok tulajdonságait a BASF AG. támogatásával.

V. Az év folyamán megjelent jelentősebb publikációk, szabadalmak és más bemutatható eredmények

1. Bertóti I, Mohai M, Kereszturi K, Tóth A, Kálmán E: Carbon based Si- and Cr-containing thin films: chemical and nanomechanical properties, SOLID STATE SCIENCES 11: 1788-1792 (2009).
2. Bozi J, Blazsó M: Catalytic modification of pyrolysis products of nitrogen-containing polymers over Y zeolites, GREEN CHEMISTRY 11: 1638-1645 (2009)
3. Bystrzejewski M, Károly Z, Szépölggyi J, Kaszuwara W, Huczko A, Lange H: Continuous synthesis of carbon-encapsulated magnetic nanoparticles with a minimum production of amorphous carbon, CARBON 47: 2040-2048 (2009)
4. Kali G, Georgiou T K, Iván B, Patrickios C: Anionic amphiphilic end-linked conetworks by the combination of quasiliving carbocationic and group transfer polymerizations, JOURNAL POLYMER SCIENCE: PART A: POLYMER CHEMISTRY 47: 4289-4301 (2009)
5. Kriston I, Orbán-Mester Á, Nagy G, Staniek P, Földes E, Pukánszky B: Melt stabilisation of Phillips type polyethylene, Part II: Correlation between additive consumption and polymer properties, POLYMER DEGRADATION AND STABILITY 94: 1448-1456 (2009)
6. Nagy L, Pálfi V, Narmandakh M, Kuki Á, Nyíri A, Iván B, Zsuga M, Kéki S: Dopant-assisted atmospheric pressure photoionization mass spectrometry of polyisobutylene derivatives initiated from mono- and bifunctional initiators, JOURNAL OF THE AMERICAN SOCIETY FOR MASS SPECTROMETRY 20: 2342-2351 (2009)
7. Pajkossy T, Kolb D M: The interfacial capacitance of Rh(111) in HCl solutions, ELECTROCHIMICA ACTA 54: 3594–3599 (2009)
8. Renner K, Móczó J, Pukánszky B: Deformation and failure of PP composites reinforced with lignocellulosic fibers: Effect of inherent strength of the particles, COMPOSITES SCIENCE AND TECHNOLOGY 69: 1653-1659 (2009)

Az MTA KK Anyag- és Környezetkémiai Intézet kiemelten sikeres kutatási területei 2009-ben

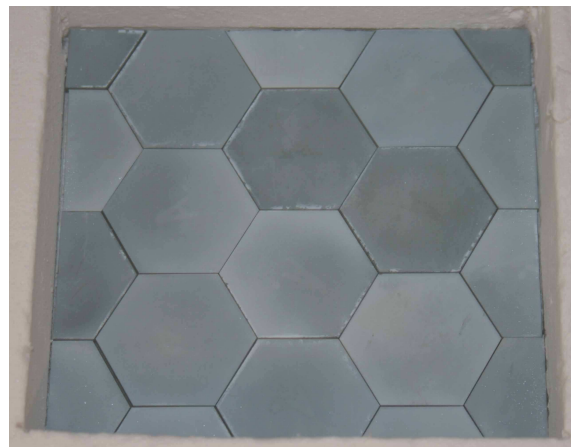
Magas hőmérsékleten radarsugárzást elnyelő anyagok kifejlesztése nanotechnológia alkalmazásával

Svéd-magyar kormányközi együttműködés keretében olyan nanoszerkezetű kerámia bevonatokat és társított rendszereket fejlesztettek ki, amelyek a radarsugárzást magas hőmérsékletű környezetben is képesek elnyelni. A munka során egyrészt kifejlesztettek olyan mátrix anyagokat, amelyek a radarsugárzást nem verik vissza, másrészt kikísérletezték olyan adalékanyagok (bór nitrid/szén nanocső nanokompozitok, szilícium karbid nanoszálak, ferrit nanoporok) előállítását, amelyek a radarsugárzás energiáját hő/elektromos/mágneses veszteség formájában elnyelik.

A projekt során olyan többkomponensű kerámia kompozitokat fejlesztettek ki, amelyeket atmoszférikus plazmaszórással akár 1-2 mm-es vastagságban is fel lehet vinni fémfelületre. Eljárást dolgoztak ki nem olvadó (nitrid, karbid, borid) kerámia porok plazmaszórására, és optimalták a plazmaszórás paramétereit. Hasonló összetételű társított kerámia testek is készültek. Ezeken a svéd partnerek olyan, a szakirodalomban eddig nem hozzáférhető anyagparamétereket mértek, amelyek segítségével modellezni tudták hasonló összetételű és vastagságú kompozit rétegek magas hőmérsékletű radarelnyelő tulajdonságait. Megállapították, hogy a kifejlesztett kompozitok révén a radarsugarak visszaverődése számottevően csökkenthető.



Kerámia bevonat előállítása az AKI termikus plazma laboratóriumában atmoszférikus plazmaszórással

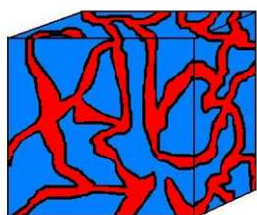


Magas hőmérsékletű radar reflexiós mérésekhez előállított kerámia nano-kompozit testek

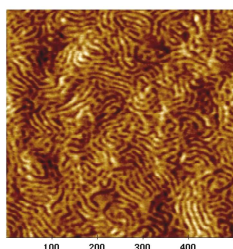
A fémfelületekre felvitt – többféle összetételű – kerámia kompozit bevonatok hőstabilitását Svédországban, repülőgép sugárhajtóműbe beépítve, több üzemeltetési cikluson keresztül tesztelték, és a tesztek megfelelő eredményt hoztak. Az első tesztelési szakasz után megállapították: annak ellenére, hogy az alapfém és a bevonat hőtágulási együtthatói jelentősen eltérnek egymástól, az intézet által kialakított kerámia bevonatok a nagy hőmérsékletingadozásokat jól tűrték, nem repedtek meg. Az együttműködő partnerek és a projektet részben finanszírozó svéd hatóságok - a bízató eredményeknek köszönhetően - a közös projekt folytatását javasolják.

Polimer kotérhálókon alapuló különleges nanohibridek

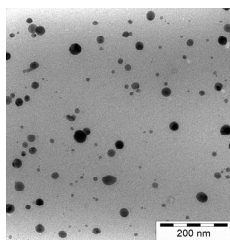
Kutatásaik során különleges szerkezetű és tulajdonságú, amfifil polimer kotérhálókon alapuló, szerves-szervetlen nanohibrid anyagokat állítottak elő. Az amfifil kotérhálók egyedülálló sajátága, hogy kémiai kötésekkel összekapcsolt hidrofil (vizet kedvelő) és hidrofób (szénhidrogént kedvelő) polimer láncokból állnak. Hasonlóan a víz és az olaj esetéhez, melyek nem képesek elegyedni egymással, a kotérhálók esetében is jellemző az alkotóelemek rendkívül eltérő viselkedése, mely speciális nanoszerkezet kialakulását eredményezi. Az ilyen térhálós polimerekben ugyanis az alkotóelemek elkülönülnek egymástól, de nem makroszkópikus szinten, hanem nanométeres tartományban. Az amfifil kotérhálók optikailag tiszta, mechanikailag erős, rugalmas, valamint számos esetben biokompatibilis anyagok.



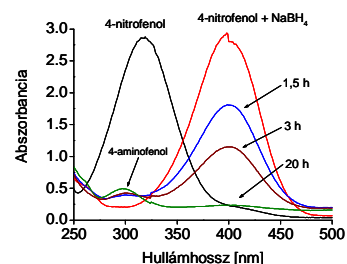
1. ábra Amfifil kotérháló mint nanoreaktor



2. ábra Amfifil kotérháló nanoszerkezete (AFM felvétel)



3. ábra Ezüst nanorészecskéket tartalmazó amfifil kotérháló (TEM felvétel)



4. ábra Nanohibrid anyag katalitikus reakcióban (UV-VIS analízis)

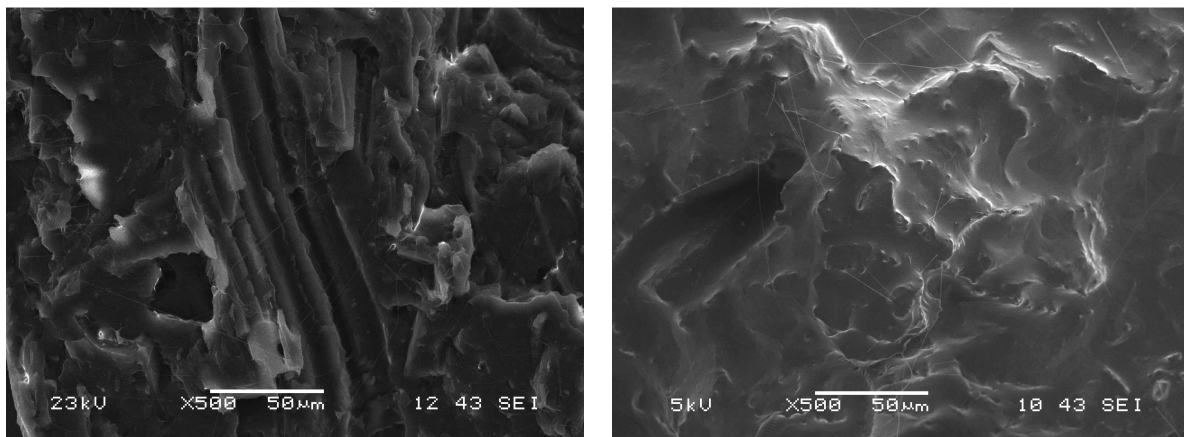
Kutatásaik során az amfifil kotérhálók különleges szerkezetének kiaknázásával újszerű, kotérhálókon alapuló nanohibrid anyagokat állítottak elő, melyek a szerves polimereken kívül valamilyen szervetlen anyagot is tartalmaznak. A szervetlen anyagok lehetnek fémek vagy fém-oxidok is. A hidrofil komponensként poli(N,N-dimetil-akrilamid)ot, valamint az erősen hidrofób poliizobutilént tartalmazó amfifil kotérhálóból kiindulva sikeresen állítottak elő a polimer belsejében nanoméretű ezüstrészecskéket tartalmazó nanohibrid anyagokat. Ettől eltérő komponenseket alkalmazva előállítottak rézsót tartalmazó nanohibrid anyagokat is. Ezeket a nanohibrid anyagokat az ún. nanoreaktor elv felhasználásával hozták létre. Az 1. ábrán egy amfifil kotérhálót bemutató vázlatos rajz látható, melyen a hidrofil polimert (kék) falként veszi körül a pirossal ábrázolt hidrofób polimer fázis. Köszönhetően a kölcsönösen folytonos nanofázisoknak, valamely hidrofil oldószer, mint pl. a víz is, könnyedén eljut a hidrofil fázisokba, míg a hidrofób fázisokba képtelen behatolni. Kémiai reagenseket juttatva az amfifil kotérháló vizes fázisába, a hidrofób polimerrel falként körülzárt térrészben játszódik le a reakció, mely nanoméretű szilárd, immobilizált anyag keletkezését eredményezi. Az amfifil kotérhálók erre alkalmas különleges fázisszerkezetét mutatja a 2. ábra, melyen sötétebb színnel a rugalmas poliizobutilén látható. Az ezüst képződését eredményező kémiai reakció lezajlása után látható szerkezetet ábrázolja a 3. ábra, melyen az látszik, hogy a keletkező, nem aggregálódó fémezüst részecskék ~20 nm méretűek. A nanoezüst tartalmú nanohibrid anyag gyakorlati felhasználhatóságát katalitikus rendszerben igazolták. Mint ahogy a 4. ábrán látható, egy katalitikus folyamatot in-situ módon követték, melyben a nanoezüst a polimer hordozóval együtt mint katalizátor vett részt. A spektrumok azt jelzik, hogy az ezüst-kotérháló nanohibriddel a reakcióidő előrehaladtával a kívánt termék képződik, vagyis a folyamatot az amfifil kotérhálóból készített nanohibrid anyag kiválóan katalizálja. Egy ilyen rendszer könnyen kezelhető, többször is felhasználható, azaz egy

környezetileg előnyös, teljesen újszerű hibrid nanokatalizátor rendszert hoztak létre az intézet kutatói.

Megújuló nyersanyagokra épülő, biológiailag lebontható polimer kompozitok

Napjaink egyik legismertebb környezeti problémája, hogy a műanyag hulladékok lassan de biztosan ellepik a Földet. A fent említett problémára kézenfekvő megoldást nyújtanak a biológiailag lebomló polimerek, amennyiben képesek vagyunk tulajdonságaikat oly mértékben módosítani, hogy alkalmasak legyenek a jelenleg használt tömegműanyagok kiváltására. A politejsav (PLA) a biológiailag lebontható polimerek azon csoportjába tartozik, amiket megújuló nyersanyagok felhasználásával lehet előállítani. Kedvező tulajdonságainak köszönhetően egyre nagyobb az érdeklődés a PLA iránt. Felhasználhatósága azonban korlátozott a polimer különleges tulajdonságai és magas ára miatt. A PLA szélesebb körű alkalmazhatóságához további kutatásokra van szükség. Egyik lehetséges út a PLA társítása töltőanyagokkal. Ebbe a kutatásba kapcsolódott be az MTA KK Anyag- és Környezetkémiai Intézet Alkalmazott Polimer Fizikai-Kémiai Osztályának és a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Műanyag- és Gumiipari Laboratóriumának közös egysége. A kutatómunka elsősorban biológiailag lebontható polimer kompozitok előállítására, illetve a tulajdonságokat befolyásoló tényezők meghatározására irányult.

A munka során különböző természetes töltőanyag (faliszt, mikrokristályos cellulóz, kukoricacsutka őrlemény) alkalmazásával állítottak elő kompozitokat. Optimalizálták azok feldolgozás technológiáját, és meghatározták a társított rendszerekre jellemző szerkezet-tulajdonság összefüggéseket. Végeredményben kiváló mechanikai tulajdonságokkal rendelkező, biológiailag 100%-ban lebontható, és a módosíthatlan polimernél jóval olcsóbb kompozitokat hoztak létre. Az említett töltőanyagokat tartalmazó PLA kompozitok mikroszerkezete és felhasználási lehetőségei az alábbi ábrákon láthatók.



Faliszt (bal) és kukoricacsutka-őrlemény (jobb) töltőanyagot tartalmazó PLA kompozitok elektronmikroszkópiás felvétele



Két példa a PLA felhasználási lehetőségeire

Az MTA KK Anyag- és Környezetkémiai Intézet 2009. évi tudományos teljesítményének néhány mutatója

Átlagléttség:	70	Ebből kutató:	44
PHD v. kand.:	16	MTA doktora:	10
MTA levelező tag:	0	MTA rendes tag:	0
<i>Az intézethez kötődő akadémikusok száma:</i>	2		
35 év alatti, intézeti állományban levő kutatók száma:	19		

Publikációk

Az év folyamán megjelent összes (tudományos és ismeretterjesztő) publikációk száma:	78
Az év folyamán megjelent tudományos publikációk száma:	76

Tanulmány, cikk

impakt faktoros publikáció magyarul:	0	~ idegen nyelven:	42
nem impakt faktoros tudományos cikk magyarul:	6	~ idegen nyelven:	8
hazai tudományos folyóiratban magyarul:	6	~ idegen nyelven:	7
külföldi folyóiratban magyarul:	0	~ idegen nyelven:	43
nemzetközi együttműködés keretében:	27		
SCI által regisztrált folyóiratban:	42		
összesített impakt faktor:	80.338		
összes hivatkozás száma:	1378	összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:	1233

Könyv

könyv/monográfia magyarul:	0	~ idegen nyelven:	0
könyvfejezet (kevesebb mint 20 old.) magyarul:	1	~ idegen nyelven:	16
könyvfejezet (több mint 20 old.) magyarul:	1	~ idegen nyelven:	0
könyvfejezet magyarul:	0	~ idegen nyelven:	0
lexikoncikk: 2 ívig:	0		
tanulmánykötet szerkesztése magyarul:	0	~ idegen nyelven:	2
Tudományos ismeretterjesztő írás magyarul:	2	~ idegen nyelven:	0

Tudományos fokozat, ill. cím megszerzése (2007-2009 évi átlag):

PhD:	2.333	MTA doktora cím:	0.333
MTA levelező tag:	0	MTA rendes tag:	0

Szellemi alkotások védelme:

Nemzeti úton megadott oltalmak száma:	0
Megadott külföldi oltalmak száma:	0
Értékesített szabadalmak száma:	0
Szerzői jogvédelem alá tartozó alkotások száma:	0

Részvétel a tudományos és kulturális életben:**Rendezvények:**

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma:	41	~poszterek száma:	46
Hazai rendezvényen tartott tudományos előadások száma:	50	~poszterek száma:	3
ismeretterjesztő előadások száma:	3		
Tudományos rendezvények szervezése hazai:	0	nemzetközi:	3
Jelentős nyilvános kulturális esemény megrendezése:	0		

Szakértői tevékenység:

tanácsadói tevékenységek száma:	0		
egyéni szaklektori vélemény összesen:	127	ebből külföldre:	110
opponensi vélemény összesen:	12	ebből külföldre:	1
egyéb szakértői vélemény:	28	ebből külföldre:	2

Részvétel tudományos testületben

Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	16	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	12
Nemzetközi tud. bizottsági elnökség:	0	Hazai folyóirat szerk. tagság:	3
Hazai tud. bizottsági elnökség:	13	Hazai tud. bizottsági tagság:	67

Felsőoktatásban végzett tevékenység:

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma:	20		
Ebből doktori iskolákban oktatók száma:	3	Doktori iskolát vezetőik száma:	0
Elméleti kurzusok száma:	21	Gyakorlati kurzusok száma:	29
TDK-t készítő hallgatók száma:	9		
Diplomamunkát készítő hallgatók száma (BSc):	10		
Diplomamunkát készítő hallgatók száma (MSc):	14		
PHD-t készítő hallgatók száma:	23		
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma:	2033		

Az MTA KK Anyag- és Környezetkémiai Intézet 2009. évi tevékenységének egyéb bemutatható jellemzői

- Bejelentett szabadalmak, és egyéb szabadalmi jellegű alkotások száma:
 - a Magyarországon bejelentettek: 4
 - a nem Magyarországon bejelentettek: 1
- A kutatónők száma:
 - vezető beosztásokban: 1
 - nem vezető beosztásokban: 16
- A mobilitással kapcsolatban az intézetből az állásukat megtartott, munkaviszonyban levő diplomások közül hat hónapnál hosszabb időre távollevők száma:
 - Magyarországon
 - egyetemen, kutatóintézetekben -
 - gazdasági társaságnál -
 - Nem Magyarországon
 - egyetemen, kutatóintézetekben: 2
 - gazdasági társaságnál -
- az adott intézethez érkező kutatók száma:
 - 1-6 hónap időtartamra
 - Magyarországról -
 - nem Magyarországról: 4
 - 6 hónapnál hosszabb időre
 - Magyarországról -
 - nem Magyarországról -
- Vállalati kapcsolatok
 - jelentősebb ipari partnerek:
 - GE Hungary Ltd., Részvétel K+F problémák megoldásában, kutatási megbízás teljesítése
 - Graboplast Padlógyártó Zrt., Részvétel K+F problémák megoldásában, kutatási megbízás teljesítése
 - TVK Nyrt., Poliolefinok stabilizálása, K+F tevékenység
 - MOL Nyrt., Olajszennyezések felkutatása, monitorozása, kárenyhítés, K+F tevékenység
 - Inotal Zrt., Mélyhúzott Al palack felületvizsgálata, kutatási megbízás teljesítése
 - Momentive Perform. Mater. GmbH, K+F problémák megoldása, kutatási megbízás
 - Országos Villamostávvezeték Zrt., Részvétel K+F problémák megoldásában, kutatási megbízás
 - EPCOS Kft. Részvétel K+F problémák megoldásában, kutatási megbízás
 - BASF AG, Részvétel K+F problémák megoldásában, kutatási megbízás
 - British American Tobacco Ltd, Kinetikai vizsgálatok, kutatási megbízás
 - az intézet holdudvarába tartozó kisvállalkozások száma: 24
- A társadalmi párbeszéd eredményei:
 - Az általános tudománynpszerűsítő közlemények száma: 2
 - Az intézet tevékenységét népszerűsítő rendezvények száma: 2

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

Az intézet fő feladatai, egyes tevékenységi területei 2009. évben a következők voltak:

- alapvető és nemzetközi színvonalú biomolekuláris kémiai kutatások folytatása, amelyek magukban foglalják különböző, gyógyszerkémiái vagy finomkémiái szempontból fontos szintézismódszerek kidolgozását, különös hangsúllyal az eredeti heterociklusos szerves vegyületek és szénhidrátok előállítására; ismert és nem ismert cél-molekulák alapvető biokémiai, fiziológiai szerepének vizsgálatát; új diagnosztikai lehetőségek feltárását.

Az intézet, a tudományos feladatokhoz kapcsolódóan a következő területeken fejtett ki tevékenységet:

- kutatási infrastruktúra üzemeltetése;
- részvétel a graduális és posztgraduális szakemberképzésben;
- alap- és alkalmazott kutatásokhoz szükséges módszerek és eszközök fejlesztése;
- a tudományos eredmények hasznosításának kezdeményezése és elősegítése;
- hazai és nemzetközi tudományos rendezvények szervezése;
- részvétel a nemzetközi tudományos életben és a tudományos szervezetekben.

II. Az év folyamán elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények, azok gazdasági-társadalmi haszna

Heterociklusos vegyületek szintézise és vizsgálata

Újabb palládium-katalizált keresztkapcsolások végrehajtásával fenotiazinnal szubsztituált diéneket és ezek redukált származékait szintetizálták, melyeknek multidrog-rezisztenciára gyakorolt hatását kooperációban kutatták. A rezisztenciagátlás vizsgálata az életminőség javítása szempontjából napjaink egyik kiemelt területe.

Ikerionos vegyületek tanulmányozása során, új típusú váz-átrendeződéseket figyeltek meg, amely átalakulások megismerése lényeges szerepet játszott a vegyülettípusok reakciókészségének értelmezésében.

Több olyan gyűrűzárást dolgoztak ki, melyek kondenzált pirazolokat és triazolokat eredményeztek. Az új gyűrűrendszerek szintézise alapvető jelentőségű a gyógyszerkémiában, mivel új, gyógyhatású származékok felismerésének fontos forrását jelenti.

Biológiailag aktív szénhidrátok szintézise

Az α -aminonitrilek a Strecker-szintézis köztitermékei. Az aminonitrilek a szerkezetükben található amino és nitril (látens karbonil és imin funkció) csoportok miatt hasznos kiindulási anyagok lehetnek mono- és bifunkcionális vegyületek előállításában. Savas hidrolízisükkel α -aminosavak állíthatók elő. A nitrilcsoport hidridekkel és karbanionokkal történő nukleofil szubsztitúciójával aminok képződnek. A nitrilcsoport teljes reduciójával 1,2-diaminok, míg részleges hidrogénezéssel és hidrolízise után α -aminoaldehidek állíthatók elő. Az aminonitrilek számos nitrogéntartalmú heterociklusos vegyület kiindulási anyagai lehetnek. A cukrok anomer szénatomjához kapcsolt α -aminonitril funkció az irodalomban eddig le nem írt C-glikoaminonitrileket eredményez, amelyekből a fenti funkciócsoport-átalakítások során biológiailag aktív új szénhidrátszármazékok állíthatók elő.

A kidolgozott alán-Strecker reakcióval számos α - és β -kapcsolt C-glikoaminonitrilt állítottak elő glüko-, galakto- és manno-szénhidrátokkal. Az alán-Strecker reakció körülményeinek (oldószer, amin, cianidforrás) optimalizálásával 85% diasztereomer felesleg érhető el organokatalizátorok használata nélkül.

Oligoszacharidok reakcióinak tanulmányozása

A heparin szerkezet-hatás összefüggés tanulmányozásával kapcsolatban, a korábban kidolgozott ortogonális védőcsoport-stratégiával, előállították a heparin két tetraszacharid egységét.

A heparánáz enzim inhibitorainak szintézise során egy új védőcsoportot, a 2-nitrobenzolszulfonil csoportot, vezettek be azacukrok nitrogénatomjának a védésére. A kidolgozott módszerrel azacukrot tartalmazó heparin-diszacharid analógokat állítottak elő.

Szisztematikusan vizsgálták a szénhidrát egységek szubsztituenseinek hatását glikozilezési reakciók hozamára, sztereoselektivitására és sebességére. Megállapították, hogy a kísérleti adatok alapján a jelenleg általánosan elfogadott szomszédcsoporthatás nélküli alapuló értelmezés nem helytálló. Egy új, a glikozil oxokarbénium ion konformációs preferenciáin alapuló, elméleti modellt dolgoztak ki a glikozilezések sztereoselektivitásának eredetére és a szubsztituensek hatásának értelmezésére. Az új modell segítségével korrektilen megjósolható volt a reakciók sztereokémiai eredménye, és így a modell alapul szolgálhat az eddigieknél sokkal hatékonyabb glikozilezési módszerek kifejlesztésére.

Organokatalitikus reakciók tanulmányozása

Az aszimmetrikus organokatalízis paradigmaváltást hozott a szintetikus kémiában az elmúlt évtized során. A kutatások legújabb irányzata ezen a területen az ún. domino vagy kaszkád reakciók vizsgálata és kifejlesztése. E módszer lehetővé teszi egyszerű építőelemekből komplex, multifunkcionális molekulák előállítását. E területhez kapcsolódva, új elvet ismertek fel és aknáztak ki a bifunkcionális organokatalízis területén, amelyet enantiospecifikus aktiválásnak neveztek el. Erre a királis felismerésen alapuló elképzelésre építve, számos ciklohexán-vázis vegyület szintézisét valósították meg kimagasló enantio- és diasztereoselektivitással. A koncepció további bizonyításaként, egy egészen egyedi, kinetikus rezolválási folyamatot dolgoztak ki. Az eredmények alapvetően új lehetőséget kínálnak több kiralitás centrummal rendelkező, bonyolult gyógyszer-molekulák egyszerű előállítására.

A katalízis területének további fejlődése alapvetően új aktiválási elvek felfedezésétől függ. A korábban általuk leírt, frusztrált Lewis-sav-bázis párok területe alapvetően új stratégiát jelent a főcsoport elemeire épülő katalizátorfejlesztésben. A sztérikus zsúfoltságra mint katalizátor tervezési elvre építve számos Lewis-sav-bázis párt hoztak létre, amelyeket a hidrogén heterolitikus hasítására, illetve katalitikus hidrogénezésre használtak.

2009-ben olyan frusztrált rendszereket sikerült kifejleszteniük, amelyek fokozott funkciócsoport-toleranciával rendelkeznek, így a gyakorlatban is felhasználhatóak. Az eredmények hozzájárulhatnak az első zöld, fémmentes, ipari méretű hidrogénezési folyamat kidolgozásához.

Természetes szerves anyagok szintézise

Az indolvázias alkaloidokat és alkaloidszerű vegyületeket széles körben használják a gyógyászatban. Ezen a területen az intézet kutatócsoportja a Richter Gedeon Nyrt-vel együttműködésben dolgozik már hosszú ideje. 2009-ben egy egyszerű eljárást dolgoztak ki 2-,3- és 4-dialkilaminoetilamilinok szintézisére, amik alkalmasak indolvázias alkaloidok és alkaloidszerű vegyületek előállítására.

Nukleotidkémiai kutatások

A korábban előállított 5-szubsztituált-pirimidin peptid-nukleinsav (PNS) építőegységek felhasználásával öt 11-mer homopirimidin PNS-oligomert szintetizáltak szilárd fázison, és meghatározták a homopurin DNS komplementerrel képzett duplexeinek termikus stabilitását. Azt találták, hogy egy kivételével mindegyik módosítás növelte a duplexek termikus stabilitását a referencia, a csak timin és citozin bázisokat tartalmazó, PNS-duplexhez viszonyítva. Megállapították, hogy a szóban forgó 5-aryl-, ill. 5-alkinil-uracil bázisokat tartalmazó peptid nukleinsavak, erős és szelektív hibridizációs tulajdonságuk folytán alkalmasak géndiagnosztikai célokra.

L-arabinózból kiindulva, lineáris szintézis-stratégia alkalmazásával számos új 5-(2-tienil)-pirimidin bázist, emellett 2'-, ill. 3'-módosításokat is tartalmazó L-ribo- és L-arabino-nukleozidot állítottak elő antivirális, ill. antitumor hatásvizsgálat céljából.

Neurokémiai kutatások

Transzport-célfehérjék által szabályozott idegi folyamatok mechanizmusának jobb megértése céljából in vitro nyomjelzéses, képalkotó és elektrofiziológiai eljárásokkal, valamint in vivo mikrodialízis technika alkalmazásával azonosítottak egy új típusú, glutaminsav-felvételével közvetlenül kiváltható γ -amino-vajsav (GABA) kibocsátási folyamatot, ami új stratégiát kínál a fokozott glutaminsav-aktivitással járó agyi rendellenességek (pl. epilepszia, ischemia) kezelésében. Leírták a GABA- és a Glu-áramok dinamikáját és a Glu-transzport szerepét a hipomagnéziával kiváltott, rekurrens, rohamszerű események keletkezésében és fenntartásában, akut hippokampális agyselektben. Antiepileptikus gyógyszerek tervezését is érintő lényeges felismerés: a GABA és a nátriumion között kialakuló reverzibilis kémiai kapcsolódás a neuronális és a gliális GABA-transzporter altípusok szubsztrát kötőzsebében. A tiltott drog, γ -hidroxi-vajsav (GHB, folyékony "Extasy") hatásmechanizmusának megértése szempontjából fontos jelátviteli mechanizmusokat, ATP-vel kiváltott konnexin csatornákon keresztül terjedő gliális kalciumion-hullámot és GHB hatására fellépő intracelluláris $[Ca^{2+}]$ -

növekedést figyeltek meg akut nucleus accumbens agyszeletben konfokális lézerfluoreszcencia-technika alkalmazásával.

Molekuláris farmakológiai kutatások

2009. év folyamán 26 kinázgátló kötődését határozták meg AGP és HSA szérumfehérjéken, amiből a gyógyszerek farmakokinetikájára és molekulák kötődésmódjára kaptak információt. CD-spektroszkópiai módszerrel vizsgálták az avidin ligandumkötő tulajdonságait. A kidolgozott eljárást módszerként javasolták az avidin és egyéb, gyógyszer-célpontként is ismert emberi és virális fehérje ligandumkötésének kimutatására.

Kimutatták glicin receptorokon a tropeinek kötőhelyét és eltérő kötődésmódját gátlás és potencírozás esetén. A szerkezet-hatás összefüggések feltárása hozzájárul a glicin receptorokra hatásirány- és alegység-szelektív modulátorok kifejlesztéséhez.

Újnan szintetizált 19 β -laktám vegyület királis elválasztását oldották meg permetil- és szulfobutil- β -ciklodextrinek keverékével, kapilláris elektroforézis módszerrel. A királis analitikát a vegyületek farmakológiai tesztelésében lehet alkalmazni.

A metabolizmus folyamatainak vizsgálata

2009-ben folytatták az ABC-transzportereken (ABCC2/3; ABCB11, ABCG2) lejátszódó gyógyszer-interakciók tesztelését humán és patkány hepatocita szendvicskultúrában, kibővítve az „uptake” transzportereken történő interakciók vizsgálatával (NTCP, OATP). A gyógyszer-mellékhatásként létrejövő kolesztázis mechanizmusát vizsgálták szendvicskultúrában tartott humán és patkány hepatocitákon, tesztelték a kolesztázis kialakulásában szerepet játszó ABCB11 és NTCP transzporterek specifikus szubsztrátja, a taurokolát eliminációjának és intracelluláris akkumulációjának változását kolesztatikus gyógyszerek hatására. A módszer lehetővé teszi a bazolaterális és kanalikuláris transzporterek működésének egyidejű és egymástól független vizsgálatát. Kimutatták, hogy az epesók vektoriális transzportja eltérő humán és patkány hepatocitákban. Kolesztatikus gyógyszerek hatására az epesók intracelluláris akkumulációja sokkal nagyobb mértékű a humán, mint a patkány sejtekben, ami magyarázhatja, hogy ezeknek a vegyületeknek hepatotoxikus mellékhatását a patkány toxikológiai kísérletek nem jelezték. Igazolták, hogy ABCB11 gátlás esetében, patkány hepatocitákban, a nagyobb mértékű bazolaterális transzport védi a sejteket a toxikus epesók magas intracelluláris koncentrációjától.

Gyógyszer-kölcsönhatások vizsgálata

Diagnosztikai eljárást dolgoztak ki a szervezet gyógyszerlebontó képességének meghatározására, ami lehetővé teszi az egyénre szabott gyógyszeres terápia kialakítását. A diagnosztikai rendszer egyfelől a gyógyszer-metabolizmusban résztvevő P450 enzimek expressziójának meghatározásán (CYP-fenotipizálás), másfelől a DNS-analízissel megállapítható génhiba kimutatásán (CYP-genotipizálás) alapul. A módszer olyan betegcsoportoknál alkalmazható, ahol több hatóanyagot használnak fel, vagy ahol az egyéni gyógyszeres kezelés jelentősen javíthatja az alkalmazott gyógyszerek hatékonyságát és nagyban csökkentheti a toxicitás kockázatát.

In vitro CYP2C9-indukciós vizsgálatok eredményeinek értékelésére matematikai modellezést végeztek, és szimulációs megközelítést alkalmaztak. A modell és a kísérletes megközelítés integrálása az indukciós mechanizmus jobb megértését szolgálja. Az indukciós vizsgálatok,

illetve a modell és a szimulációs analízis eredményei, a PXR, a CAR, valamint a GR-aktiváción túl egy további szabályozó faktor részvételét valószínűsítik. Az expressziós profil alapján feltételezik az ösztrogén receptor aktív közreműködését.

Biooxidációs vizsgálatok

Sportolásnál, az edzés által kiváltott oxidatív stressz idegrendszeri funkciókra gyakorolt hatását mérték a szervezet általános állapotára, különös tekintettel az emlékezőképességre.

Tanulmányozták a multidroeg rezisztenciáért felelős transzporterek jelenlétét állati tumorokban, különös tekintettel a fotodinamikus terápiában résztvevő transzporterekre.

Új, a fotodinamikus terápiában alkalmazandó vegyületeket állítottak elő, és elvégezték azok in vitro tesztelését.

Kemometriai kutatások

Új, módszer- és modell-összehasonlításra szolgáló, rangsoroló módszert fejlesztettek ki. Elvégezték nyers kávéminták növénytani és földrajzi megkülönböztetését a minták metilxantin- és fenolvegyületei tartalmának kemometriai elemzésével. Kis molekulákra vonatkozó fizikai-kémiai és kromatográfiás polaritási jellemzőket hasonlítottak össze. Megállapították, milyen jellemzőket, milyen körülmények között lehet használni.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Hazai kapcsolatok

Hazai együttműködések közül kiemelendők az egyetemekkel és más akadémiai intézetekkel folytatott közös kutatások, ill. az oktatási kapcsolatok.

Az ELTE TTK Biológiai Intézet Proteomikai Laboratórium, Élettani és Neurobiológiai Tanszékével a „Glu-GABA cserefolyamat vizsgálata mikrodialízis technikával in vivo”, a Semmelweis Egyetem-MTA Neuromorfológiai és Neuroendokrinológiai Laboratóriummal „A Glu-GABA cserefolyamatban résztvevő célfehérjék anatómiai és immunhisztokémiai lokalizációja”, az MTA SZBK, Enzimológiai Intézettel és az ELTE TTK Kémia Intézet, Szerkezeti Kémia és Biológia Laboratóriummal „Acil-aminoacilpeptidáz kristályszerkezetek meghatározása” c. témák kutatásait folytatják közösen.

Kutatási együttműködést indítottak a Semmelweis Egyetem Orvosi Vegytani, Molekuláris Biológiai és Pathobiokémiai Intézetével, valamint az Uzsoki utcai Kórház Sebészeti-Érsebészeti Osztályával „Humán hepatociták izolálása és gyógyszerinterakciók vizsgálata” c. témában. Eddig egy közös publikációt jelentettek meg.

Igen eredményes kutatási kapcsolatokat alakítottak ki a Semmelweis Egyetem Transzplantációs és Sebészeti Klinikájával. Az együttműködés keretében vizsgálták a transzplantációra kerülő (donor) máj gyógyszerlebontó képességét. Ennek eredményeként kialakítható a transzplantáción átesett betegek egyéni gyógyszeres terápiája.

Eddig 11 közös publikációt jelentettek meg.

Az MTA Enzimológiai Intézetével folytatott közös kutatások („Glutation és aminosav konjugátumok kölcsönhatása *Drosophila melanogaster* multidrug rezisztens fehérjékkel” c. téma) eredményeinek alapján megállapították, hogy a klóracetanilid herbicidek glutation és cisztein konjugátumai kölcsönhatnak a *Drosophila melanogaster* multidrug rezisztens fehérjékkel.

Az „Aszimmetrikus biotranszformációk folyamatos csőreaktorban” c. témában együtt dolgoznak a BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék kutatóival. 2009-ben az eredményekről egy közös publikációban számoltak be.

Több hazai vállalattal vannak közös projektjeik: így pl. a Creative Labor Kft.-vel a „Sejtvonalak előállítása immunfestési metodika tesztelésére”, a LuminoChem Kft.-vel „Új Na⁺ ion-szelektív fluoreszcens festékek fejlesztése”, a Nanochem Kft.-vel „Ultraérzékeny fluoreszcens detektor fejlesztése” és a Richter Gedeon Nyrt.-vel „Új anxiolitikumok tervezése és felismerése” c. témában dolgoznak együtt.

A Vichem Kft.-vel folytatott együttműködés keretében gyógyszerhatóanyagok szérumpférékötődésének vizsgálatát végzik. Az említett cég kutatóival közös publikációt jelentettek meg.

Az „ABC transzporter fehérjék kölcsönhatása környezeti szennyezőkkel” c. témában (együttműködő partner: Solvo Biotechnológia Zrt., Szeged), transzporter-vizsgálatokat végeztek. Megállapították, hogy a klóracetanilid herbicidek, mint környezeti szennyezők gátolják az ABC transzportfehérjék működését, ezáltal jelentősen befolyásolják a gyógyszerek felvételét, és érzékennyé teszik a sejteket a citosztatikus vegyületekkel szemben. A vizsgálatok eredményeként kapott információk igen fontosak az újonnan kifejlesztett növényvédőszer használatával járó kockázati tényezők előrejelzésében. Az együttműködés eredményeként két közös publikációt jelentettek meg.

Nemzetközi kapcsolatok

Számos európai egyetemmel és kutatóintézettel alakítottak ki jó kapcsolatot: a Department of Pharmacology and Pharmacotherapy, Faculty of Pharmaceutical Sciences, University of Copenhagen intézménnyel a „Glu-GABA cserefolyamat jellemzése primer sejt-kultúra modellekben” c. témában, a Neurofiziológiai Intézet, Charité–Universitätsmedizin, Berlin intézménnyel „Az NO szerepe a rohamszerű események keletkezésében”, a National Institute of Nuclear Physics, Róma intézménnyel a „Funkcionalizált szén nanocsövek fejlesztése”, a Ruhr University, Bochum intézménnyel a „Glutaminsav és γ -amino-vajsav detektálására alkalmas enzimrendszerek fejlesztése”, míg a University of Rome “La Sapienza” intézménnyel a “Neuronális hálózatok modellezése” c. témában folytatnak eredményes együttműködést. Az elért eredményekről 2009-ben két folyóiratcikket publikáltak.

A „Nukleozid analogonok szintézise és antivirális hatásuk vizsgálata” c. témában (együttműködő partnerintézmény: Rega Institute for Medical Research, Katholieke Universiteit Leuven) a partnernek átadott nukleozidok közül 2009-ben 9 származék *in vitro* antivirális tesztelésére került sor.

„Hatékony módszerek kidolgozása heparin és heparán szulfát oligoszacharidok biológiai célra történő előállítására” című témapályázatot (ERA Chemistry) nyújtottak be a Centre for

Synthesis and Chemical Biology, University College Dublin (Írország) intézménnyel közösen. A projektet 2010-es kezdéssel hagyták jóvá.

A Department of Anatomy, National University of Singapore kutatóival a „Bioaktív emlőrák ellenes glikozaminoglikán oligoszacharidok” c. témát a *STAR-NKTH pályázatra adták be.

A „Glukokortikoid hormonok szerepe az aromás-szénhidrogén receptor sejt-szignál működésében humán hepatocitákban” c. témában (TÉT-együtműködés, partner: Palaczký University Olomouc) végzett kutatások eredményeként megállapították, hogy a humán hepatocitákban a glukokortikoidok 50-60%-al csökkentik a CYP1A1 fehérje szintjét, azonban a CYP1A1 mRNS mennyiségét nem befolyásolják. Ugyanakkor a dexametazon fokozza a CYP1A2 mRNS indukciót 3-metilkolantrén vagy TCDD kezelt humán sejtekben. A szteroid prehormon dehidroepiandrosteron (DHEA) hatása részben emlékeztet a dexametazon hatásra. Bár a CYP1A1 mRNS szintjét nem befolyásolja, a metilkolantrénnel kezelt sejtek CYP1A aktivitása 25-30%-al csökken DHEA jelenlétében. A DHEA drasztikusan (50%-kal) csökkenti a CYP1A2 expresszióját metilkolantrén-indukálta sejtekben.

Az eredményekről három közös publikációt jelentettek meg.

Az „Új antioxidáns klorinvegyületek a rákterápiában” c. témát Magyar-kínai TÉT-egyezmény keretében folytatták a Yantai University, Kína kutatóival.

„A koleszterin homeosztázis és a gyógyszermetabolizmus kapcsolatának kísérletes és matematikai modellezése” c. téma (TÉT-együtműködés, partner: University of Ljubljana) kutatásainak eredményeiből két közös publikációt jelentettek meg.

Az „Inverz gázkromatográfiai adatok feldolgozása, hordozók, segédanyagok osztályozása” c. kutatási téma az MTA-Lengyel Akadémia közötti egyezményben szerepel. 2009-ben sikerült osztályozniuk a segéd- és a töltőanyagokat, valamint csökkenteni az ezek értékelésére használt referenciaanyagok számát. Eddig négy publikációt jelentettek meg.

Eredményes közös munkát végeztek a „Polaritási indikátorok és a kromatográfiai polaritás értelmezése” c. témában (együtműködő partnerintézmény: St. Petersburg University). Különböző polaritási jellemzőket értékelték és hasonlítottak össze. Az oldott anyag és oldószer kölcsönhatásokat modellezték mindkét kölcsönható partner szempontjából.

Két publikációban foglalták össze az eredményeket.

A „Különböző tulajdonságok előrejelzése szerkezet-sajátság összefüggésekkel. Modellek összevetése objektív módszerekkel” c. téma (partnerintézet: Idaho State University, Pocatello, Idaho, USA) MTA-OTKA-NSF közös projektként szerepel. A kutatások eredményeként különböző modellek összehasonlítására alkalmas kemometriai módszereket dolgoztak ki.

Két közös publikációt jelentettek meg.

Eredményes kapcsolatokat alakítottak ki a „Biológiailag aktív indol és imidazopirimidin vegyületek előállítására” c. témában a Bayer Crop Protection, Frankfurt, Németország céggel. Az együtműködés keretében új típusú heterociklusos (indol és imidazopirimidin) vegyületeket állítottak elő.

2009-ben folytatták eredményes kutatási együttműködésüket a Biopredic International (Rennes, Franciaország) biotechnológiai céggel, aminek keretében azt vizsgálják, hogy helyettesíthetőek-e a primer hepatociták HepaRG humán májsejtekkel gyógyszerinterakciós vizsgálatokban.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

Hazai pályázatok

Az NKTH Nemzeti Technológia Program keretében a 2009-2013. közötti időszakra „Intelligens nanoszenzor fejlesztése az ionháztartás folyamatainak szubcelluláris szintű diagnosztizálására (nanoSEN9)” című pályázatuk 79 M Ft támogatást nyert. A 2009. évi feladatok magukban foglalták a kifejlesztendő nanoszenzor célbajuttatási metodikájának és funkcionális neurotoxikológiai vizsgálati platformjának kidolgozását, a nanoszenzor tesztelését, valamint különböző méretű szilika nanorészecskék kapilláris elektroforézissel történő elválasztását.

Az elnyert nanoSEN9 projekt számos pozitív visszajelzést váltott ki a nyomtatott és az elektronikus médiában.

Az NKTH-Asbóth Oszkár program keretében in vivo gyógyszerinterakció screening-szolgáltatást fejlesztettek ki. A projekt címe: „Xenobiotikum Transzporter Technológiai Platform (XTTP) – Terápiás és Toxikológiai Alkalmazások”. A programot a Solvo Biotechnológiai Zrt. koordinálja.

Az „Új, gazdaságos elválasztási módszerek fejlesztése biztonságos élelmiszerkiegészítők előállítására hazai termesztésű gyógynövényekből” c. témában a Gradiens Termékfejlesztő Kft.-vel, a CycloLab Kft.-vel, a BME-vel, valamint a Delta Informatika Zrt.-vel dolgoznak közösen egy GVOP-Jedlik Ányos Program keretében. Az elvégzett vizsgálatok eredményei alapján új, hatékony, királis HPLC állófázisokat kifejlesztettek ki, amelyek rövidesen kereskedelmi forgalomba kerülnek.

A „4-, 5-, 6- és 7-(klórmethyl)indolok előállítása és alkalmazásuk indolvázis alkaloidok szintézisében” c. OTKA-téma keretében új szintézismódszert fejlesztettek ki.

NKTH-Jedlik Ányos program keretében, az „Új, gazdaságos elválasztási módszerek fejlesztése biztonságos élelmiszerkiegészítők előállítására hazai termesztésű gyógynövényekből” c. projekt feladatainak teljesítése során, 19 újonnan szintetizált (biciklusos-, aromás triciklusos-, alifás triciklusos-, illetve 4-aryl-szubsztituált-) β -laktám enantiomerpár királis elválasztását oldották meg permetil- β CD és szulfobutil- β CD keverékével, kapilláris elektroforézissel.

Nemzetközi pályázatok

A „Reversal of Multi Drug resistance” c. EU-projekt keretében három külföldi egyetemmel (University of Lisbon, Portugália, University of Reims és University of Marseille, Franciaország) folytattak közös kutatásokat. Több, multidrog-rezisztenciát gátló származék hatását mutatták ki kísérletileg.

Sikeresen fejlesztettek ki eljárást az intézetben bifunkciós, tiokarbamid alapú organokatalizátorok előállítására. Az új terméket a Sigma Aldrich Rt. az intézettel kötött szerződés keretében az intézet laboratóriumától rendeli és forgalmazza.

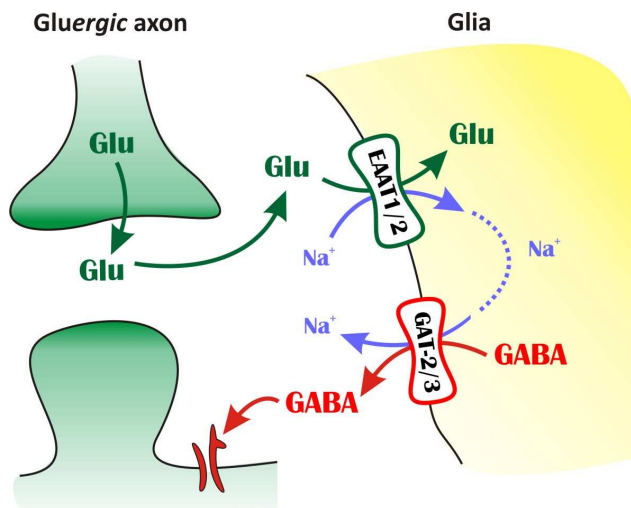
V. Az év folyamán megjelent jelentősebb publikációk, szabadalmak

1. Hajós Gy, Riedl Zs: Ring closures to heterocycles via nitrenes, CURRENT ORGANIC CHEMISTRY 13(8): 791-809 (2009)
2. Soós T: Fluorous chiral catalyst immobilization, In: Recoverable and Recyclable Catalysts (Ed. Benaglia M), Wiley, 2009, pp 179-198
3. Héja L, Barabás P, Nyitrai G, Kékesi KA, Lasztóczy B, Tóke O, Tárkányi G, Madsen K, Schousboe A, Dobolyi Á, Palkovits M, Kardos J: Glutamate uptake triggers transporter-mediated GABA release from astrocytes, PLOS ONE 4(9): e7153-1—12 (2009)
4. Monostory K, Pascussi JM, Kóbori L, Dvorak Z: Hormonal regulation of CYP1A expression, DRUG METABOLISM REVIEWS 41(4): 547-572 (2009)
5. Daragics K, Fügedi P: Regio- and chemoselective reductive cleavage of 4,6-O-benzylidene-type acetals of hexopyranosides using BH₃ THF-TMSOTf, TETRAHEDRON LETTERS 50(24): 2914-2916 (2009)

Az MTA KK Biomolekuláris Kémiai Intézetének kiemelten sikeres kutatási területe 2009-ben

Új mechanizmus az epilepszia elleni küzdelem szolgálatában

Az MTA Kémiai Kutatóközpont Neurokémiai Osztálya elsőként mutatta ki a fő idegi gátló (γ -amino-vajsav, GABA) és serkentő (glutaminsav, Glu) transzmitter rendszerek transzport-folyamatainak molekuláris szintű összekapcsolódását (Héja et al., PLoS ONE, 2009). A Glu és a GABA a központi idegrendszer fő serkentő, illetve gátló neurotranszmitter molekulái. Az idegrendszer működése szempontjából elengedhetetlen az általuk szabályozott serkentő és gátló folyamatok közötti egyensúly biztosítása. Ennek megbomlása, különösen pedig a serkentő ingerületátvitel kóros felerősödése áll számos idegrendszeri betegség, például az epilepszia vagy az ischémia hátterében. A Neurokémiai Osztály munkatársai kombinált radioaktív nyomjelzéses, képalkotó, valamint elektrofiziológiai technikák alkalmazásával demonstrálták egy új típusú Glu/GABA kicserélődési folyamat létét. A Glu/GABA cserefolyamatról kimutatták, hogy az egy olyan természetes védekező mechanizmus, amely a Glu által kiváltott serkentés hatására aktiválódik és a serkentő Glu-t gátló GABA-ra cseréli az extracelluláris térben, azaz negatív visszacsatolást teremt a fokozott aktivitás esetén, vagyis neuroprotektív hatású (1. ábra).



1. ábra. A Glu/GABA cserefolyamat modellje

A serkentő szinapszisokban felszabaduló glutaminsavat (Glu) a környező asztrociták veszik fel. A glutaminsavval kotranszportálódó Na^+ -ionok révén az asztrocitákban az intracelluláris $[\text{Na}^+]$ megnövekszik, ami maga után vonja a szintén az asztrocitákon lokalizálódó Na^+ -ion-függő GABA transzporterek fordított irányú működését (megfordulását). A GABA transzportereken keresztül az extracelluláris térbe juttatott GABA az extraszinaptikusan elhelyezkedő GABA receptorokat aktiválja.

A felismert mechanizmus kiemelkedő jelentőségű mind az alap-, mind az alkalmazott kutatás tekintetében. Az alapvető idegrendszeri folyamatok megértése szempontjából az teszi különösen fontossá a felismert mechanizmust, hogy ez az első olyan leírt folyamat, aminek révén *közvetlen kapcsolat* alakul ki az idegrendszeri gátló és serkentő ingerületátvitel között. Az alkalmazott kutatás szempontjából a mechanizmus jelentőségét az adja, hogy egy *új célfehérjét von be a gyógyszerfejlesztés célpontjai közé*. Ebben a tekintetben különösen fontos tulajdonsága a Glu/GABA cserefolyamatnak, hogy csak a fokozott serkentés hatására jelenik meg, az általa kiváltott tónikus gátlás nagysága pedig arányos a serkentés mértékével, azaz a kóros állapot súlyosságával. További előnyt jelent, hogy a szinaptikus ingerületátvitel, valamint a gliális Glu és GABA transzporterek térbelileg szoros közelsége révén a kiváltott tónikus gátlás kizárólag *in situ*, a túlzott aktivitással rendelkező régióban jelentkezik. A fenti tulajdonságoknak köszönhetően az ezen mechanizmusra ható *terápiás szerek* várhatóan rendkívül specifikusan, kevesebb mellékhatással lesznek képesek gátolni az epilepszia és más neurodegeneratív betegségek kifejlődését.

Az MTA KK Biomolekuláris Kémiai Intézet 2009. évi tudományos teljesítményének néhány mutatója

Átlagléttség:	65	Ebből kutató:	48
PHD v. kand.:	15	MTA doktora:	7
MTA levelező tag:	0	MTA rendes tag:	0
<i>Az intézethez kötődő akadémikusok száma:</i>	3		
35 év alatti, intézeti állományban levő kutatók száma:	26		

Publikációk

Az év folyamán megjelent összes (tudományos és ismeretterjesztő) publikációk száma:	48
Az év folyamán megjelent tudományos publikációk száma:	45

Tanulmány, cikk

impakt faktoros publikáció magyarul:	0	~ idegen nyelven:	37
nem impakt faktoros tudományos cikk magyarul:	1	~ idegen nyelven:	4
hazai tudományos folyóiratban magyarul:	1	~ idegen nyelven:	0
külföldi folyóiratban magyarul:	0	~ idegen nyelven:	41
nemzetközi együttműködés keretében:	34		
SCI által regisztrált folyóiratban:	37		
összesített impakt faktor:	123.202		
összes hivatkozás száma:	879	összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:	656

Könyv

könyv/monográfia magyarul:	0	~ idegen nyelven:	0
könyvfejezet (kevesebb mint 20 old.) magyarul:	0	~ idegen nyelven:	1
könyvfejezet (több mint 20 old.) magyarul:	0	~ idegen nyelven:	0
könyvfejezet magyarul:	0	~ idegen nyelven:	1
lexikoncikk: 2 ívig:	1		
tanulmánykötet szerkesztése magyarul:	0	~ idegen nyelven:	1
Tudományos ismeretterjesztő írás magyarul:	3	~ idegen nyelven:	0

Tudományos fokozat, ill. cím megszerzése:

PhD:	3.667	MTA doktora cím:	0
MTA levelező tag:	0	MTA rendes tag:	0

Szellemi alkotások védelme:

Nemzeti úton megadott oltalmak száma:	0
Megadott külföldi oltalmak száma:	0
Értékesített szabadalmak száma:	0
Szerzői jogvédelem alá tartozó alkotások száma:	0

Részvétel a tudományos és kulturális életben:**Rendezvények:**

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma:	12	~posztterek száma:	26
Hazai rendezvényen tartott tudományos előadások száma:	43	~posztterek száma:	7
ismeretterjesztő előadások száma:	4		
Tudományos rendezvények szervezése hazai:	6	nemzetközi:	1
Jelentős nyilvános kulturális esemény megrendezése:	0		

Szakértői tevékenység:

tanácsadói tevékenységek száma:	0		
egyéni szaklektori vélemény összesen:	80	ebből külföldre:	75
opponensi vélemény összesen:	10	ebből külföldre:	3
egyéb szakértői vélemény:	5	ebből külföldre:	1

Részvétel tudományos testületben

Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	3	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	1
Nemzetközi tud. bizottsági elnökség:	1	Hazai folyóirat szerk. tagság:	0
Hazai tud. bizottsági elnökség:	7	Hazai tud. bizottsági tagság:	12

Felsőoktatásban végzett tevékenység:

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma:	12		
Ebből doktori iskolákban oktatók száma:	3	Doktori iskolát vezetők száma:	0
Elméleti kurzusok száma:	11	Gyakorlati kurzusok száma:	2
TDK-t készítő hallgatók száma:	0		
Diplomamunkát készítő hallgatók száma (BSc):	0		
Diplomamunkát készítő hallgatók száma (MSc):	1		
PHD-t készítő hallgatók száma:	17		
Felsőfokú gradiális és posztgraduális oktatott órák száma:	349		

**Az MTA KK Biomolekuláris Kémiai Intézet 2009. évi tevékenységének egyéb
bemutatható jellemzői**

- Bejelentett szabadalmak, és egyéb szabadalmi jellegű alkotások száma: 2
 - a Magyarországon bejelentettek: 1
 - a nem Magyarországon bejelentettek: 1
- A kutatónők száma: 23
 - vezető beosztásokban: 6
 - nem vezető beosztásokban: 17
- A mobilitással kapcsolatban az intézetből az állásukat megtartott, munkaviszonyban levő diplomások közül hat hónapnál hosszabb időre távollevők száma: 3
 - Magyarország: 0
 - egyetemen, kutatóintézetekben: 0
 - gazdasági társaságnál: 0
 - Nem Magyarországon: 3
 - egyetemen, kutatóintézetekben: 3
 - gazdasági társaságnál: 0
- az adott intézethez érkező kutatók száma: 7
 - 1-6 hónap időtartamra: 4
 - Magyarországról: 0
 - nem Magyarországról: 4
 - 6 hónapnál hosszabb időre: 3
 - Magyarországról: 3
 - nem Magyarországról: 0
- Vállalati kapcsolatok
 - jelentősebb ipari partnerek (a kapcsolat típusa: közös K+F és kutatási megbízás):
Servier Nyrt., Richter Gedeon Nyrt., EGIS Nyrt., Teva Zrt.
 - az intézet holdudvarába tartozó kisvállalkozások száma: 7
- A társadalmi párbeszéd eredményei:
 - Az általános tudománynépszerűsítő közlemények száma: 3
 - Az intézet tevékenységét népszerűsítő rendezvények száma: 1

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

Az intézet fő kutatási feladata 2009. évben a következő volt:

- nemzetközi színvonalú tudományos kutatások végzése a nanokémia és a katalízistudomány területén, amelyek magukban foglalják nanoszerkezetű anyagok szintézisét és tanulmányozását, önszerveződő nanorétegek vizsgálatát, felületek jellemzését és módosítását, valamint heterogén katalizátorok és katalitikus reakciók kutatását, továbbá alternatív energiaforrások kutatását.

Az intézet a tudományos feladatokhoz kapcsolódóan a következő területeken fejtett ki tevékenységet:

- kutatási infrastruktúra üzemeltetése;
- részvétel a graduális és posztgraduális szakemberképzésben;
- alap- és alkalmazott kutatásokhoz szükséges módszerek és eszközök fejlesztése;
- a tudományos eredmények hasznosításának kezdeményezése és elősegítése;
- hazai és nemzetközi tudományos rendezvények szervezése;
- részvétel a nemzetközi tudományos életben és a tudományos szervezetekben.

II. Az év folyamán elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények, azok gazdasági-társadalmi haszna

Nano-medicinális kutatások

A gyógyszerhordozók fejlesztése területén végzett kutatások eredményeként, az irányított hatóanyag-leadást biztosító, sztérikusan stabilizált vezikulák szerkezetére pontos leírást adtak. A vezikulák gyógyszermolekula-komponensének kettősrétegen belüli elhelyezkedését szinkrotron sugárzás alkalmazásával határozták meg. Az ún. anomális röntgenszórás módszerével a hatóanyag-tartalom roncsolásmentes megállapítása vált lehetővé. Ezek a kísérletek a jövőben a gyógyszerkészítmények minőségellenőrzésének új lehetőségeit kínálják.

Kihasználva a cirkónium-dioxid észterezési reakciókban betöltött katalitikus szerepét, a cirkónium-dioxid nanorészecskék felületén polialmasavat kötöttek meg. Ilyen módon új, olcsó, biokompatibilis gyógyszerhordozókat kaptak.

$Mn_xZn_{1-x}Fe_2O_4$ összetételű nanoporok ^{57}Fe Mössbauer-spektroszkópiai, röntgendiffrakciós, elektronmikroszkópiai és mágneses tanulmányozása feltárta a kristályrácsot és a vasatomok lokális állapotát jellemző paraméterek, valamint a mangán koncentrációja közötti eddig nem ismert összefüggéseket.

A lipid monoréteg és antituberkulotikus hatóanyagjelöltek, valamint peptidkonjugátumaik között létrejövő kölcsönhatást tanulmányozták a lipidréteg szerkezetében bekövetkező változások nyomon követésével. Kísérleteik részletes képet adtak a vizsgált kölcsönhatásokról, lehetővé téve a vizsgált hatóanyagjelöltek minősítését. Megállapították, hogy a peptidkonjugáció számos esetben jelentősen megnöveli a hatóanyagjelöltek sejtpenetrációs képességét.

Kiegészítve más felületanalitikai módszereket (AFM, SEM), sikeresen alkalmazták az FTIR-mikroszkópiás és képalkotásos módszert kémiai módon módosított mikrostrukturált felületeken lejátszódó felületspecifikusan immobilizált molekulák azonosítására, különös tekintettel az immobilizált molekulák és a felület közötti kémiai kölcsönhatásra.

Felületmódosítási és nanoszerkezet-vizsgálatok

Az önszerveződéssel és a Langmuir-Blodgett filmmérleggel készített mono- és multimolekuláris filmeknél vizsgálták a hiszterézis jelenségét, a különböző fémionok rétegbe épülését, a szilárd hordozókon kialakított rétegek korrózió- és mikrobamegtapadás-gátló hatását. A hatékonysági adatok elemzése alapján megállapították, hogy a legkedvezőbb körülmények között kialakított LB-rétegek akkor a leghatékonyabbak, ha legalább 3, legfeljebb 7 réteg épül egymásra. A fémionok jelenlétének vizsgálata azt mutatta, hogy mind réz-, mind vashordozó esetében a vas- és a rézionok jelenléte nagymértékben megnöveli az antikorróziós hatást.

A Semmelweis Egyetem Orvosi Biokémiai Intézetével való együttműködésben nagyfelbontású mikroszkópia alkalmazásával összefüggést állapítottak meg a trombuszt alkotó fibrin litikus érzékenysége és struktúrája között.

Szintézist dolgoztak ki különböző kristályszerkezetű (rutil, illetve anatáz) nanoméretű titán-dioxid részecskék vizes közegben történő előállítására. Módszert dolgoztak ki a részecskék formulálására, aminek eredményeképpen a festékipar számára jól felhasználható formulákat (géleket, illetve diszperziókat) állítottak elő. Ezek kiválóan alkalmazhatónak bizonyultak különböző vizes bázisú festékrendszerek aktív komponenseiként, elsősorban olyan transzparens lakkokban, amelyeknek fő alkalmazási területe az UV-sugárzás elleni védelem.

Preparatív eljárást dolgoztak ki nagy koncentrációjú (100-200 ppm között), vizes közegű arany-kolloidok előállítására. Ezen kolloidok felhasználásával poláros – illetve apoláros oldószerekre kimagaslóan nagy érzékenységgű elektrokémiai szenzorokat készítettek.

Szol-gél eljárás alapján dolgoztak ki különböző összetételű, nanoszerkezetű, perovszkit-típusú mágneses anyagok ($\text{La}_x\text{Sr}_{(1-x)}\text{MnO}_3$) előállítására. Az előállított anyagok mágneses jellemzőinek vizsgálata alapján meghatározták azt az összetételt, amely a leginkább megfelelő lehet biomedicinális alkalmazások, pl. hipertermiás terápiás célra.

Szerves katalitikus kutatások

A finomkémiai és az energetikai ipar (tűzelőanyag cellák) katalitikus vonatkozású területein végzett kutatások hozzájárultak a fizikai-kémiai tulajdonságok és a reakcióképesség közötti összefüggések feltárásához, ami az anyagi összetétel és a komponensek nano-környezetének szabályozása révén új, hatékony, katalitikusan aktív anyagok előállítását tette lehetővé. Az "irányított felületi reakcióval (IFR)" előállított Pt-Sn/C katalizátoron kimutatták a Pt_3Sn -ötváltozat-fázis promotor szerepét CO és etanol elektrooxidációjában. Az IFR-val előállított Pt-Ge/C katalizátorok, a Pt-Ge kölcsönhatás miatt, nagy szelektivitást mutattak telítetlen

aldehidek alkohollá történő hidrogénezésében. Az IFR-val előállított katalizátorok tulajdonságai felülmúlták az impregnálással előállítottakét.

Elsőként mutatták ki Au-Sn/Al₂O₃ katalizátoron az ötvözet-fázis jelenlétét és a „Snⁿ⁺-Au” aktív helyek szerepét CO alacsony hőmérsékletű oxidációjában.

Az alumínium-szilikát hordozós, kis fémtartalmú, kétfémes katalizátorok aktívnak bizonyultak olajok aromástartalmának hidrogénezésében.

Az aktivált ketonok aszimmetrikus hidrogénezési reakciójának vizsgálatokor megállapították, hogy a cinchona alkaloid, mint királis módosító hozzáadására tapasztalt sebességnövekedés a rendszer belső sajátossága, a szakirodalomban felvetett katalizátor-tisztítóhatás elképzeléssel ellentétben.

Heterogén katalízis kutatások

Az alternatív energiahordozók iránti érdeklődés világszerte és hazánkban is fokozódik. Az elmúlt évben a hidrogéntechnológiák területén alkalmazható néhány heterogén katalizátor tervezésére, előállítására és vizsgálatára került sor. A hidrogén előállítása etanol vízgőzös reformálásával történt. Szintén a hidrogéntermelést célozza a víz fotokatalitikus bontása, amihez a szükséges eszközök és berendezések tervezése folyamatban van. A hidrogén tisztítására (szénmonoxid-mentesítésére) a preferenciális CO-oxidáció (PROX) biztosít lehetőséget. A hidrogént tüzelőanyag-cellákban lehet felhasználni energiatermelés céljából. Elindult a direkt metanol tüzelőanyag-cellák anód katalizátorainak a tervezése.

A PROX-reakció katalizátorának modelljeként felfogható arany egykristályfelület gázadszorpciós tulajdonságainak összegfrekvencia-keltési spektroszkópiával történő in situ tanulmányozása során kiderült, hogy bár a sima (111) felületen alacsony hőmérsékleten sincs kimutatható szénmonoxid-adszorpció, az ionbombázással durvává tett felületen széles nyomás- és hőmérséklet-tartományban viszonylag gyengén kötött CO-molekulák detektálhatók. A felületpásztázó alagútmikroszkópos vizsgálata azt mutatja, hogy az ionbombázásos durvítás hatására elsősorban néhány atomsor magasságú lépcsőkkel határolt gödrök keletkeznek, így a lépcsők éleit alkotó aranyatomok azonosíthatók CO adszorpciós helyekként. A durvított arany felületen lezajló CO adszorpció elektronspektroszkópiai tanulmányozása jelenleg folyamatban van.

Mikro- és mezopórusos anyagok kutatása

Biológiai eredetű trigliceridek hidrokonzverziójának mechanizmusát tanulmányozták trikaprilin és kaprilsav modellvegyületek alkalmazásával szénhordozós palládium (Pd/C) és promoteált molibdénoxid-alumíniumoxid (Ni,Mo/γ-Al₂O₃)-katalizátoron. Megállapították, hogy a reakció két konzekutív lépésben megy végbe: első lépésben a trikaprilin hidrogenolízise játszódik le kaprilsavvá és propánná, amit a kaprilsav intermedier hidrogénező oxigénmentesítése követ a kívánt szénhidrogén terméké. Ez utóbbi reakciólépés a folyamat sebességmeghatározó lépése, amelyről kimutatták, hogy a két eltérő katalizátoron különböző reakcióutakon megy végbe. A Pd/C-katalizátoron a kaprilsav C₇-alkánt és szénmonoxidot eredményező dekarbonileződése bizonyult az elsődleges reakcióútnak, míg a (Ni,Mo/γ-Al₂O₃)-katalizátoron a kaprilsav konzekutív hidrogénaddíciós és dehidrogénezési lépéseken keresztül víz keletkezése közben alakul át C₈ alkén és alkán termékékké. Az eredmények jelentős mértékben járulnak hozzá a növényolajok heterogén katalitikus hidrokonzverziójában alkalmazható katalizátorok kiválasztási stratégiájának kialakításához.

A kutatási eredményeket egy ipari katalizátor kifejlesztésénél hasznosítják. A kutatás-fejlesztés említett és korábbi eredményeire alapozva, a MOL Zrt. 200 000 t/év kapacitású növényolaj-feldolgozó üzem építését tervezi. A kutatás, a létesítendő üzem révén, hozzájárul az EU biohajtóanyag direktívájának magyarországi teljesítéséhez.

Felületi szerkezetek kutatása

A tárgyévben fontos eredményeket értek el a metanol, az etanol és a dimetil-éter katalitikus vizsgálatában. A szénhordozó felületére felvitt Pt-fémek nanométer dimenzióban kitűnő katalizátoroknak bizonyultak a hidrogén előállításában. A metanolból történő hidrogénképződést elősegítette a különböző hordozókra felvitt aranykatalizátor is. A káliummal promotált Au(111) felület nagymértékben segítette a széndioxid aktiválását és redukcióját.

Elektron-, foton- és ion-spektroszkópiával (AES, XPS, LEIS, RAIRS), valamint STM-mel tanulmányozták a kétfémes nanoszerkezetek (Au-Mo, Au-Rh és Rh-Mo) képződését és fizikai-kémiai sajátosságait egykristály titán-dioxid felületen. A Mo adatom elősegítette az arany nanoklaszterek szétszakadását. A Rh viszont a nanoklaszter térfogatát növelte meg. Ennek eredményeképpen az arany vált dominánssá a felületen. A Rh-Mo bimetalikus réteg esetében ötvözetképződést figyeltek meg. Mindezek az eredmények energetikai szempontból hasznosíthatók.

Nukleáris spektroszkópiai vizsgálatok

Új típusú, korábban nem ismert, Fe-Sn biner, illetve kristályos formában nem létező Sn-Co-Fe terner ötvözeteket állítottak elő a Glasgow-i Caledonia Egyetemen együttműködve, elektrokémiai leválasztás útján. Az anyagok hatásos korrózióvédelmi galvánbevonatoknak bizonyultak. Röntgendiffrakciós és Mössbauer-spektroszkópiai vizsgálatok alapján megállapították, hogy ezek a rétegek amorfok és ferromágnesesek. Az ötvözetek akkumulátorok elektródjaiként is gazdaságosan alkalmazhatók lehetnek. ¹¹⁹Sn Mössbauer-vizsgálatok alapján megállapították, hogy az (Sn-Co-Fe)-terner ötvözetekben az ón olyan transzferált, hiperfinom mágneses teret érzékel, aminek az alapján az amorf ötvözet rövidtávú rendezettsége jellemezhető.

Sikerült amorf állapotú vas képződését előidézniük nagyenergiájú, nehézion-besugárzás segítségével elektrokémiai úton előállított vas-vékonyrétegekben. Azt tapasztalták, hogy az amorfizáció mértéke jelentős dózis- és ionfüggést mutat.

Pozitronannihilációs spektroszkópiai módszerekkel bizonyították, hogy a gyógyszerészeti hordozóanyagok összetételüktől függően, öregedési tulajdonságai jelentősen befolyásolják a kiserelt gyógyszer hatóanyagleadási tulajdonságait.

Karbon nanocsövek β -vas vas-ftalocianin pirolízisével történő előállítása lépéseinek vizsgálata során, sikerült olyan előállítási paramétereket találniuk, ahol a rétegek közé beépülő oxigén speciszek közül csak olyan lép fel, ami hőmérsékletfüggő spinátmenetet mutat. Ennek a lehetséges térbeli konfigurációjára megfelelő magyarázatot adtak.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Hazai kapcsolatok

Mind a kutatás, mind az oktatás területén eredményes együttműködéseket folytattak a hazai egyetemekkel, kiemelten a BME Természettudományi Karával, ill. a BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Karával, valamint az ELTE Természettudományi Karával.

A BME Vegyészmérnöki Karán például rendszeresen tartottak emelt szintű, speciális laboratóriumi gyakorlatokat a gyógyszer-technológia oktatásához kapcsolódó témakörökben.

A Mössbauer-spektroszkópiai vizsgálatok területén számos egyetemi és akadémiai kutatócsoporttal alakítottak ki gyümölcsöző kapcsolatokat. Így például partnerük az ELTE Kémiai Intézet, Fizikai Intézet, Földrajz- és Földtudományi Intézet, Biológiai Intézet; a Semmelweis Egyetem Egyetemi Gyógyszertár; a Szegedi Egyetem, Kémiai Intézet, az MTA Izotópkutató Intézet és a Pannon Egyetem Kémiai Intézet.

A hazai kutatóhelyek közül kiemelendők az MTA Izotópkutató Intézettel folytatott munkák, amelyek a felületi ön állapotának hordozós Sn, Sn-Pt és Sn-Au katalizátorokban Mössbauer spektroszkópia segítségével, „*in situ*” körülmények között történő meghatározására vonatkoznak. A vizsgálatok eredményei elsőként szolgáltattak bizonyítékot arra, hogy Al₂O₃-hordozós Sn-Au katalizátorokban ötvözet típusú részecskék léteznek. Sikerült az Sn(II) ↔ AuSn és Sn(IV) ↔ AuSn reverzibilis átmeneteket jelentős arányban, szimultán kimutatni. 2009-ben két közös közleményük jelent meg. Az „Inverz oxid/fém határfelületek genezise, jellemzése és alkalmazása model rendszerben” c. témában az arany/átmenetifém-oxid katalizátorok működési mechanizmusának jobb megértését célzó vizsgálatok eredményeiről is közös publikációban számoltak be.

Nemzetközi kapcsolatok

Az intézetnek igen széleskörű és eredményes nemzetközi kapcsolatai vannak mind európai, mind tengerentúli kutatóhelyekkel.

A „Mikro- és mezopórusos szilikátok szerkezeti és savas tulajdonságainak módosítása és alkalmazásuk katalizátor és adszorbens anyagként” c. téma keretében (MTA-BTA egyezmény) az Institute of Organic Chemistry, Bulgarian Academy of Sciences, Szófia intézménnyel együttműködve, három tudományos publikációt jelentettek meg.

A „NO₂ bomlása Fe-tartalmú zeolitokon” c. téma (együttműködő partner: National Institute of Chemistry, Ljubljana, Szlovénia) közös eredményeiből előadást állítottak össze, amelyet nemzetközi konferencián mutattak be.

A „Rézfelületek korróziója esővízes kezelésekre hatására” c. témában a Polytechnic School of the São Paulo University, Brazília intézménnyel folytatott együttműködés eredményeiről egy közös folyóiratcikket jelentettek meg.

Az „Elektro-katalizátorok fejlesztése direkt metanol tüzelőanyag cellákhoz” c. témában (partnerintézet: Instituto de Catalisis y Petroleoquímica, CSIC, Spanyolország), MTA-CSIC

kétoldalú egyezményes együttműködés keretében új módszert dolgoztak ki Me-Pt/C elektrokatalizátorok előállítására (Me: Sn, Ge, Pb), amelynek alkalmazásával az aktív szénen található Pt-fázis szelektíven módosítható.

Az „Immobilizált heteropolisavak (HPA) és fémorganikus vegyületek alkalmazása szerves szintézisekben” c. témában folytatott együttműködés során (partner: Boreskov Institute of Catalysis SB RAS, Novoszibirszk, Oroszország) az Orosz-Magyar Tudományos Akadémia közötti egyezmény keretében megállapították, hogy a hordozón rögzített heteropolisavak hatásosan alkalmazhatók katalizátorként oxidációs reakciókban. A HPA-katalizátor stabilitását jelentősen befolyásolja a rögzítéshez alkalmazott felületi amincsoportok koncentrációja és típusa. A heteropolisav káros kioldódása annál kisebb, és ezért aktivitása annál nagyobb, minél nagyobb a rögzítéshez alkalmazott aminvegyület szénláncossza. Egy, az együttműködés eredményeként létrejött közleményt egy nemzetközi folyóirat már elfogadott, egy további közlemény előkészületben van.

Az „Elektro-katalizátorok fejlesztése direkt metanol tüzelőanyag cellákhoz” c. téma kutatásait (együttműködő partner: Institute of Catalysis and Petrochemistry, Madrid, Spanyolország) a Spanyol-Magyar, MTA-CSIC egyezmény keretében kezdték el 2009-ben. A tervezett projekt új típusú, többkomponensű katalizátorok fejlesztésére irányul direkt metanol tüzelőanyagcellák (DMFC) katódjá és anódja számára. Elsődleges szempont a katalizátorok nemesfémtartalmának csökkentése.

Magyar-argentin TÉT-együttműködés során a „Fémkarbid alapú katalizátorok elméleti és kísérleti vizsgálata” c. témában (együttműködő partnerintézmény: Departamento de Física – Universidad Nacional del Sur, Buenos Aires, Argentína) a metanol adszorpcióját és disszociációját vizsgálták DFT-spektroszkópiával $\text{Mo}_2\text{C}(100)$ felületen. Két közös publikációt jelentettek meg és egy nemzetközi konferencián tartottak előadást.

Az „Oxid-fém határátmenetek tanulmányozása pásztázó alagútmikroszkópiával és szinkrotron-sugárzással gerjesztett fotoelektron-spektroszkópiával” c. egyezményben foglalt témában (együttműködő partner: Department of Thin Films, Institute of Physics, Academy of Sciences of Czech Republic) sikeresen állítottak üzembe egy Q-PLUS típusú, STM-AFM kombinált működésre alkalmas berendezést. Sikerült atomi felbontásban AFM-képet felvenni $\text{TiO}_2(110)$ felületéről.

Magyar-francia TÉT-egyezmény keretében a „Fém-komplexek alagútáram-indukált disszociációjával előállított nanométer léptékű határfelületek tanulmányozása” c. téma kutatásainak során (együttműködő partner: Institut Carnot de Bourgogne, CNRS-Université de Bourgogne) $\text{TiO}_2(110)$ egykristály felületen sikerült adszorbeált $\text{Mo}(\text{CO})_6$ molekulákat azonosítani STM-mel. Megmutatták, hogy a $\text{TiO}_2(110)$ felületen létrehozott nanopötty alapvetően szigetelő jelleget mutat, viszont a $\text{Cu}(110)$ felületen végzett hasonló mérések a nanopöttyök vezető jellegre utalnak.

Az MTA-Orosz Tudományos Akadémia közötti együttműködés keretében, a „Növényi és bakteriális metabolitok fémekkel való kölcsönhatásának vizsgálata” c. témában (együttműködő partnerintézmény: Orosz Tudományos Akadémia Biokémiai és Növényélettani Intézet, Szaratov, Oroszország) végzett kutatások során, sikerrel alkalmazták a Mössbauer-spektroszkópiát a környezeti tényezők kémiai hatásának vizsgálatára.

Megvizsgálták és leírták a vas(III) komplex képződésének és redukciójának mechanizmusát az indol-3-karbonsavat, ecetsavat, propionsavat, illetve butánsavat tartalmazó vizes oldatokban. A glutamin szintetáz enzim ^{57}Co emissziós Mössbauer-vizsgálatával megállapították, hogy a két kation-kötőhely nem azonos affinitással köti meg a Co^{2+} -ionokat. 2009-ben két közös cikket publikáltak.

Magyar-francia Tét-együttműködés során a „Kobaltát perovszkitok mágneses fázisátalakulásainak és növények vasfelvételi mechanizmusainak vizsgálata Mössbauer-spektroszkópiával” c. témában (együttműködő partnerintézmény: CNRS Le Mans-i Szilárdtestfizikai Kutatólaboratóriuma, Franciaország) a kolosszális mágneses ellenállást mutató mintasorozatokon részletes, hőmérsékletfüggő Mössbauer-méréseket végeztek. Elemezték az anyagok elektromos és mágneses fázisátalakulásait mind az összetétel, mind a hőmérséklet függvényében.

Az eredményekről egy nemzetközi konferencián közös előadásban számoltak be.

Magyar-cseh Tét-egyezmény keretében végzett alacsony hőmérsékletű és mágneses térben történő Mössbauer-mérésekről 3 konferencia-előadásban számoltak be.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

Hazai pályázatok

Az NKFP-„Nanodrug” Jedlik Á. pályázatukban a KPS Orvosi Biotechnológiai és Egészségügyi Szolgáltató Kft. irányításával, hat konzorciumi partner K+F-munkája kapcsolódik össze. Az elért eredményekről a KPS, a Semmelweis Egyetem Patológiai Intézete és a Vichem Chemie Kutató Kft. kutatóival közösen három tudományos előadást tartottak.

A témában 2009-ben, az irányított hatóanyag-leadást biztosító, hagyományosan használt, vezikuláris rendszerek sajátosságainak feltárására, új módszereket vezettek be. A hatóanyag-leadást biztosító más nanorendszerek előállításának első lépéseit megtették.

Megkezdték az egy- és többfunkciós szilika nanorészecskék kidolgozását. Az előállítással párhuzamosan fejlesztik az elválasztási és jellemzési módszereket. Előkészületeket folytattak nagyon kis vezikulák és megfelelően funkcionális dendrimerek előállítására is. Pontos leírást adtak az irányított hatóanyag-leadást biztosító, sztérikusan stabilizált vezikulák szerkezetére.

Az NKFP-METANANO-projekt keretében különböző kémiai redukciós és elektrokémiai módszerekkel előállított, arany nanorészecskékkel borított, interdigitális elektródokat, így gáz- és gőzérzékelő impedancia-szenzorokat fejlesztettek. Impedanciaspektroszkópiai mérésekkel megállapították, hogy a formaldehiddel redukált, glükózzal stabilizált arany szol kiválóan alkalmas szenzorként. Az anyag poláros oldószergőzők hatására több nagyságrendű ellenállás- és kapacitásváltozást szenved, a változás frekvenciafüggő. A szenzor gyors válaszidejű és reverzibilis. További előnye, hogy viszonylag kis felületi borítottság esetén is alkalmazható, így a kis anyagszükséglet miatt, alkalmazása igen gazdaságos.

Az NKFP-NANOLAKK: „Új generációs nanobevonatok a versenyképes festékiparért” c. projektben sikerült kifejleszteniük egy olyan korróziógátló adalékot, amelyet vizes bázisú

festékekbe téve, a száradás során bekövetkező korróziót vissza lehet szorítani. Az adalék hatásosságát a konzorciumi partnerek bizonyították, a legkedvezőbb tulajdonságú termékből laboratóriumi leirat alapján üzemi előállítás történt.

Az NKFP-ALMAACID: „L-almasav alapú biopolimerek előállítása és azok felhasználási lehetőségei a gyógyászatban és az élelmiszeriparban” c. projekthez kapcsolódóan 30 különböző, homo- és kopolimer előállítására, vizsgálatára került sor. A vizsgálatok során mérték a telítetlen anyagtartalmat, a savasságot, a pH-függő stabilitást és a származékkészítési lehetőségeket.

A „Környezetvédelmi és biztonságtechnikai célú, nemesfém nanoporokon alapuló innovatív termékek (szűrők, szenzorok, katalizátorok) fejlesztése” c. NKFP-projekt 2009-ben végzett munkájának legfontosabb eredménye annak felismerése, hogy aktív szén és új típusú, szén-nanocső-hordozós Pd-katalizátorok hatékonyan alkalmazhatók ketonok szelektív hidrogénezésében a finom kémiai ipar számára fontos alkoholok előállítására.

A „Katalitikus hidrogéntermelés megújuló energiaforrásokból” c. OTKA-projekt keretében magnézium spinell alapú, többkomponensű katalizátorokat fejlesztettek ki etanol vízgőzös reformálására. Nagy hidrogénhozam mellett, sikerült lecsökkenteni a szénlerakódások képződésének mértékét. Nagyáteresztő-képességű berendezést terveztek fotokatalitikus vízbontás vizsgálatára.

Az „Innovatív bio-energetikai és környezetvédelmi eljárás és prototípus-fejlesztés” c. GOP-pályázat keretében laboratóriumi, kísérleti katalitikus berendezést terveztek és kiviteleztek, valamint katalizátort fejlesztettek ki pirolízis olajok magas hőmérsékletű vízgőzös reformálásához. Katalitikus kísérleteket végeztek a pirolízis olajok összetételére jellemző aromás, oxigéntartalmú és nitrogéntartalmú modellvegyületekkel. Az eredményeket a megfelelő katalizátor kiválasztásához, ill. a tényleges pirolízis olaj vízgőzös reformálásához szükséges katalizátor megtervezéséhez használták fel.

Az „Új biológiai szennyvíztisztító berendezések és technológia kutatása és fejlesztése” (Nemzeti Technológia Program – Élhető, fenntartható környezet) c. program 2009. évi munkáinak során elkészítették egy félüzemi, kísérleti, szennyvíztisztító berendezés kiviteli terveit. Kiválasztották az egyes részegységeket, és elkezdték a beruházásukat.

Az NKTH-OTKA-támogatással végzett „Katalitikus és gázszenzorikai 2D modellrendszerek nanoléptékű tanulmányozása” c. téma kutatásainak során arany és ródium egymást követő párologtatásával a két fém krisztallizációját tanulmányozták $\text{TiO}_2(110)$ felületen alagútmikroszkópiai és ionszórásos-spektroszkópiai módszerekkel. Kidolgoztak egy módszert, amellyel 50-5000 atomból álló Rh-Au mag-héj nanoklasztereket tudnak létrehozni előre meghatározott méretben és felületi koncentrációban. A Rh-Mo bimetallikus rendszer esetében ötvözetképződést figyeltek meg.

Az eredményekről eddig két dolgozatban számoltak be.

A „Szénhidrogének és alkoholok reakciójának katalitikus és felületkémiai vizsgálata” c. OTKA-projekt kutatásaiban elsősorban a hidrogén előállítására koncentráltak. A szén- és oxid-hordozóra felvitt platinafémeken azt találták, hogy az alkoholokból hidrogén is képződik, aminek mértéke a hordozó minőségétől függ. Ezen a katalizátoron megvizsgálták a

dimetil-éter átalakulását és bomlását is. Tanulmányozták továbbá Au(111) felületen a kálium adalékolásának hatását a CO₂ aktiválására és disszociációjára. A folyamatok elemi lépéseit elektronspektroszkópiai módszerekkel is követték. Elektron-, foton- és ionspektroszkópiával tanulmányozták a kétfémes nanoszerkezetek képződését és fizikai-kémiai sajátosságait titán-oxid felületen. A pályázat keretében eddig hét folyóiratcikk született.

A „Szerkezetváltozások hatása kondenzált fázisok szabadterefogatára: pozitronannihilációs vizsgálatok” c. OTKA-témában folytatták gyógyszer technológiailag fontos polimerekben az öregedés és a vízfelvétel hatásainak vizsgálatát pozitronannihilációs és hagyományos polimervizsgáló módszerek kombinációjával. Megállapították, hogy összefüggés van a hordozó szabadterefogatának változása és a tablettá hatóanyagkibocsátási tulajdonságai között. Tabletták bevonataként alkalmazott Na-alginát filmek adalékolásának a hatását vizsgálták. Megállapították, hogy laktóz hatására a filmek szerkezete erősen megváltozik. Pozitronannihilációs spektroszkópiai módszerekkel bizonyították, hogy a gyógyszerészeti hordozóanyagok összetételüktől függő öregedési tulajdonságai jelentősen befolyásolják a kisserelt gyógyszer hatóanyagleadási tulajdonságait.

Nemzetközi pályázatok

Az EXCELL „Exploring Cellular Dynamics at Nanoscale” FP7-projekt keretében 9 európai és egy izraeli partnerrel dolgoznak együtt. Az eredmények megvitatására félévi rendszerességgel megtartott szakmai konzultációkon kerül sor.

Az elmúlt évben kidolgozták a mikroelektrodák felületének kolloidkémiai, azaz nanorészecske-megkötődésen alapuló módosítását. A Dán Műszaki Egyetemmel folytatott együttműködésben a kifejlesztendő „lab-in-a-cell” folyadékcellák biokompatibilitását növelő felületmódosítási stratégiákat alakítottak ki.

A COST D33: „Nanoscale electrochemical and bioprocesses (corrosion) at solid-aqueous interfaces of industrial materials” c. együttműködés keretében a Duisburg-Essen University, Németország kutatóival hoztak létre szoros kapcsolatokat a mikrobiológiai korrózió témájában.

Az EU-FP7 N2P-projektjének keretében vertikálisan rendezett szénnanocső-erdővel borított elektródok szuperkondenzátorként történő alkalmazását vizsgálták. Kidolgozták a szuperkondenzátorok elektrokémiai módszerekkel történő minősítését. Vizsgálták a különböző elektrolitok hatását a kondenzátorok működési paramétereire, így az energiasűrűsége és teljesítménysűrűsége. A kísérletek alapján egyelőre 4-10 F/g specifikus kapacitást sikerült elérni, míg a maximális teljesítménysűrűség > 50kW/kg.

V. Az év folyamán megjelent jelentősebb publikációk, szabadalmak

Publikációk

1. Paszternák A, Felhősi I, Pászti Z, Kuzmann E, Vértes A, Kálmán E, Nyikos L: Surface analytical characterization of passive iron surface modified by alkyl-phosphonic acid layers, *ELECTROCHIMICA ACTA* 55: 804-812 (2009)
2. Csanády A, Kálmán E, Konczos G (eds.): Bevezetés a nanoszerkezetű anyagok világába, ELTE Eötvös Kiadó, Budapest, 2009, p. 313
3. Tompos A, Margitfalvi JL, Szabó EGy, Pászti Z, Sajó I, Radnóczi Gy: Role of modifiers in multi-component MgO-supported Au catalysts designed for preferential CO oxidation, *JOURNAL OF CATALYSIS* 266(2): 207-217 (2009)
4. Pászti Z, Gucci L: Amino acid adsorption on hydrophilic TiO₂: A sum frequency generation vibrational spectroscopy study, *VIBRATIONAL SPECTROSCOPY* 50(1): 48-56 (2009)
5. Lónyi F, Kovács A, Szegedi Á, Valyon J: Activation of hydrogen and hexane over Pt,H-mordenite hydroisomerization catalysts, *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C* 113(24): 10527-10540 (2009)
6. Kiss J, Óvári L, Bugyi L, Berkó A: Characterization of Au-Rh and Au-Mo bimetallic nanoclusters on TiO₂(110): A comparative study, *REACTION KINETICS AND CATALYSIS LETTERS* 96(2): 391-396 (2009)
7. Tolmacsov P, Gazsi A, Solymosi F: Decomposition and reforming of methanol on Pt metals supported by carbon Norit, *APPLIED CATALYSIS A-GENERAL* 362(1-2): 58-61 (2009)
8. Kuzmann E, Szalay R, Vértes A, Homonnay Z, Pápai I, de Chatel P, Klencsár Z, Szepes L: Observation and interpretation of 157.5 T internal magnetic field in Fe[C(SiMe₃)₃]₂ coordination compound, *STRUCTURAL CHEMISTRY* 20(3): 453-460 (2009)
9. Onyestyák Gy, Bóta A: Sorption dynamics of N₂ and O₂ in carbon monoliths from spruce, beech and oak affected by activation, *MICROPOROUS AND MESOPOROUS MATERIALS* 120(1-2): 84-90 (2009)
10. Tálas E, Margitfalvi JL, Egyed O: Additional data to the origin of rate enhancement in the enantioselective hydrogenation of activated ketones over cinchonidine modified platinum catalyst, *JOURNAL OF CATALYSIS* 266(2): 191-198 (2009)

Szabadalom

Bóta A, Varga Z, Molnár M, Kálmán E: Anisotropic nanoparticles: preparation process and their use as quantumdots in liquid crystals (KNST 2 00067/KSU.336)

Az MTA KK Nanokémiai és Katalízis Intézetének kiemelten sikeres kutatási területei 2009-ben

„Nagy áteresztőképességű” reaktorrendszerek a heterogén katalízis kutatás szolgálatában

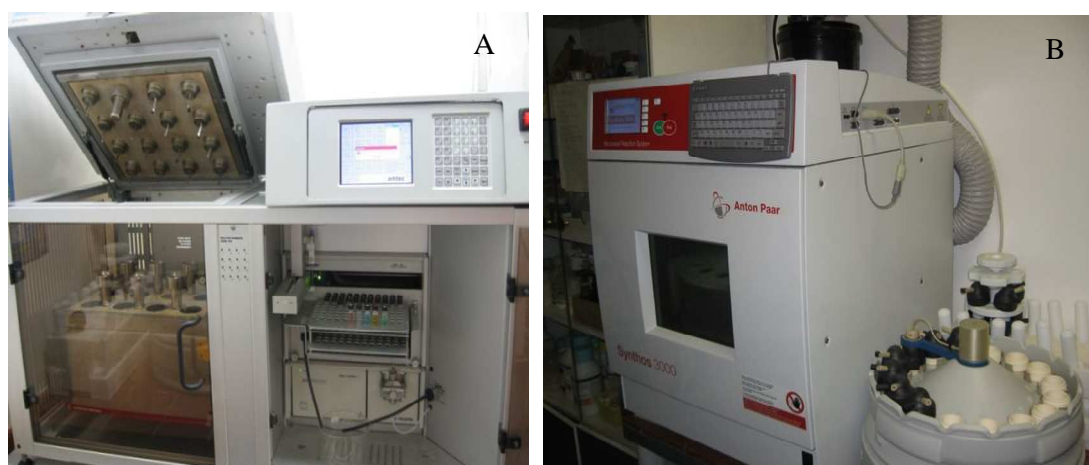
Az úgynevezett “nagy áteresztőképességű” reaktorrendszerek alkalmazásával eredményesen optimalizáltak többkomponensű katalizátort alkalmazó kémiai átalakulásokat. A módszer hatékonyságát a következő néhány eredmény mutatja be.

Kísérleteket folytattak nemesfémment nem tartalmazó katalizátor és katalitikus eljárás fejlesztésére hidrogén előállításához bioetanol vízgőzös reformálásával. Kimutatták, hogy a Cu-, Co-, Ni-, Pt-, Ce-, Zr-, Zn-, La- és T-komponensekből összeállítható, oxidhordozós ($\text{MgO}/\text{Al}_2\text{O}_3$) katalizátor kompozíciók közül a cériummal és molibdénrel promoveált, 10-10 tömeg % Ni- és Co-tartalmú katalizátorok a legaktívabbak.

Új, energiahatékony és környezetkímélő eljárást fejlesztettek ki dízelolajnak a levegő oxigénjével enyhe körülmények között (alacsony hőmérséklet és nyomás, valamint rövid reakcióidő) végzett katalitikus oxidatív kéntelenítésére mikrohullámú reaktor alkalmazásával. Az eljárás lehetővé teszi a kéntartalom csökkentését az állandóan szigorodó követelményeknek megfelelő alacsony szintre. Az új katalizátor olcsó, az eljárásban alkalmazott oldószer pedig újra felhasználható, így nem terheli a környezetet. Az olajból eltávolított kén is hasznosítható. A jelenlegi olajfinomítói technológiához képest az új eljárás további előnye, hogy kiküszöböli a drága hidrogén alkalmazását.

A finomkémiai ipar és a gyógyszeripar szempontjából fontos, kemo- és enantioszelektív heterogén katalitikus hidrogénezési reakciókat vizsgáltak folyadék fázisban. Tanulmányozták a katalizátor típusa, összetétele és a reakciókörülmények (hőmérséklet, nyomás, koncentráció, oldószer) hatását az aktivitásra és a reakciók szelektivitására. Különböző alumínium-oxid, szilícium-dioxid és aktívszén-hordozós Pt-, PtSn-, PtGe-, PtRe-, Pd-katalizátorokat állítottak elő, melyek igen nagy szelektivitást mutattak telítetlen aldehidek, aromás ketonok, észterek hidrogénezésében, valamint az α -ketoészterek enantioszelektív hidrogénezésében.

Az ipari katalizátoroknál nagyobb aktivitású és szelektívusú, különböző elemekkel módosított rézalapú ($\text{CuO-ZnO-Al}_2\text{O}_3$) katalizátorokat fejlesztettek ki alkoholok előállítására zsírsav-észterek hidrogenolízisével. A munka célja az volt, hogy kiváltsák a mérgező krómot tartalmazó, ipari katalizátort. A katalizátor mechanikai szilárdsága és savtűrő képessége a jelenleg alkalmazott ipari katalizátorénál nagyobb.

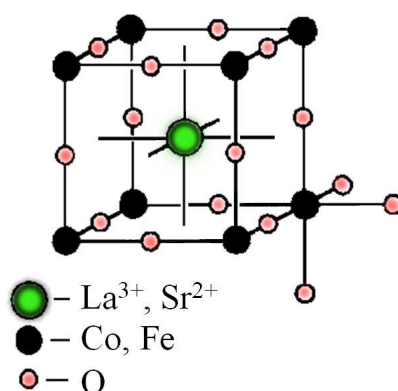


1. ábra. „Nagy áteresztőképességű” reaktorrendszer (A) a katalitikus hidrogénezés és (B) a mikrohullámú oxidatív kéntelenítés vizsgálatához.

Kémia és mágnesség találkozása: az ezerarcú perovszkit

Ritka és ámulatba ejtő az a sokszínűség, ami a különböző összetételű, de lényegében egyazon kristályszerkezet-típushoz sorolható perovszkit vegyületek tulajdonságait jellemzi. Az immár több évtizede intenzíven tanulmányozott, legegyszerűbb esetben ABO_3 összegképlettel jellemezhető perovszkit család tagjai között találunk például ferroelektromos ($BaTiO_3$), antiferroelektromos ($PbZrO_3$), ferromágneses ($BiMnO_3$), antiferromágneses ($LaFeO_3$) vagy éppen egyszerre ferroelektromos és antiferromágneses ($BiFeO_3$) vegyületet is. Többek közt e sokszínűségnek köszönhetően a perovszkit szerkezetű oxidok kutatása a természettudomány és az arra épülő technika fejlődésének egyik meghatározó motorja: a perovszkitok vizsgálata vezetett el az anyag olyan, korábban nem ismert, alapvetően új tulajdonságainak felfedezéséhez is, mint például a magashőmérsékleti szupravezetés (először a $(La,Ba)_2CuO_4$ és az $YBa_2Cu_3O_7$ perovszkitok kapcsán 1986-ban és 1987-ben), illetve a kolosszális mágneses ellenállás (először a $La_{2/3}Ba_{1/3}MnO_x$ vegyületben 1993-ban). A perovszkitok azonban nem csupán sokrétű és különleges elektromos és mágneses tulajdonságaiknak köszönhetően, de ionvezető képességük révén is a tudományos és technikai érdeklődés középpontjában állnak: például a $(La,Sr)(Co,Fe)O_3$ összetételű perovszkitokat oxigénion-vezető képességük kapcsán a nagy hatásfokú és egyben környezetbarát villamosenergia-termelés lehetőségét ígérő szilárd oxidos tüzelőanyag-elemek lehetséges katód-alapanyagaként is, és a kémiai energiát felszabadító villamos erőművek üvegházhatású gázkibocsátásának csökkentését lehetővé tevő gázsűrők alapanyagaként is intenzív érdeklődés övezi.

Az MTA Kémiai Kutatóközpont Nukleáris Kémiai Laboratóriuma hazai és nemzetközi együttműködés keretében az elmúlt években kiemelt figyelmet fordított a fent említett $(La_{1-x}Sr_x)(Co_{1-y}Fe_y)O_3$ összegképlettel jellemezhető perovszkit-család tagjaival kapcsolatos kutatásokra. A mindenekelőtt ^{57}Fe Mössbauer-spektroszkópiai, elektromos ellenállás, mágneses szuszeptibilitás és mágneses ellenállásváltozás mérésekre épülő vizsgálataik elsősorban arra irányulnak, hogy megállapítsák a szerkezetet felépítő kationoknak (2. ábra), illetve azok elrendeződésének a szerepét a perovszkit mágneses szerkezetének, valamint különleges mágneses és vezetési tulajdonságainak kialakításában.



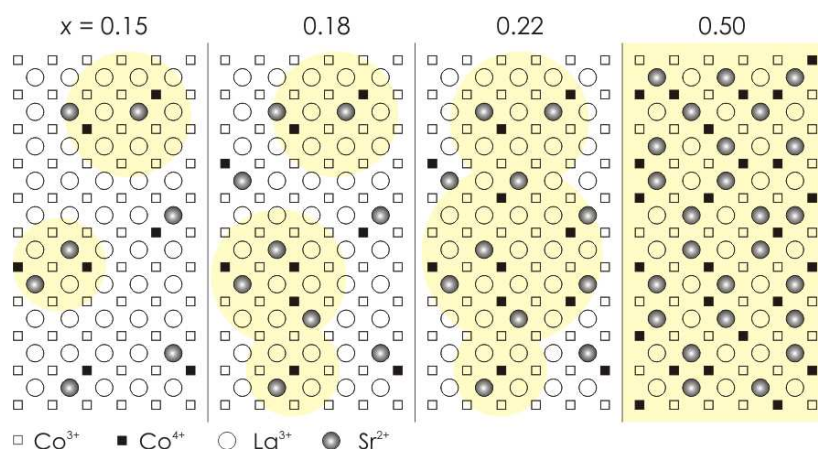
2. ábra. A különböző atomok elhelyezkedése a $La_{1-x}Sr_xCo_{1-y}Fe_yO_3$ perovszkit szerkezetben.

A $La \rightarrow Sr$ csere hatására a nem mágneses, szigetelő $LaCoO_3$ ferromágneses fémmé válik, amennyiben a Sr-koncentráció az $x \approx 0,18$ értéket meghaladja. Munkájuk során egyrészt azt vizsgálták, hogy a $Co \rightarrow Fe$ helyettesítés miképpen változtatja meg a $La_{1-x}Sr_xCoO_3$ ($x \approx 0,2$)

vegyület mágneses szerkezetét, valamint makroszkopikus mágneses és vezetési tulajdonságait, másrészt szilárdtest-kémiai úton előállított $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Co}_{0,975}^{57}\text{Fe}_{0,025}\text{O}_3$ mintasorozat vizsgálata útján fel kívánták deríteni a $\text{La} \rightarrow \text{Sr}$ helyettesítésnek a lokális elektromos és mágneses szerkezetre kifejtett hatását.

Eredményeik alapján rámutattak, hogy a $(\text{La},\text{Sr})(\text{Co},\text{Fe})\text{O}_3$ összetételű perovszkitok szerkezetét olyan paramágneses szigetelő és ferromágneses vezető tartományok keveredése jellemzi, melyek koncentrációja és mérete a Sr^{2+} -, Fe^{3+} - és O^{2-} -ionok koncentrációjának függvénye (3. ábra). Azonosították a vasatomok szerepét a mágneses szerkezet formálásában. Egyrészt a kobalt helyét elfoglaló Fe^{3+} -ionok hatására a környező, eredetileg paramágneses Co^{3+} -ionok – elektronszerkezetük megváltozása következtében – diamágneses állapotba kerülnek, ami oly módon vezet a ferromágneses tartományok felaprózódásához, mintha azokat diamágneses atomokkal hígítottuk volna fel. Nagyobb vaskoncentrációk ($y \geq 0,1$) esetében ugyanakkor jelentőssé válik a szomszédos Fe^{3+} ionok között fellépő erős antiferromágneses kölcsönhatás, ami alacsony hőmérsékleten spinklaszter-üveg mágneses szerkezet kialakulását eredményezi. A fenti két hatást figyelembe véve sikerült értelmezniük a $\text{Co} \rightarrow \text{Fe}$ helyettesítés hatására a $(\text{La},\text{Sr})(\text{Co},\text{Fe})\text{O}_3$ összetételű perovszkitok mágneses és elektromos vezetési tulajdonságaiban beálló változásokat.

Különböző Sr-koncentrációjú $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Co}_{0,975}^{57}\text{Fe}_{0,025}\text{O}_3$ minták ^{57}Fe Mössbauer-spektroszkópiai vizsgálata alapján kimutatták, hogy a $\text{La} \rightarrow \text{Sr}$ helyettesítés hatása lokálisan érvényesül, növeli a ferromágneses tartományok koncentrációját (3. ábra), de nem befolyásolja érdemben a fennmaradó paramágneses tartományok elektronszerkezetét.



3. ábra. Elképzelés az összefüggő ferromágneses atomklaszterek $\text{La}^{3+} \rightarrow \text{Sr}^{2+}$ csere hatására bekövetkező kialakulásáról $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Co}_{0,975}^{57}\text{Fe}_{0,025}\text{O}_3$ vegyületben.

Az MTA KK Nanokémiai és Katalízis Intézet 2009. évi tudományos teljesítményének néhány mutatója

Átlagléttség:	67	Ebből kutató:	60
PHD v. kand.:	28	MTA doktora:	9
MTA levelező tag:	0	MTA rendes tag:	0
<i>Az intézethez kötődő akadémikusok száma:</i>	3		
35 év alatti, intézeti állományban levő kutatók száma:	25		

Publikációk

Az év folyamán megjelent összes (tudományos és ismeretterjesztő) publikációk száma:	83
Az év folyamán megjelent tudományos publikációk száma:	79

Tanulmány, cikk

impakt faktoros publikáció magyarul:	0	~ idegen nyelven:	49
nem impakt faktoros tudományos cikk magyarul:	0	~ idegen nyelven:	12
hazai tudományos folyóiratban magyarul:	0	~ idegen nyelven:	0
külföldi folyóiratban magyarul:	0	~ idegen nyelven:	61
nemzetközi együttműködés keretében:	41		
SCI által regisztrált folyóiratban:	42		
összesített impakt faktor:	123.584		
összes hivatkozás száma:	559	összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:	458

Könyv

könyv/monográfia magyarul:	0	~ idegen nyelven:	0
könyvfejezet (kevesebb mint 20 old.) magyarul:	14	~ idegen nyelven:	1
könyvfejezet (több mint 20 old.)magyarul:	0	~ idegen nyelven:	0
könyvfejezet magyarul:	14	~ idegen nyelven:	1
lexikoncikk: 2 ívig:	0		
tanulmánykötet szerkesztése magyarul:	2	~ idegen nyelven:	1
Tudományos ismeretterjesztő írás magyarul:	4	~ idegen nyelven:	0

Tudományos fokozat, ill. cím megszerzése (2007-2009. évi átlag):

PhD:	5.333	MTA doktora cím:	0.333
MTA levelező tag:	0	MTA rendes tag:	0

Szellemi alkotások védelme:

Nemzeti úton megadott oltalmak száma:	0
Megadott külföldi oltalmak száma:	1
Értékesített szabadalmak száma:	0
Szerzői jogvédelem alá tartozó alkotások száma:	0

Részvétel a tudományos és kulturális életben:**Rendezvények:**

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma:	25	~posztterek száma:	38
Hazai rendezvényen tartott tudományos előadások száma:	11	~posztterek száma:	3
ismeretterjesztő előadások száma:	1		
Tudományos rendezvények szervezése hazai:	1	nemzetközi:	5
Jelentős nyilvános kulturális esemény megrendezése:	1		

Szakértői tevékenység:

tanácsadói tevékenységek száma:	0		
egyéni szaklektori vélemény összesen:	59	ebből külföldre:	59
opponensi vélemény összesen:	52	ebből külföldre:	38
egyéb szakértői vélemény:	14	ebből külföldre:	0

Részvétel tudományos testületben

Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	8	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	11
Nemzetközi tud. bizottsági elnökség:	3	Hazai folyóirat szerk. tagság:	0
Hazai tud. bizottsági elnökség:	3	Hazai tud. bizottsági tagság:	26

Felsőoktatásban végzett tevékenység:

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma:	17		
Ebből doktori iskolákban oktatók száma:	0	Doktori iskolát vezetőik száma:	0
Elméleti kurzusok száma:	17	Gyakorlati kurzusok száma:	10
TDK-t készítő hallgatók száma:	0		
Diplomamunkát készítő hallgatók száma (BSc):	0		
Diplomamunkát készítő hallgatók száma (MSc):	0		
PHD-t készítő hallgatók száma:	16		
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma:	928		

Az MTA KK Nanokémiai és Katalízis Intézet 2009. évi tevékenységének egyéb bemutatható jellemzői

- Bejelentett szabadalmak, és egyéb szabadalmi jellegű alkotások száma: 0
 - a Magyarországon bejelentettek: 0
 - a nem Magyarországon bejelentettek: 0
- A kutatónők száma: 16
 - vezető beosztásokban: 0
 - nem vezető beosztásokban: 16
- A mobilitással kapcsolatban az intézetből az állásukat megtartott, munkaviszonyban levő diplomások közül hat hónapnál hosszabb időre távollevők száma: 2
 - Magyarország: 0
 - egyetemen, kutatóintézetekben: 0
 - gazdasági társaságnál: 0
 - Nem Magyarországon: 2
 - egyetemen, kutatóintézetekben: 2
 - gazdasági társaságnál: 0
- az adott intézethez érkező kutatók száma: 3
 - 1-6 hónap időtartamra: 3
 - Magyarországról: 0
 - nem Magyarországról: 3
 - 6 hónapnál hosszabb időre: 0
 - Magyarországról: 0
 - nem Magyarországról: 0
- Vállalati kapcsolatok
 - jelentősebb ipari partnerek (a kapcsolat típusa: közös K+F és kutatási megbízás):
UWATECH Kft.; MULTIPROJEKT Kft.; JOSAB Magyarország Kft.; Süd Chemie AG (Németország); Industrial Technology Research Institute (Tajvan); Kontakt-Elektro Kft. (Magyarország); MOL Nyrt.; Terra Humana Kft.; Bogdánypetrol, Nyírbogdány;
 - az intézet holdudvarába tartozó kisvállalkozások száma: 8
- A társadalmi párbeszéd eredményei:
 - Az általános tudománynépszerűsítő közlemények száma: 3
 - Az intézet tevékenységét népszerűsítő rendezvények száma: 1

Kémiai Kutatóközpont
SZERKEZETI KÉMIAI INTÉZET

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

Telefon: 438-1120, Fax: 438-1143

e-mail: kubinyi@chemres.hu, honlap: <http://www.chemres.hu>

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

Az intézet feladata 2009-ben nemzetközi színvonalú tudományos kutatások művelése volt, elsősorban azokon a területeken, amelyek több kutató és kutatási nagyműszer koordinált együttműködését igénylik. A kutatások a következő főbb területeken folytak:

- szerkezeti biológia és kémia,
- szupramolekuláris kémia (önszerveződő rendszerek),
- nagyműszeres vizsgálatok a gyógyszerkutatások támogatására,
- orvosi analitikai kémia,
- funkcionális vegyületek (polimerek, fluoreszcens próbák, fotokrom vegyületek).

Az intézet, a tudományos feladatokhoz kapcsolódóan a következő területeken fejtett ki tevékenységet:

- kutatási infrastruktúra üzemeltetése;
- részvétel a graduális és posztgraduális szakemberképzésben;
- alap- és alkalmazott kutatásokhoz szükséges módszerek és eszközök fejlesztése;
- a tudományos eredmények hasznosításának kezdeményezése és elősegítése;
- hazai és nemzetközi tudományos rendezvények szervezése;
- részvétel a nemzetközi tudományos életben és a tudományos szervezetekben.

II. Az év folyamán elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények, azok gazdasági-társadalmi haszna

Szerkezeti biológia és kémia

A triapinmolekula széles körű biológiai hatásáról (antimaláriás, antimikrobiális és antitumor aktivitás) ismert. A biológiai hatás és a komplexképző sajátságok közötti összefüggések felderítésére három piridin-tioszemikarbazon vegyület összehasonlító vizsgálatát végezték el Cu(II)ionokkal. Megállapították, hogy az oldatban a *monokomplexek*, valamint *biszkomplexek* mellett egy Cu₂L₃ összetételű dimer molekula képződik, ami a biológiai pH-tartományban domináns. A három vegyület komplexképző sajátságainak összehasonlításából az is kiderült, hogy az N-terminális pozícióban dimetilézett származékok fémmegekötő képessége (a biológiai hatás növekedésével együtt) megnőtt a triapin-hoz képest (nemcsak réz(II), de Fe(II) és Zn(II) esetén is).

A *maximin 4* nevű, antimikrobiális tulajdonsággal rendelkező peptidről NMR-spektroszkópiai vizsgálatok kombinációjával megállapították, hogy míg vizes oldatban konformációja rendezetlen, SDS micellákban és foszfolipid kettősrétegekben alfa-hélix szerkezetet vesz fel. Szilárdfázisú NMR-mérések alkalmazásával mutatták ki, hogy a peptidlánc mélyen a hidrofób alkiláncok közé merül a membránban, és kitüntetett orientációval rendelkezik. Ez utóbbi felismerés jól definiált pórusok jelenlétére utal a lipid kettősrétegben, és megerősíti a korábbi elképzelést, mely szerint a peptid antibakteriális hatását a sejtmembrán átjárhatóságának növelése révén fejt ki.

A 2008-2009-ben létrehozott Központi Fehérje Expressziós Laboratóriumban 2009 júniusára a technikai háttér lehetővé tette, hogy NMR-spektroszkópiai és más szerkezeti biológiai, illetve biokémiai/biofizikai vizsgálatok céljára bioszintetikus úton fehérjét állítsanak elő. Az NMR-laboratórium munkatársai 2009 II. félévében optimalták az expressziós körülményeket és a tisztítási eljárást az NMR-spektroszkópiai vizsgálatokhoz szükséges ^{13}C , ^{15}N izotópjelzéssel ellátott humán epesavkötő fehérje előállításához, és megkezdték a fehérje flexibilitása és funkciója közötti összefüggések feltárására irányuló spektroszkópiai vizsgálatokat.

Egyrétegű a foszfolipid vezikulákhoz adott különböző komponensek (PEG-molekulák és egy gyógyszermolekula) hatására a vezikulák szerkezeti és dinamikus tulajdonságában bekövetkező változásokat tanulmányozták 16-DSA spinszonda segítségével. Megállapították, hogy a PEG-molekulák hatása független a molekulatömegetől. Ez alátámasztja azt a korábbi feltevést, hogy a molekulának csak egy kis része csapdázódik a vezikulában, a többi része az oldatban marad. Megállapították továbbá, hogy a vizsgált gyógyszermolekula a vezikula hidrofób részében csapdázódik.

Az MTA KK Biomolekuláris Kémia Intézetével folytatott együttműködésben bifunkcionális organokatalizátorok dinamikájának vizsgálatát végezték el alacsony hőmérsékletű folyadék NMR-módszerekkel. Felismerték a katalizátorok asszociációs folyamatainak a monomer állapotok konformációs egyensúlyára gyakorolt hatását. A jelenség értelmezésével javaslatot tettek a bifunkcionális organokatalizátorok önaktivációs működésének mechanizmusára, amivel értelmezhető a katalizátorcsalád apoláris, aprotikus közegben történő sikeres alkalmazása.

Elméleti tanulmányok alapján megállapították, hogy a nagy térkitöltésű Lewis sav–bázis párok („frusztrált Lewis-párok”) reaktivitásának értelmezésére javasolt modell az amin–borán és az imin–borán párok hidrogénnel történő reakcióira is sikeresen alkalmazható. Felderítették a borán–katalizált iminhidrogénezés mechanizmusának részleteit, amiből kiderült, hogy a kísérleti megfigyelések alapján javasolt reakcióút mellett egy autoinduktív mechanizmus is fontos szerepet játszhat a katalízisben. Ez utóbbi mechanizmus szerint az amintermék is részt vesz a hidrogénaktiválási folyamatban. A magasabb hőmérsékleten végbemenő hidrogénhasítási reakciók értelmezéséhez bevezették az inherens és termikusan indukált frusztráció fogalmát.

Azonosították azokat a tényezőket, melyek alapvetően meghatározzák a Lewis-párok hidrogénhasítási reakcióinak termodinamikai feltételeit. Mindehhez egy olyan energiafelbontást javasoltak, melyben az egyes tagok jól jellemzik a Lewis-komponensek savi illetve báziserősségét, a hidrogénezett termék stabilizációs energiáját, esetenként a Lewis-párok között kialakuló datív kötés erősségét. Megállapították, hogy a teljes reakcióenergiát

elsősorban a sav-bázis sajátságok határozzák meg, de a molekulaszervezet változtatásával a többi tag is finomhangolható.

Kvantumkémiai számítások segítségével elősegítették a $[\text{RhCl}(\text{H})_2(\text{P}^i\text{Pr}_3)_2$ komplex szerkezetének azonosítását. A kapcsolódó kísérletek szerint a komplex hatékony katalizátorként alkalmazható olefinek hidrogénezésében. Felderítették a katalitikus ciklus mechanizmusát, miszerint a hidrogénezési folyamat sebességhatározó lépésének a dihidrogén fémcentrumhoz történő addíciója tekinthető.

Car-Parrinello metadinamikai szimulációk segítségével megállapították, hogy a Wacker-reakció során az úgynevezett külső mechanizmus is összhangban van a reakció kinetikájával. A szimulációk továbbá azt is megmutatták, hogy a belső mechanizmus valószínűsége az etilén csoport erős transz hatása miatt nagyon kicsi.

A bullvalén és barbaralén molekulákon végrehajtott Born-Oppenheimer molekuladinamikai szimulációk segítségével megmutatták, hogy az aromáság kialakulása átmeneti állapotban igen erős szervező erő. Szerkezeti, elektronszerkezet és szabadenergia számításokkal igazolták, hogy a ciklikus delokalizáció magas hőmérsékleten is képes a jelentős szerkezeti fluktuációk szinkronizálására az átmeneti állapotban.

Kvantumkémiai számításokkal meghatározták a CH_2Br^+ és CH_2I_2^+ kationok elektronállapotai közti spin-pálya csatolást. Az ezek figyelembevételével végzett kvantumdinamikai szimulációk megmutatták, hogy a spin-pálya csatolásnak, továbbá a dinamikus Stark-eltolódásnak és a multi-foton csatolásnak köszönhetően a molekulákon nagy intenzitású lézerekkel végzett időfelbontásos mérések során több elektronállapot is koherensen gerjesztődik.

Kvantumkémiai számítások felhasználásával modell-potenciálokat fejlesztettek ki víz, metanol és etanol zeoliton történő adszorpciójának vizsgálatára, és molekuladinamikai modellezéssel sikeresen leírták az abszolút etilalkohol ipari előállításában használt szelektív adszorpció jelenségét.

Levezették és beprogramozták a molekulán belüli atomi spinek kvantumkémiai alapon való kiszámításához szükséges formulákat.

Analitikus levezetést adtak a Hückel-féle klasszikus "4n+2" képletre.

Energiapartíciós számításokkal is igazolták, hogy az etán forgási gátja elsősorban az átfedési taszításból származik.

A vizes oldatokban jelen lévő hidroxidionra új, molekuláris dinamikai potenciálokat dolgoztak ki. A kölcsönhatási potenciálok segítségével lehetővé válik felületi, illetve oldatban lévő hidroxidionok szerkezetének tanulmányozása is.

Cink monoretegeket és a felületen létrejövő szerkezeteket tanulmányozták Pd(111) felületen. A létrejövő katalizátor ígéretesnek bizonyult a metanol-reformálás során alkalmazott rézalapú katalizátorok kiváltására nagyobb aktivitásuk, szelektivitásuk és stabilitásuk miatt.

Szupramolekuláris kémia, önszerveződő rendszerek

2009. évben előállítottak és egykristály röntgendiffrakcióval szerkezetileg jellemeztek egy olyan kétfémes Au–CN–Sn szupramolekuláris rendszert, amely eltérő komplexképző sajátságú fémcentrumokat tartalmaz. Ez a szerkezeti érdekességek mellett szokatlan ioncsere-sajátságokat eredményezett. Bebizonyították, hogy a könnyen kivitelezhető ioncsere-reakció hatékony módja a kompakt, háromdimenziós szerkezetű kétfémes rendszerek egymásba

alakításának. Az arany mellé beépített fémnek a milyenségétől függően új, változatos sajátságokat mutató, potenciálisan hasznos anyagok alakíthatók ki.

Önszerveződő rendszerek, szupramolekuláris rendszerek tanulmányozásának érdekében, klasszikus molekuláris dinamikai potenciálokat fejlesztettek. Meghatározták néhány aranykomplex szerkezetét. Geometriailag jellemezték a kialakuló szupramolekuláris formákat, valamint a komplexek teljes oldatszerkezetét.

2009-ben sikerrel folytatták a szilárd fázisú molekuláris asszociátumok diffrakciós szerkezetvizsgálatát és az ezekben kialakuló szupramolekuláris formák geometriai jellemzését. Több új típusú átmenetifém komplexének szerkezetét határozták meg. Kristályosítási eljárásokat fejlesztettek rosszul oldható anyagok kristálynövesztésére. Folytatták a rezolválás /molekuláris szelekció szerkezeti alapjainak földerítését.

Önszerveződő kukurbituril aggregátumokban vizsgálták a biológiai spin-jelzőként alkalmazott TEMPO szabad gyökök ESR-spektrumát. A kutatások célja: hosszú élettartamú és in-vivo körülmények között is alkalmazható spin-jelölés kidolgozása. Jelentős előrelépést eredményezett az a megfigyelés, hogy a nitroxid vendégmolekulák trimer szerkezetet hoznak létre a kukurbituril üregek belsejében. A felismerés biológiai rendszerek vizsgálatában hasznosítható.

Nagyműszeres vizsgálatok a gyógyszerkutatások támogatására

Szilárdfázisú NMR-módszerekkel meghatározták egy természetes alapú biopolimerből előállított film mechanikai tulajdonságait. Vizsgálták az adalékanyagok hatását befolyásoló másodlagos kölcsönhatásokat többkomponensű formulázott gyógyszerekben, valamint a hatóanyag morfológiáját, eloszlását a hordozó mátrixban. Új NMR-mérési módszert adaptáltak, amelynek segítségével hidrogének és biológiailag hatékony kismolekulák közti hidrogénhidás kölcsönhatásokat derítettek fel.

Orvosi analitikai kémia

A biológiai funkcionális vegyületek nagyműszeres szerkezetvizsgálata és analitikája területén tanulmányozták zsírsavak és glikopeptidek szerepét a kóros elhízás mechanizmusában és gyógyításában. Továbbfejlesztették az előző évben általuk kidolgozott HPLC-MS-módszert, amely így képes az emberi szervezet számára fontos mintegy 15, nagyon eltérő polaritású zsírsav gyors elválasztására.

Megállapították, hogy a kórosan elhízott és a kontroll egyének zsírsaveloszlása szignifikánsan eltérő, és statisztikai módszerekkel azonosították a legnagyobb eltérést mutató zsírsavakat.

Számítógépes programot fejlesztettek ki, melyet glikopeptidek azonosítására használnak fel a glikopeptidek HPLC-MS/MS-spektrumainak alapján.

Módszert dolgoztak ki szintetikus és biopolimerek ütközésaktivált bomlási spektrumainak felvételéhez a kísérleti körülmények optimalizálására.

Funkcionális vegyületek

Dópolt és dópolatlan, egyfalú szén-nanocsöveket vizsgáltak. Káliummal dópolt esetben a mágneses Ni:Y katalizátorrészcsekék széles ESR-jele mellett egy keskeny jel is megjelenik. Kimutatták, hogy a fellépő extra jel a vezetési elektronoktól származik.

2009-ben a kumarinszármazékok körében vizsgálták a cianid-szubsztitúció hatását a fluoreszcencia-kioltásra poláros prótikus oldószerekben; megállapították, hogy ilyen körülmények között az oldószerral a cianidcsoporton keresztül képződő hidrogénhidas komplex hozzájárul a gerjesztett állapot kioltásához. Fotokrom vegyületek tulajdonságainak kutatása során új, fémkomplexek keletkezését kísérő színváltozást mutattak ki. Fluoreszcencia-spektroszkópiai módszert dolgoztak ki ionfolyadékok és makrociklusos vegyületek közötti kölcsönhatás egyensúlyi állandójának meghatározására. Az 1-alkil-3-metilimidazólium-sókkal végzett szisztematikus vizsgálatok eredményeként megállapították, hogy az ionfolyadék–kukurbit[7]uril komplexek stabilitása maximum görbe szerint változik az 1-alkilcsoport szénatom-számának a függvényében, míg a 4-szulfonátokalixarénekhez való kötődés erőssége a makrociklus méretétől függő irányú, lineáris változást mutat. Igazolták, hogy egy benzofenantridin típusú alkaloid, a koralin erős kötődése a negatív töltésű poliszacharidokhoz elősegíti a dimerképződést, ami fluoreszcenciaélettartam mérésekkel különösen érzékenyen követhető. A fémkomplexek önszerveződési reakcióiban megmutatkozó sztérikus hatás mélyebb megismerése érdekében vizsgálták Pd-difoszfin komplexek kölcsönhatását olyan új ligandumokkal, melyekben terminális és láncközi koordinációs helyek is vannak. Megállapították, hogy a donor atomok eltérő sztérikus árnyékoltsága meghatározza a Pd-tektonok koordinációjának sorrendjét és helyét is. Azt találták, hogy a vizsgált rendszerekben a várt trimer és tetramer termékeken kívül, az irodalomban egyedülálló módon, pentamerek és hexamerek is kimutathatók.

Elméleti reakciódinamikai módszerekkel megállapították, hogy a metán távoli UV-fény hatására végbemenő disszociációja elsősorban az első és második gerjesztett szingulett állapot részvételével játszódik le, a triplett állapot szerepe pedig valószínűleg elhanyagolható.

Kvantumkémiai számítások segítségével meghatározták Hg(I) és porfirin különböző összetételű komplexeinek szerkezetét és értelmezték fotofizikai és fotokémiai tulajdonságaikat.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Hazai kapcsolatok

Az intézet széles körű hazai tudományos együttműködéseket folytat a felsőoktatási intézményekkel, valamint akadémiai kutatóhelyekkel is. Az intézet kutatói intenzíven részt vesznek az egyetemi oktatásban.

A „Paramágneses fullerénvázas vegyületek és egyéb nano-struktúrák mágneses tulajdonságainak vizsgálata ESR- és ENDOR-spektroszkópiával” címmel kutatásokat folytattak a BME-vel. Egy közös folyóiratcikket publikáltak.

„Átmenetifém komplexek vizsgálata” területén a Szegedi Tudományegyetem kutatóival két publikációban foglalták össze eredményeiket.

A „Fémkomplexek szerkezetének NMR-spektroszkópiai vizsgálata oldat és szilárd fázisban” c. téma kutatásait a Pannon Egyetem, NMR Laboratórium, Veszprém kutatóival közösen végzik. A korszerű NMR-spektroszkópiai módszerek alkalmazása (multinukleáris NMR, Diffusion Ordered Spectroscopy, CP-MAS) az elmúlt években döntő szerepet játszott a közös projektek igen sikeres művelésében, amit a közös munka eredményeit összefoglaló 6 publikáció is fémjelez.

A „Peptidek és peptid konjugátumok szerkezet-funkció vizsgálata” c. témában (együttműködő partner: ELTE, Szerves Kémiai Tanszék, Peptidkémiai Kutatócsoport) NMR-spektroszkópiai módszerekkel meghatározták a kalpain fehérjét aktiváló két kalpasztatin-peptidszármarék konformációját vizes és metanolos oldatban [Ca^{2+}] jelenlétében, illetve távollétében. A peptidláncok [Ca^{2+}] hatására észlelt letekeredése lehetséges magyarázattal szolgált a [Ca^{2+}]-koncentráció szabályozó szerepére a kalpain-kalpasztatin kölcsönhatásban. Az elért eredményeket közös publikációban jelentették meg.

A „Mukoadhezív polimer filmek szerkezetvizsgálata” c. téma (együttműködő partner: Szegedi Tudományegyetem, Gyógyszertechnológiai Intézet) kutatási eredményeit két folyóiratcikkben foglalták össze.

Az „Ojtással funkcionizált természetes alapú polimerek NMR vizsgálata” c. kutatások (együttműködő partnerek: BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék, MTA KK AKI Alkalmazott Polimer Fizika-Kémiai Osztály) 2009-ben egy közös publikációt eredményeztek.

A „Nanométerű volfram-oxidok ^1H -MAS NMR szerkezetvizsgálata” c. téma (Együttműködő partner: MTA-BME Anyagszerkezeti és Modellezési Kutatócsoport) kutatási eredményeiből egy közös publikáció született 2009-ben.

A Pannon Egyetemmel (Veszprém) az „Adszorpció modellezése zeolitokon” c. témában kvantumkémiai számítások felhasználásával modellpotenciálokat fejlesztettek ki víz, metanol és etanol zeoliton történő adszorpciójának vizsgálatára, és molekuladinamikai modellezéssel sikeresen leírták az abszolút etilalkohol ipari előállításában használt szelektív adszorpció jelenségét.

Az eredményekről közös publikációban számoltak be.

A „Tervezett fotofizikai tulajdonságokkal bíró ruténium-komplexek előállítása és jellemzése” c. téma (együttműködő partner: Pannon Egyetem, Veszprém) kutatásainak eredményeként, új egy- és kétmagvú ruténium-bipiridil komplexeket állítottak elő, megmérték fotofizikai tulajdonságaikat, és kvantumkémiai számításokkal értelmezték a megfigyeléseket. Az eredményeket közös folyóiratcikkben foglalták össze.

A Debreceni Egyetemmel közös kutatások során felderítették az Al(glifozát) komplex különböző formáinak szerkezetét. A munkáról cikket jelentettek meg.

Rendszeresen, továbbá eseti megbízások alapján spektroszkópai anyagvizsgálati/minőségellenőrzési szolgáltatást végeztek az Izotóp Kft. részére.

A Magyar Állami Eötvös Loránd Geofizikai Intézet részére ugyancsak mérési szolgáltatásokat végeztek.

Nemzetközi kapcsolatok

Az intézetnek igen eredményes nemzetközi kutatási kapcsolatai vannak mind európai, mind tengerentúli kutatóhelyekkel.

A „Reaktív oxigén specieszek és biológiai fontosságú komplexek ESR-vizsgálata” c. témában igen eredményesen kooperáltak az Université de Provence, Marseille, Franciaország, továbbá az Ohio State University, USA; Medical College of Wisconsin, Milwaukee, USA; az Eindhoven University of Technology, Hollandia és a University of Rosario, Argentína kutatóival. Összesen hat közös publikációt jelentettek meg.

A „Spinzondák és spinjelölések alkalmazása” c. témában (együttműködő partner: Department of Physics, Indian Institute of Science Bangalore, India) MTA-Indiai TA kétoldalú egyezményes keretben spinzondák alkalmazását tanulmányozták polimer elektrolit, illetve szén-nanocső rendszerek vizsgálatára.

Az eredményekből közös publikáció jelent meg, és egy nemzetközi konferencián előadást tartottak.

A „Víz érzékelésére szolgáló fluoreszcens próbák biológiai rendszerek vizsgálata” c. TÉT-egyezmény keretében (együttműködő partnerintézmény: University of Vienna, Ausztria) mérési eredmények összegyűjtését végezték el az együttműködés első évében, az adatok rendszerezése, kiegészítése után a publikáció ebben az évben várható.

Az „Alkaloidok fény hatására végbemenő folyamatai biológiai fontosságú rendszerekben” c. témában (együttműködő partnerintézmény: Max-Planck-Institute for Bioinorganic Chemistry, Mülheim an der Ruhr, Németország) MTA-DFG együttműködés keretében feltárták, hogy a mikrokozmosz sajátságai miként befolyásolják különféle farmakológiai fontosságú alkaloidok fluoreszcenciás sajátságait és fény hatására lejátszódó folyamatait. Kimutatták, hogy hidrogénhid-akceptor anyagok alapvetően megváltoztatják a nitro-szubsztituált 4-hidroxi-sztilbéné gerjesztett állapotból kiinduló energiavesztésének a sebességét.

Két közös publikációt jelentettek meg az eredményekről.

A „Lézerrel indukált szénplazmák emissziós spektroszkópai analízise” c. témában (együttműködő partnerintézmény: Center for Laser Applications, The University of Tennessee Space Institute, Tullahoma, TN, USA) lézerrel indukált plazmák sajátságait tárták fel idő-felbontott emissziós spektroszkópai vizsgálatokkal.

Az eredményeket közös publikációban foglalták össze.

A „Spontán emisszió korom részecskék lézer fényvel történő besugárzásakor” c. téma keretében, a Combustion Research Facility, Sandia National Laboratories, Livermore, California, USA intézménnyel együttműködve, lézerfényvel besugárzott koromrészecskék emissziós spektrumát értelmezték.

Az eredményekről egy folyóiratcikket publikáltak.

„A rezgési spektrumok tanulmányozása kísérleti és kvantumkémiai számításon alapuló módszerekkel” c. témát a Department of Physical Sciences, Helsinki University, Finnország kutatóival közösen folytatták. Különböző kémiai anyagok IR- és Raman-spektrumait elemezték. A spektrumokat részletesen értelmezték elméleti számítások segítségével.

Az eredményekről egy nemzetközi konferencián számoltak be.

A „Membránpeptidek hatásmechanizmusának vizsgálata szilárd fázisú NMR-spektroszkópiával” c. témában (együttműködő partner: University of Karlsruhe, Németország) a Budapesten és Karlsruhe-ban végzett szilárd fázisú NMR-vizsgálatok alapján kimutatták a maximin 4 nevű antimikrobiális peptid kitüntetett orientációját lipid kettősrétegekben. A pórusképződés mechanizmusának felállítása folyamatban van.

A „Biomolekulák tömegspektrométerben végbemenő elemi reakcióinak modellezése” c. témában (együttműködő partnerintézmény: B. Verkin Institute for Low Temperature Physics and Engineering of the National Academy of Sciences of Ukraine, Kharkov, Ukrajna), Ukrán-Magyar MTA-kétoldalú megállapodás keretében, a biológiai rendszerekben fontos szerepet betöltő molekulák gázfázisú ionkémiai tulajdonságait vizsgálták tömegspektrometriai és elméleti kémiai módszerekkel.

MTA-DFG-egyezmény keretében a „Halometánok: kvantumkémiai és kvantumdinamikai számítások a fotodisszociáció lézeres szabályzására” c. témában (együttműködő partner: Institute of Physical Chemistry, Friedrich-Schiller-University Jena, Németország) kimutatták, hogy a CH_2Br^+ molekulákon végzett időfelbontásos mérések eredményeinek értelmezésére használt korábbi modell közelítései helyesek voltak, de a megfigyelt dinamikus rezonanciák pontos értelmezéséhez több gerjesztett elektronállapot- és a közöttük levő spin-pálya csatolás figyelembevétele is szükséges.

Az eredményekről egy közös cikk készült.

Az „Energiadekompozíciós és kötésrendszámítási módszerek” c. témában (együttműködő partner: Department of Chemistry and Institute of Computational Chemistry, University of Girona, Spanyolország) beprogramozták és alkalmazták az előző évben javasolt "effektív minimális bázist" a "fuzzy atomok" módszer keretében.

Két publikációt jelentettek meg.

A University of New Mexico, Albuquerque, NM, USA intézménnyel való együttműködésben klasszikus- és kvantummechanikai reakciódinamikai számításokkal kvantitatíve meghatározták, hogy az égések kémiájában alapvető ($\text{H} + \text{O}_2$)-reakció sebességét milyen mértékben növeli az oxigénmolekula forgási gerjesztése.

A Department of Physics, Stony Brook University, New York, USA és az Institute of Physical Chemistry, Friedrich-Schiller-University Jena, Németország partnerintézményekkel közösen megmutatták, hogy a (CH_2I_2) -molekula intenzív lézerral történő ionizációja során több elektronállapot koherensen gerjesztődik.

Az USA négy egyetemével folytatott kooperációban, az elméleti kémia kutatások területén összesen négy közös publikációt jelentettek meg 2009-ben.

MTA-CNRS-egyezmény keretében, a „Molekuláris folyadékok és oldatok szerkezetvizsgálata kombinált diffrakciós és szimulációs módszerrel” c. témában (együtműködő partner: Laboratoire Leon Brillouin, Saclay, Franciaország) tanulmányozták a formamidot és formamid-víz elegyeket. A tiszta formamidban a molekulák kiterjedt H-kötésű hálót alkotnak, a tiszta vízhez hasonlóan. NaNO_3 vizes oldatában a nitrátió körül kialakuló hidrátszféra szerkezetét tanulmányozták. Megfigyelték, hogy a vízmolekulák az N–O tengely irányában koordinálódnak az anionhoz.

Az együtműködés eredményeiből két közös cikket jelentettek meg.

OTKA-projekt keretében „Arany-makrociklusok, arany-arany és arany-fém klaszterek előállítás és szerkezeti jellemzése különböző módszerekkel: Röntgendiffrakció, NMR, STM” c. témában (együtműködő partner: Department of Chemistry, University of Utah, USA) megvizsgálták az $[\text{Au}_2(\text{xantfosz})_2](\text{NO}_3)_2$ nitrometános oldatának szerkezetét. Az önszerveződő komplex felületén diffúz szolvátburok alakul ki; az anionok nem koordinálódnak a központi arany(III)ionokhoz, szemben a nitrometán-molekulákkal. A komplexek közötti térben a tiszta oldószerre jellemző szerkezetű nitrometán folyadék található.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

Hazai pályázatok

OTKA-kutatások keretében a „Bioligandumok fémkoordinációjának termodinamikai vizsgálata ESR-spektroszkópiával” c. témában hisztidinben gazdag glikoproteinek rézkomplexeinek vizsgálatát végezték el.

Ugyancsak OTKA-pályázati téma („Koordinációs viszonyok és konformációs egyensúlyok vizsgálata aliciklusos beta-aminosav származékok réz(II) komplexeinél kétdimenziós ESR-spektroszkópiai módszerrel”) keretében végzett kutatások eredményeként 2009-ben a vizsgálatokat fluorozott szalicilsavak, tioszemikarbazon származékok és hisztidin vegyületek–réz(II) komplexeinek tanulmányozására is kiterjesztették.

A „Nagy pontosságú modellek az elméleti kémiában és spektroszkópiai alkalmazások” c. OTKA-témában közepes molekulatömegű molekulák (250 – 1000 Dalton) spektroszkópiai vizsgálatának értelmezését végezték el nagy pontosságú kvantumkémiai számítások segítségével.

A „Nem-kovalens kölcsönhatások szerepe biológiai fontosságú vegyületek fényelnyelés hatására végbemenő folyamataiban” c. OTKA-pályázat keretében ionfolyadékoknak, alkaloidoknak, egy biológiai kutatásokban széleskörűen használt festéknek és a riboflavin fő bomlástermékének, a lumikrómnak szupramolekuláris komplex képződését tanulmányozták. Feltárták, hogy a molekulászerkezet változtatása miként befolyásolja a keletkezett komplexek stabilitását és fluoreszcenciás sajátságait.

„A sejtek közötti kommunikáció újonnan azonosított mikrovezikulum-útjának vizsgálata” c. OTKA-projektben a Semmelweis Egyetem kutatóival együtt mintaelőkészítési módszert

dolgoztak ki a fehérjék vezikulumokból történő kinyerésére. A vezikulumok fehérjeösszetételének meghatározására egy nanoUPLC-MS/MS technikát fejlesztettek ki.

NKFP-Jedlik Ányos Program keretében „Molekuláris célpontok és biomarkerek azonosítása kóros elhízás mechanizmusában és gyógyításában” c. projekt keretében mintaelőkészítési eljárást dolgoztak ki a szabad zsírsavak vérplazmából történő extrakciójára és hidrolízisére. Sikeresen vizsgálták kóros elhízásban szenvedő, ill. kontroll csoportok összesített, valamint egyéni mintáit. Az egyes csoportok és egyének zsírsavmintázatában szignifikáns különbségeket határoztak meg.

Az NKTH-NAP VENEUS-pályázat segítségével lehetővé vált a Philips X'Pert MPD diffraktométer műszaki fejlesztése. Többek között olyan kisszögű feltétet fejlesztettek ki a készülékhez, mellyel lehetőség nyílik a kisszögű tartományban történő mérésre is, azaz a nagyméretű (néhány száz Å) molekulák tanulmányozására is. Ezen felül új fűthető – hűthető mintatartókat is készítettek a mérési lehetőségek kiterjesztésére.

Az „Önszerveződő aranyvegyületek szintézise és szerkezeti jellemzése különböző módszerekkel: röntgendiffrakció, NMR” c. OTKA-témában a dicianaurát(I) aniont eredményesen alkalmazták kétfémes (Au–CN–Sn)-kapcsolatot tartalmazó szupramolekuláris rendszerek előállítására. Megállapították, hogy a kompakt, háromdimenziós szerkezetű, kétfémes rendszerek ioncsere reakcióval könnyen átalakíthatók egymásba. A könnyen kivitelezhető reakció lehetővé teszi potenciálisan hasznos új anyagok széles körének előállítását.

Nemzetközi pályázat

Az FP6-Marie Curie Early Stage Researcher Training projekt során az Akzo Nobel cég kutatóival közösen módszert dolgoztak ki szintetikus és biopolimerek ütközésaktivált bomlási spektrumainak felvételéhez a kísérleti körülmények optimalizálására.

V. Az év folyamán megjelent jelentősebb publikációk, szabadalmak

1. Bardelang D, Banaszak K, Karoui H, Rockenbauer A, Waite M, Udachin K, Ripmeester JA, Ratcliffe CI, Ouari O, Tordo P: Probing cucurbituril assemblies in water with TEMPO-like nitroxides: A trinitroxide supraradical with spin–spin interactions, JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY 131(15): 5402-5404 (2009)
2. Varga O, Kubinyi M, Vidóczy T, Baranyai P, Bitter I, Kállay M: Methylene blue-calixarenesulfonate supramolecular complexes and aggregates in aqueous solutions, JOURNAL OF PHOTOCHEMISTRY AND PHOTOBIOLOGY A-CHEMISTRY 207(2-3): 167-172 (2009)
3. Miskolczi Zs, Biczók L, Megyesi M, Jablonkai I: Inclusion complex formation of ionic liquids and other cationic organic compounds with cucurbit[7]uril studied by 4',6'-diamidino-2-phenylindole fluorescent probe, JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B 113(6): 1645-1651 (2009)

4. Tőke O, Bánóczy Z, Tárkányi G, Friedrich P, Hudecz F: Folding transitions in calpain activator peptides studied by solution NMR spectroscopy, JOURNAL OF PEPTIDE SCIENCE 15(6): 404-410 (2009)
5. Baráth G, Kaizer J, Speier G, Párkányi L, Kuzmann E, Vértes A: One metal-two pathways to the carboxylate-enhanced, iron-containing quercetinase mimics, CHEMICAL COMMUNICATIONS 24: 3630-3632 (2009)
6. Fábrián B, Csámpai A, Nagy TZs, Czugler M, Sohár P: Synthesis, ring transformations, IR-, NMR and DFT study of heterocycles with two ferrocenyl units, JOURNAL OF ORGANOMETALLIC CHEMISTRY 694(23): 3732-3741 (2009)
7. Krenyácz J, Drahos L, Vékey K: Collision energy and cone voltage optimisation for glycopeptide analysis, EUROPEAN JOURNAL OF MASS SPECTROMETRY 15(2): 361-365 (2009)
8. Rokob TA, Hamza A, Pápai I: Rationalizing the reactivity of frustrated Lewis pairs: Thermodynamics of H₂ activation and the role of acid-base properties, JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY 131(30): 10701-10710 (2009)
9. Deák A, Tunyogi T, Pálincás G: Synthesis and structure of a cyanoaurate-based organotin polymer exhibiting unusual ion-exchange properties, JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY 131(8): 2815-2817 (2009)
10. Megyes T, Bálint Sz, Peter E, Grósz T, Bakó I, Krienke H, Bellissent-Funel MC: Solution structure of NaNO₃ in water: Diffraction and molecular dynamics simulation study, JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B 113(13): 4054-4064 (2009)

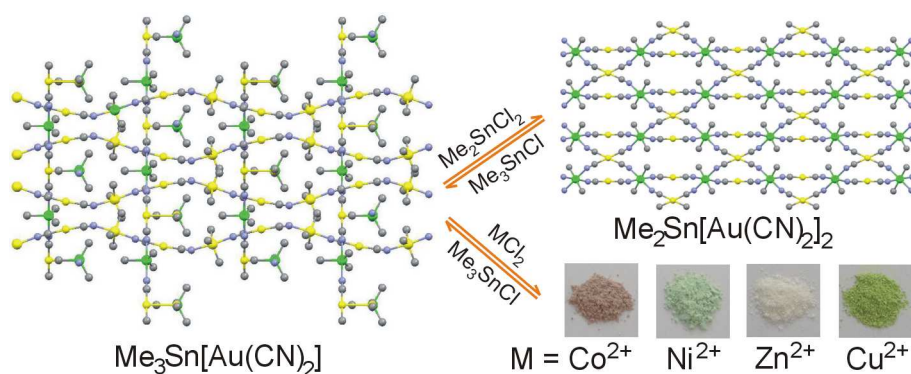
Az MTA KK Szerkezeti Kémiai Intézetének kiemelten sikeres kutatási területe 2009-ben

Kétfémes szupramolekuláris rendszerek előállítása, szerkezetük meghatározása és tulajdonságaik vizsgálata

A szupramolekuláris kémia még mindig fiatal területe a kémiának, ami a biológiából vett molekuláris önszerveződés elvének felhasználásával a fizika, az elektronika, a kémiai technológia és a nanotechnológia számára potenciálisan hasznos anyagokat képes létrehozni. A lumineszcens, katalitikus és/vagy redox-aktív fémcentrumoknak a szupramolekuláris szerkezetekbe történő beépítése megelőlegezi az így kialakított szupramolekulák gyakorlati felhasználhatóságát.

A cianid-hidas $M-CN-M'$ kétfémes szupramolekulák változatos szerkezeteik, valamint sokszor szokatlan mágneses, elektrokémiai, optikai, gázmegkötő és negatív hőtágulást mutató sajátságai révén világszerte az érdeklődés előterében állnak. Az eltérő komplexképző sajátságú fémcentrumokat (lágysz Lewis-bázis vs. erős Lewis-sav) tartalmazó, kétfémes szupramolekuláris rendszerek előállítása szintetikus kémiai szempontból igazi kihívás.

Az intézet kutatócsoportja olyan kétfémes $Au-CN-Sn$ szupramolekuláris rendszereket állított elő, melyek a lágysz Lewis-bázis karakterű dicianoaurát(I)-anionok mellett erős Lewis-savas karakterű organoón(IV)-kationokat is tartalmaznak. Amint az várható volt, az eltérő komplexképző sajátságú fémcentrumoknak az adott molekulán belüli együttese szokatlan szerkezeteket és tulajdonságokat eredményezett.



Az előállított $Me_3Sn[Au(CN)_2]$ szupramolekula élénk pleokromizmust mutat polarizációs mikroszkóp alatt; a 254 nm-es UV-sugárzás a kristályokban ragyogó rózsaszínű lumineszcenciát okoz. A röntgendiffrakciós szerkezetmeghatározás bebizonyította, hogy a $Me_3Sn[Au(CN)_2]$ szupramolekula háromdimenziós szerkezetének a kialakításában fontos szerep jut az aranycentrumok között kialakuló aurofil $Au \cdots Au$ kölcsönhatásoknak. Bebizonyították, hogy a vízben gyakorlatilag oldhatatlan $Me_3Sn[Au(CN)_2]$ szupramolekula Me_2SnCl_2 jelenlétében átalakul a $Me_2Sn[Au(CN)_2]_2$ szupramolekulává. Megállapították, hogy a $Me_2Sn[Au(CN)_2]_2$ vegyületben az aurofil kölcsönhatások a háromdimenziós $Au-CN-Sn$ hálózatok közötti kapcsolatok kialakításában vesznek részt. Megállapították továbbá azt is, hogy a kétfémes $Me_3Sn[Au(CN)_2]$ szupramolekula ón(IV) centrumja kicserélhető

átmenetifém kationokra, és így új, kétfémes Au–CN–M (M = Co²⁺, Ni²⁺, Zn²⁺, Cu²⁺) szupramolekuláculáris rendszerek alakulhatnak ki. A beépített új Au–CN–M szerkezeti egységek, az átmenetifémtől függően, definiálják a szupramolekula speciális fizikai tulajdonságait (mágneses, optikai, vapokromizmus). Bizonyították, hogy az így előállított kobalt(II)- és nikkell(II)-dicianoaurátok Me₃SnCl jelenlétében visszaalakulnak a kiinduló Me₃Sn[Au(CN)₂] szupramolekulává.

Összefoglalásként elmondható, hogy az előállított és szerkezetileg jellemzett, szokatlan tulajdonságokkal rendelkező Me₃Sn[Au(CN)₂] szupramolekula ioncserével tovább alakítható újabb organoón(IV)-egységet Me₂Sn[Au(CN)₂]₂, illetve átmenetifémet tartalmazó Co(H₂O)₂[Au(CN)₂]₂, Ni(H₂O)₂[Au(CN)₂]₂, Cu(H₂O)₂[Au(CN)₂]₂ és Zn[Au(CN)₂]₂ szupramolekulákká. Bebizonyították, hogy a könnyen kivitelezhető ioncsere-reakció hatékony módja a kompakt háromdimenziós szerkezetű kétfémes rendszerek egymásba alakításának, és így az arany mellé beépített fém milyenségétől függően új, változatos sajátságokat mutató, potenciálisan különféle gyakorlati felhasználásokat ígérő anyagok alakíthatók ki.

**Az MTA KK Szerkezeti Kémiai Intézet 2009. évi tudományos teljesítményének
néhány mutatója**

Átlagléttség:	40	Ebből kutató:	36
PHD v. kand.:	14	MTA doktora:	9
MTA levelező tag:	0	MTA rendes tag:	0
<i>Az intézethez kötődő akadémikusok száma:</i>	2		
35 év alatti, intézeti állományban levő kutatók száma:	15		

Publikációk

Az év folyamán megjelent összes (tudományos és ismeretterjesztő) publikációk száma:	86
Az év folyamán megjelent tudományos publikációk száma:	81

Tanulmány, cikk

impakt faktoros publikáció magyarul:	0	~ idegen nyelven:	74
nem impakt faktoros tudományos cikk magyarul:	1	~ idegen nyelven:	3
hazai tudományos folyóiratban magyarul:	1	~ idegen nyelven:	0
külföldi folyóiratban magyarul:	0	~ idegen nyelven:	77
nemzetközi együttműködés keretében:	40		
SCI által regisztrált folyóiratban:	46		
összesített impakt faktor:	206.699		
összes hivatkozás száma:	1856	összes hivatkozás önidézetek nélkül:	száma 1485

Könyv

Könyv/monográfia magyarul:	0	~ idegen nyelven:	0
könyvfejezet (kevesebb mint 20 old.) magyarul:	0	~ idegen nyelven:	3
könyvfejezet (több mint 20 old.) magyarul:	0	~ idegen nyelven:	0
könyvfejezet magyarul:	0	~ idegen nyelven:	3
lexikoncikk: 2 ívig:	0		
tanulmánykötet szerkesztése magyarul:	0	~ idegen nyelven:	0
Tudományos ismeretterjesztő írás magyarul:	5	~ idegen nyelven:	0

Tudományos fokozat, ill. cím megszerzése:

PhD:	2.333	MTA doktora cím:	0.667
MTA levelező tag:	0	MTA rendes tag:	0

Szellemi alkotások védelme:

Nemzeti úton megadott oltalmak száma:	0
Megadott külföldi oltalmak száma:	0
Értékesített szabadalmak száma:	0
Szerzői jogvédelem alá tartozó alkotások száma:	0

Részvétel a tudományos és kulturális életben:**Rendezvények:**

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma:	21	~posztterek száma:	27
Hazai rendezvényen tartott tudományos előadások száma:	25	~posztterek száma:	4
ismeretterjesztő előadások száma:	1		
Tudományos rendezvények szervezése hazai:	1	nemzetközi:	4
Jelentős nyilvános kulturális esemény megrendezése:	0		

Szakértői tevékenység:

tanácsadói tevékenységek száma:	0		
egyéni szaklektori vélemény összesen:	73	ebből külföldre:	71
opponensi vélemény összesen:	29	ebből külföldre:	10
egyéb szakértői vélemény:	9	ebből külföldre:	6

Részvétel tudományos testületben

Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	5	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	3
Nemzetközi tud. bizottsági elnökség:	0	Hazai folyóirat szerk. tagság:	0
Hazai tud. bizottsági elnökség:	1	Hazai tud. bizottsági tagság:	7

Felsőoktatásban végzett tevékenység:

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma:	13		
Ebből doktori iskolákban oktatók száma:	1	Doktori iskolát vezetőik száma:	0
Elméleti kurzusok száma:	7	Gyakorlati kurzusok száma:	9
TDK-t készítő hallgatók száma:	3		
Diplomamunkát készítő hallgatók száma (BSc):	5		
Diplomamunkát készítő hallgatók száma (MSc):	4		
PHD-t készítő hallgatók száma:	16		
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma:	536		

Az MTA KK Szerkezeti Kémiai Intézet 2009. évi tevékenységének egyéb bemutatható jellemzői

- Bejelentett szabadalmak, és egyéb szabadalmi jellegű alkotások száma: 0
 - a Magyarországon bejelentettek: 0
 - a nem Magyarországon bejelentettek: 0
- A kutatónők száma: 13
 - vezető beosztásokban: 2
 - nem vezető beosztásokban: 11
- A mobilitással kapcsolatban az intézetből az állásukat megtartott, munkaviszonyban levő diplomások közül hat hónapnál hosszabb időre távollevők száma: 1
 - Magyarországon: 0
 - egyetemen, kutatóintézetekben: 0
 - gazdasági társaságnál: 0
 - Nem Magyarországon: 1
 - egyetemen, kutatóintézetekben: 1
 - gazdasági társaságnál: 0
- az adott intézethez érkező kutatók száma: 4
 - 1-6 hónap időtartamra: 3
 - Magyarországról: 0
 - nem Magyarországról: 3
 - 6 hónapnál hosszabb időre: 1
 - Magyarországról: 0
 - nem Magyarországról: 1
- Vállalati kapcsolatok
 - jelentősebb ipari partnerek (a kapcsolat típusa: közös K+F és kutatási megbízás):
Cyclolab Kft.; Glycom A/S; Richter Gedeon Nyrt.
 - az intézet holdudvarába tartozó kisvállalkozások száma: 3
- A társadalmi párbeszéd eredményei:
 - Az általános tudománynépszerűsítő közlemények száma: 3
 - Az intézet tevékenységét népszerűsítő rendezvények száma: 0