

# Beszámoló a 2007. évi tudományos tevékenységről





## TARTALOM

|  |           |
|--|-----------|
| <b>KÉMIAI KUTATÓKÖZPONT</b> .....  | <b>5</b>  |
| I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben .....   | 5         |
| VI. A kutatóhely 2007. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói .....                                      | 6         |
| <b>Biomolekuláris Kémiai Intézet</b> .....   | <b>7</b>  |
| I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben .....   | 7         |
| II. Az év folyamán elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények, azok gazdasági-társadalmi haszna ..... | 7         |
| III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása .....  | 12        |
| IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése .....                                    | 14        |
| V. Az év folyamán megjelent jelentősebb publikációk, szabadalmak .....   | 15        |
| és más bemutatható eredmények .....  | 15        |
| VI. A kutatóhely 2007. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói .....                                      | 16        |
| Az MTA KK Biomolekuláris Kémiai Intézetének kiemelten sikeres kutatási területei 2007-ben .....                | 17        |
| <b>Felületkémiai és Katalízis Intézet</b> .....  | <b>21</b> |
| I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben .....   | 21        |
| II. Az év folyamán elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények, azok gazdasági-társadalmi haszna ..... | 21        |
| III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása .....  | 26        |
| IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése .....                                    | 29        |
| V. Az év folyamán megjelent jelentősebb publikációk, szabadalmak .....   | 31        |
| VI. A kutatóhely 2007. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói .....                                      | 32        |
| Az MTA KK Felületkémiai és Katalízis Intézetének kiemelten sikeres kutatási területei 2007-ben .....           | 33        |
| <b>Szerkezeti Kémiai Intézet</b> .....   | <b>37</b> |
| I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben .....   | 37        |
| II. Az év folyamán elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények, azok gazdasági-társadalmi haszna ..... | 37        |
| III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása .....  | 40        |
| Nemzetközi kapcsolatok .....   | 41        |
| IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése .....                                    | 43        |
| V. Az év folyamán megjelent jelentősebb publikációk, szabadalmak és más bemutatható eredmények .....           | 45        |
| VI. A kutatóhely 2007. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói .....                                      | 46        |
| Az MTA KK Szerkezeti Kémiai Intézetének kiemelten sikeres kutatási területe 2007-ben .....                     | 47        |
| <b>Anyag- és Környezatkémiai Intézet</b> .....   | <b>51</b> |
| I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben .....   | 51        |
| II. Az év folyamán elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények, azok gazdasági-társadalmi haszna ..... | 51        |
| III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása .....  | 58        |
| IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése .....                                    | 59        |
| V. Az év folyamán megjelent jelentősebb publikációk, szabadalmak .....   | 61        |
| VI. A kutatóhely 2007. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói .....                                      | 63        |
| Az MTA KK Anyag- és Környezatkémiai Intézetének kiemelten sikeres kutatási területei 2007-ben .....            | 64        |



## 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>

### I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

A kutatóközpont alapvető missziója, hogy a kémia és a vele rokon tudományágak (elsősorban az élettudományok, az anyagtudomány, a környezettudományok és a nanotudományok) fontos területein olyan nemzetközi színvonalú tudományos kutatásokat folytasson, amelyek nagyobb létszámú kutatócsoportok összehangolt tevékenységét és korszerű nagyműszeres módszerek koordinált alkalmazását igénylik.

A kutatóhely fontos feladata az egyetemi oktatómunkában és a posztgraduális képzésben való részvétel is.

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” c. (GVOP) koordinációs kutatóközponti pályázat feladatai 2007. évi teljesítésének. Az NKTH, ill. NFT-által támogatott több programban is részt vesznek a Központ kutatói. Ezeknek a programoknak az eredményei jelentősen 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 kutatási programokban való aktív részvétel is.

Az MTA Kémiai Kutatóközpont 2007. évi tudományos kutatásait a *funkcionális anyagok kémiai kutatása*, előállításuknak, szerkezetüknek és tulajdonságaiknak vizsgálata foglalta egységes keretbe.

A kutatási tevékenység fő irányai a következők voltak:

- Biomolekuláris és szerves kémiai kutatások, különös tekintettel a biomakromolekulák élettani szerepére, új gyógyszer-hatóanyagok, diagnosztikumok kidolgozására,
- Felületkémiai és katalíziskutatások, különös tekintettel a nanotudományi és nanotechnológiai kutatásokra, illetve alkalmazásokra,
- Szerkezeti kémiai kutatások, különös tekintettel a szupramolekuláris anyagok tanulmányozására és új szerkezetkutatási módszerek bevezetésére,
- Anyagtudományi és környezeti kémiai kutatások, különös tekintettel új, funkcionális anyagok előállítására, környezetbarát eljárások kidolgozására és a hulladékok hasznosítására.

## VI. A kutatóhely 2007. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA Kémiai Kutatóközpont

|  |        |  |            |
|--|--------|--|------------|
| Átlagléttség <sup>1</sup> :  | 376    | Ebből kutató <sup>2</sup> :              | 215        |
| PhD, kandidátus:   | 71     | MTA doktora:                             | 41         |
|  |        | levelező tag:                            | 1          |
|  |        | rendes tag:                              | 7          |
| 35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:                              |        |  | 84         |
| Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> : |        |  | 315        |
| Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :                 |        |  | 310        |
| <i>Ebből</i> impakt faktoros publikáció magyarul:  | 0      | idegen nyelven:                          | 199        |
| nemzetközi együttműködés keretében:  | 114    | SCI által regisztrált folyóiratban:      | 199        |
| összesített impakt faktor <sup>5</sup> :   | 493,09 | összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :   | 4035       |
| összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:   |        |  | 3118       |
| <i>Magyarul</i> könyv/monográfia <sup>7</sup> :  | 0      | könyvfejezet:                            | 8          |
|  |        | jegyzet:                                 | 0          |
| <i>Idegen</i> nyelven könyv:   | 0      | könyvfejezet:                            | 43         |
|  |        | jegyzet:                                 | 0          |
| Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:   | 12     | MTA doktora:                             | 2          |
|  |        | levelező tag:                            | 0          |
|  |        | rendes tag:                              | 0          |
| Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :                                   | 1      | <i>ebből</i> külföldön:                  | 0          |
| Értékesített szabadalmak száma:  |        |  | 0          |
| Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :         | 165    | posztterek száma:                        | 160        |
| Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :   |        |  | 0          |
| Nemzetközi tud. bizottsági tagság:   | 36     | Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:      | 39         |
| Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :             |        |  | 61         |
| Ebből doktori iskolákban oktatók száma:  | 15     | Doktori iskolát vezetőik száma:          | 0          |
| Elméleti kurzusok száma <sup>13</sup> :  | 64     | Gyakorlati kurzusok száma:               | 33         |
| TDK munkát készítő hallgatók száma:  | 21     | Diplomamunkát:                           | 21         |
|  |        | PhD-t:                                   | 68         |
| Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>14</sup> :                  |        |  | 3561       |
| Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>15</sup> :               |        |  | 1650,6 MFt |
| Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>16</sup> :   | 19     | Teljes saját bevétel:                    | 1446,4 MFt |
| Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :                         |        |  | 13,6 MFt   |
| Az év folyamán művelt OTKA témák száma:  |        |  | 50         |
|  |        | A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: | 127,3 MFt  |
| Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma <sup>18</sup> :                         |        |  | 32         |
| NKFP:  | 17     | A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: | 619,7 MFt  |
| Egyéb:   | 15     | A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: | 17 MFt     |
| NFT témák száma <sup>19</sup> :  | 8      | A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: | 258 MFt    |
| Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>20</sup> :                          |        |  | 15         |
| EU forrásból:  | 8      | A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: | 23,6 MFt   |
| Egyéb:   | 7      | A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: | 5,8 MFt    |
| Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:                              |        |  | 105        |
|  |        | A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: | 381,2 MFt  |
| Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>21</sup> :                            |        |  | 0 MFt      |

**Kémiai Kutatóközpont**  
**BIOMOLEKULÁRIS KÉMIAI INTÉZET**  
1025 Budapest, Pusztaszeri út 59–67; 1525 Budapest, Pf. 17.  
Telefon: 438–1110, Fax: 438–1145  
e-mail: ghajos@chemres.hu, honlap: www.chemres.hu

## **I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben**

A kutatóhely alapvető feladata volt 2007. évben is, mint korábban, hogy nemzetközi színvonalú tudományos kutatásokat folytasson az élő szervezetek kémiai folyamatainak, az ezekben szerepet játszó molekuláknak a megismerése, a folyamatok kedvező irányú befolyásolása, illetve a molekulák tervezése és szintézise területén.

Az intézet további feladatai voltak még a következők: részvétel az egyetemi oktatásban és a posztgraduális képzésben, szakmai tanácsadás, valamint gyakorlati célú kutatási-fejlesztési feladatok elvégzése.

Az intézet fontos kötelezettségei közé tartozott 2007. évben mind a hazai, mind az európai kutatási pályázatok időszerű feladatainak teljesítése.

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

### *Szintetikus szerves kémiai kutatások*

Újabb, palládium-katalizált keresztkapcsolások végrehajtásával indollal kondenzált származékokat szintetizáltak, melyeknek multidrog-rezisztenciára gyakorolt hatását kooperációban kutatták. A rezisztenciagátlás vizsgálata az életminőség javítása szempontjából a gyógyszerkutatás egyik kiemelt területe napjainkban.

Ikerionos vegyületek tanulmányozásakor váz-átrendeződéseket figyeltek meg. A tapasztalt átalakulások megismerése lényeges szerepet játszott a vegyülettípusok reakciókészségének értelmezésében.

Több olyan gyűrűzárási módszert dolgoztak ki, amelyek kondenzált pirazolokat eredményeztek. Az új gyűrűrendszerek szintézise alapvető jelentőségű a gyógyszerkémiaiában, mivel új gyógyhatású származékok felismerésének fontos lehetőségét jelenti.

*Kutatói kapacitás: 6 fő, ebből intézeti állományban: 6 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 32 M Ft, ebből pályázati forrás: 6 M Ft.*

A bifunkcionális, kinin-alapú organokatalizátorok alkalmazásának, valamint szerkezetének vizsgálata c. témában olyan új fázisjelölési technikát dolgoztak ki, amely a lehető legkisebb fluoros fázisjelölő csoportot, a trifluorometil-csoportot alkalmazza. A kidolgozott eljárást

mind az organokatalizátorok visszaforgatásánál, mind a foszfinok szelektív kinyerésénél alkalmazták.

*Kutatói kapacitás: 8 fő, ebből intézeti állományban: 8 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 36 M Ft, ebből pályázati forrás: 6 M Ft.*

#### *Természetes szerves anyagok szintézise*

Eljárást dolgoztak ki a D-gyűrűben 5 szénatomot tartalmazó D-nor-ergolinváz kialakítására, s ennek hasznosításával előállították az eddigi egyetlen szintetikus elő nem állított klavin-alkaloidot, a cikloklavint.

(±)-Piperidin-2-karbonsavból kiindulva iparilag is hasznosítható eljárást dolgoztak ki (R)- és (S)-pípekolsav származékok előállítására, amelyek fontos kiindulási alapanyagai alkaloidok és más biológiailag aktív vegyületek szintézisének.

(±)-Piperidin-2-karbonsavból kiindulva előállították egy béka (±)-epiquinamid elnevezésű alkaloidját, majd egy speciális királis katalizátor (CBS) alkalmazásával kidolgozták a természetes izomernek, s valamennyi lehetséges királis diasztereomerjének szintézisét.

*Kutatói kapacitás: 5 fő, ebből intézeti állományban: 5 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 40 M Ft, ebből pályázati forrás: 5 M Ft.*

#### *Biológiai kémiai kutatások*

A glikopeptidek kulcsszerepet töltenek be a sejt felismerési folyamatokban. Kisebb molekulatömegű glikopeptidek szintézisére és gyógyszerként történő felhasználására számos sikeres próbálkozás történt. Az elmúlt évben az anomer pozícióban formilcsoportot tartalmazó C-glikozidokat, majd e vegyületekből Strecker-reakcióban nyerhető glikoaminosav építőelemeket állítottak elő. Ezekből a vegyületekből szilárd fázisú peptidszintézissel módosított szerkezetű, biológiailag aktív peptidok nyerhetők.

Formil-C-glikozidokból aszimmetrikus Strecker-reakcióban, aceton-ciánhidrin cianid-donor és S(-)-1-feniletilamin, mint királis induktor jelenlétében, diasztereomer aminonitrileket állítottak elő.

*Kutatói kapacitás: 2 fő, ebből intézeti állományban: 2 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 15 M Ft, ebből pályázati forrás: –*

#### *Nukleotidkémiai és peptidkémiai kutatások*

Egy, a GVOP által támogatott, hazai konzorciumi együttműködés keretében uracil-tartalmú oligonukleotidokat szintetizáltak. Ezek egy része az uracil-DNS-endonukleáz enzim affinitás-kromatográfiai tisztítása céljából olyan szerkezeti elemeket (3'-biotin, 5'-aminohexil csoport) tartalmaz, amelyek lehetővé teszik a megfelelő szilárd hordozókhoz történő kötést. Másrészt a BRCA1 mellrák gén bizonyos mutációinak kimutatására szolgáló, kettősen jelzett (5'-fluoreszcein, 3'-BHQ-1) oligonukleotidokat (molekuláris jelzők) is szintetizáltak a kontrollkísérletekhez szükséges komplementer szálakkal együtt.



Olcsó alapanyagokból, L-arabinózból, ill. D-galaktózból kiindulva, új, 2'-módosított L-ribo- és L-arabino-nukleozidok szintéziséhez felhasználható szénhidrát komponenseket állítottak elő. A cukor-, ill. bázisrészen módosított L-nukleozidok között számos, jelentős antivirális aktivitással rendelkező analogon található.

*Kutatói kapacitás: 3 fő, ebből intézeti állományban: 3 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 25 M Ft, ebből pályázati forrás: 6 M Ft.*

#### *Szénhidrátkémiai kutatások*

A heparin szerkezet-hatás összefüggések vizsgálatával kapcsolatban olyan szintézisutat dolgoztak ki, mellyel mindössze négy ortogonálisan védett tetraszacharidból a heparin és heparán-szulfát összes lehetséges – több száz – tetraszacharid egysége előállítható. Ezeknek az oligoszacharidoknak a felhasználásával lehetőség nyílik a heparin különböző biológiai hatásainak szétválasztására, potenciálisan mellékhatás nélküli készítmények kifejlesztésére.

A glikózaminoglikán oligoszacharidok területén ugyancsak ortogonális védőcsoportok használatán alapuló szintézisstratégiát dolgoztak ki azacukor-tartalmú heparin oligoszacharid analógok előállítására. E vegyületek a heparin bioszintézisében szerepet játszó heparánáz enzim inhibitorai. A szintetizált, ortogonálisan védett azacukor-diszacharid nagyszámú heparánáz inhibitor előállítását teszi lehetővé.

Génterápiás célokra és a DermaVir AIDS-vakcina hatékonyságának növelésére, a DNS-nek dendritikus sejtekbe történő szelektív bejuttatását elősegítő vegyületeket terveztek és szintetizáltak. E célból megvalósították a dendritikus sejtek egy sejtfelületi receptora különböző oligoszacharid ligandumainak szintézisét és ezen oligoszacharidok polimer hordozókhoz történő konjugálását. Ezt a munkát nemzetközi együttműködés keretében, ipari partnerekkel végezték.

*Kutatói kapacitás: 4 fő, ebből intézeti állományban: 4 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 30 M Ft, ebből pályázati forrás: 20 M Ft.*

#### *Neurokémiai kutatások*

Felismerték a glutaminsav gliális felvételével aktivált GABA-felszabadulással járó cserefolyamat minimális mechanizmusát. A mechanizmus ismerete a gyógyszertervezésben új stratégiát kínál a potenciálisan neuroprotektív hatású vegyületek tervezésében.

*Kutatói kapacitás: 4 fő, ebből intézeti állományban: 4 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 32 M Ft, ebből pályázati forrás: 18 M Ft.*

#### *Molekulárfarmakológiai kutatások*

Spektroszkópiai és kromatográfiás technikákkal elsőként tanulmányozták egyes kinolin és akridin típusú maláriaellenes gyógyszerek plazmafehérje-kötődését. Kimutatták több vegyület nagy affinitású, egy esetben sztereoselektív szérum-AGP kötődését; meghatározták a kötődési paramétereket, vizsgálták a vegyületek kötődési interakcióit. Becslést adtak a gyógyszerek albumin-kötődésének erősségére.

Rekombináns AGP preparátumok CD és UV/Vis spektroszkópiai vizsgálatával igazolták a fehérje központi üregében található triptofán oldallánc fontos szerepét gyógyszerek és egyéb ligandumok kötődésében. Feltárták a humán AGP és a membrántranszporter P-glikoprotein ligandumai és funkcionális sajátosságai közötti hasonlóságokat. Javaslatokat tettek ezek gyakorlati hasznosítására.

A natív AGP molekulavariánsainak elválasztását egy továbbfejlesztett, nagyobb felbontóképességű, kapilláris elektroforézis metodikával valósították meg különböző malignus elváltozásokban. Megállapították, hogy a savanyúbb AGP-molekulavariánsok mennyisége szignifikánsan nő tumoros betegekben.

Nemzetközi együttműködésben kifejlesztettek egy nanomólos affinitású, alegység-szelektív neuroszteroid antagonistát GABA<sub>A</sub> receptorokra. Előzőleg a neuroszteroid kötőhelyre csak mikromólos affinitású, nem-szelektív antagonisták voltak ismertek.

*Kutatói kapacitás: 9 fő, ebből intézeti állományban: 7 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 20 M Ft, ebből pályázati forrás: 2 M Ft.*

#### *Farmakobiokémiai kutatások*

*In vitro* modellt állítottak be és azt validálták specifikus szubsztrátok felhasználásával ABC transzporterek (ABCC2, ABCC3, ABCB11) aktivitásának vizsgálatára. Humán és patkány primer hepatocita szendvicskultúrában tanulmányozták a transzportereken lejátszódó gyógyszerinterakciókat (gátlás, aktiválás). Az ABCC2/C3 transzporterek vizsgálatához bilirubin-glukuronidot, esztaradiol-17 $\beta$ -glukuronidot (E217bG), 5,(6)-karboxidiklórfloreszceint használtak szubsztrátként, az ABCB11 aktivitását a taurokolát transzportjának mérésével határozták meg. Modulátorként indometacint, probenecidet, benzbromaront, MK571-t (ABCC2), ciklosporin A-t, troglitazont, glibenklamidot (ABCB11) alkalmaztak. Az eredményeket *in vivo* végzett patkány biliáris efflux kísérletekkel hasonlították össze. Kis koncentrációban valamennyi modulátor aktiválta az E217bG kanalikuláris transzportját, az indometacin és benzbromaron *in vivo* is. Nagy koncentrációban transzportgátlást mértek mindkét transzporterrel. Ezek az eredmények *in vivo* gyógyszerinterakciókat valószínűsítene, amelyek hepatotoxicitáshoz vezethetnek.

*Kutatói kapacitás: 4 fő, ebből intézeti állományban: 4 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 20 M Ft, ebből pályázati forrás: –*

A Semmelweis Egyetem Transzplantációs és Sebészeti Klinikájával kialakított együttműködés keretében vizsgálják a transzplantációra szánt máj gyógyszerlebontó (méregtelenítő) képességét. A diagnosztikai rendszer a gyógyszer-metabolizmusban résztvevő CYP enzimek aktivitásának és gén-expressziójának meghatározásán (fenotipizálás) alapul. Ezzel lehetőség van arra, hogy vérből történő mérésekkel következtessenek a máj aktuális gyógyszer-metabolizáló képességére, valamint, hogy előre jelezzék a donor máj esetleges csökkent gyógyszer-metabolizáló képességét. Ez ugyanis befolyásolhatja a beteg gyógyszeres kezelését, hiszen ebben az esetben a gyógyszeres terhelést csökkenteni kell. Erzékeny kvalitatív és kvantitatív LC-MS/MS-módszert dolgoztak ki a transzplantált betegeknek immunszuppresszánsként alkalmazott cyclosporin-A (CSA) és metabolitjainak vérből történő meghatározására. Az eljárás a klinikai gyakorlatban rutinszerűen alkalmazott mérési

technikákat kiegészítve segít különbséget tenni az alacsony CSA-szint okozta szervkilökődés, valamint a magas CSA- és CSA-metabolit szint okozta toxicitás között.

*Kutatói kapacitás: 7 fő, ebből intézeti állományban: 4 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 25 M Ft, ebből pályázati forrás: –*

#### *Szenzibilizátor és multidrog-rezisztencia kutatások*

Új, szintetizált szenzibilizátorok fotodinamikus hatását vizsgálták sejttenyészetben, a daganatos betegségek terápiájában használható hatásos gyógyszer(ek) fejlesztése céljából.

Lymphomás kutyák multidrog rezisztenciáját vizsgálták, hogy pontosabb meghatározást adhassanak a betegség malignitásának és a kemoterápiára adott válaszána hatásáról. Beállították az érintett transzportfehérjék kimutatására alkalmas PCR-technikát is, ami kutya és macska multidrog-rezisztencia fehérjéire vonatkozott.

Védett (hidrogénezett) zsír és Ca-szappan takarmánykiegészítők hatását kezeletlen kontrollok mellett vizsgálták tejelő tehenek anyagforgalmára és antioxidáns státuszára az ellés körüli időszakban. A hidrogénezett triglicerid kiegészítésnek az energiaháztartás mutatóira és a máj lipidtartalmára az ellés után szignifikánsan kedvezőbb metabolikus hatása volt, mint a Ca-szappannak. Ugyanakkor az észlelt metabolikus változások nem befolyásolták az antioxidáns rendszer vizsgált tagjait.

*Kutatói kapacitás: 3 fő, ebből intézeti állományban: 2 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 14 M Ft, ebből pályázati forrás: 3,2 M Ft.*

#### *Kemometriai kutatások*

Finn kutatókkal kooperációban kimutatták, hogy a koleszterin frakciók meghatározásának hibája függ attól, milyen frakciókra bontják a koleszterineket. Egyes frakciókat nem lehet pontosan meghatározni <sup>1</sup>H NMR mérési adatok kemometriai feldolgozásával, még akkor sem, ha kísérleti hiba nem zavarja a mérést és kiértékelését. Ezért ezek a frakciók nem használhatók diagnosztikai célokra. Az eljárás nagy jelentőségű a szív- és érrendszeri betegségek kimutatásánál, rizikócsoportok meghatározásában.

Nemzetközi együttműködésben sikerült egy új, nem invazív diagnosztikai eljárást kidolgozniuk a gyermekkori asztmás, ill. allergiás esetek megkülönböztetésére. Az eljárás alapja, hogy a kilélegzett levegő NMR-analízisének adatait többváltozós technikákkal dolgozzák fel.

Felkérésre összefoglalót készítettek a kvantitatív szerkezet – retenció vizsgálatok témakörében. A mű a kromatográfia különböző részterületeit (GC, HPLC, TLC, affinitás-kromatográfia stb.) elkülönítetten tárgyalja, megadja a leggyakoribb tendenciákat és felhívja a figyelmet a leggyakrabban előforduló hibákra. A retenció előrejelzésére szolgáló változókat, a kísérleti körülményeket, a modell-vegyületeket és az irodalmi forrásokat táblázatosan foglalták össze.

*Kutatói kapacitás: 1 fő, ebből intézeti állományban: 1 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 8 M Ft, ebből pályázati forrás: 3 M Ft.*

### III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

#### *Hazai kapcsolatok*

Az MTA-kutatóhelyekkel és a felsőoktatási intézményekkel igen gyümölcsöző együttműködések folytatnak, ezek mind az oktatás, mind a kutatás területére kiterjednek.

Az oktatómunkában való intenzív részvételüket mutatja, hogy az Intézet 10 kutatója rendszeresen végez oktatási tevékenységet az ELTE-n, ill. a Semmelweis Egyetemen. A hazai kutatóhelyekkel folytatott együttműködések részben pályázatokhoz is kapcsolódnak, ezért a IV. fejezetben további információk olvashatók a közös eredményekről. Az innovációban erősen érdekelt gyógyszervállalatokkal közös kutatási programokat alakítottak ki.

„Az uracil-DNS endonukleáz enzim molekuláris biológiai alkalmazásai” c. GVOP-téma kutatásait az MTA SZBK Enzimológiai Intézet, az MTA-ELTE Peptidkémiai Kutatócsoport és a MolCat Tudományos Kutató és Fejlesztő Bt. részvételével folytatják. A címben említett enzim affinitás-kromatográfiai tisztítására szolgáló immobilizálható oligonukleotidokat, valamint a BRCA1 mellrákot okozó onkogén egyes mutációinak kimutatására szolgáló molekuláris jelzőket állítottak elő.

„A domének közötti kölcsönhatás mechanizmusa és szerepe az enzimek térszerkezetének kialakításában és működésében” c. OTKA pályázati témában az MTA SZBK Enzimológiai Intézettel dolgoznak közösen.

„Az idegi szubcelluláris frakciók elektronmikroszkópiája” c. témában (a Szent István Egyetemen közös kutatások) patkányagykéregből izolált szinaptikus membránfrakciókat jellemeztek.

A Semmelweis Egyetemen folytatott együttműködés keretében a szomatosztatin kötődését jellemezték *in silico*. A Humán Agyminta Bankkal kapcsolatos téma kutatásainak során megállapították, hogy a borostyánkősav specifikusan kötődik a *nucleus accumbens* agymintákból izolált szinaptikus membránfrakcióban.

Az ELTE-vel végzett közös munka a GABA kötődési módjának felismeréséhez vezetett *in silico*. Az említett témákból a Semmelweis Egyetemen három, a Szent István Egyetemen és az ELTE-vel egy-egy közös folyóiratcikket publikáltak.

A Semmelweis Egyetem Transzplantációs és Sebészeti Klinikájával a „Transzplantáción átesett betegek egyéni gyógyszeres terápiájának kialakítása” c. témában hoztak létre eredményes kooperációt. Az eredményekről közös folyóiratcikkekben számoltak be.

Az MTA SZBK Enzimológiai Intézettel a „DNS metilációs profiljának meghatározása” c. témában hoztak létre együttműködést.

Több tudományos publikáció jelzi a Pécsi Orvostudományi Egyetem karotinoidkémiai munkacsoportjával, valamint az ELTE TTK, Biokémia Tanszékével közös kutatások eredményességét.

A Pannon Egyetem (Veszprém) kutatóival kromatográfias retenciós adatok feldolgozása témában 2007-ben 6 közös publikációt jelentettek meg.

A Richter Gedeon NyRt.-vel folytatott közös munka 3 tudományos publikációt eredményezett.

„A transzporterek vizsgálata májsejteken” c. témában indukciós és gátlásvizsgálatokat végeztek a SOLVO Kft.-vel közösen.

Több hazai biotechnológiai, valamint gyógyszerállalattal folytatnak gazdaságilag előnyös és kutatási szempontból is érdekes együttműködések. Így pl. a Richter Gedeon Nyrt.-vel és az EGIS Nyrt.-vel is. Számos, gyógyszerkutatási szempontból érdekes vegyületet szintetizáltak, ill. hatástani vizsgálatokat végeztek. A Richter Gedeon NyRt.-vel folytatott közös munka három tudományos publikációt eredményezett.

„A transzporterek vizsgálata májsejteken” c. témában indukciós és gátlásvizsgálatokat végeztek a SOLVO Kft.-vel közösen.

„A növényvédőszeres kölcsönhatása humán efflux transzporter (MDR1 (P-gp), MRP1, MRP2 and BCRP) fehérjékkel” c. témában a Solvo Biotechnology, Szeged, céggel dolgoznak közösen. Az elmúlt évben végzett vizsgálatok alapján megállapították, hogy a klóracetanilid herbicidek az MDR1 szubsztrátjai és módosítják a gyógyszerek bélben történő felvételét. Csekély mértékű szerkezeti változtatások jelentősen befolyásolják a kölcsönhatást az MDR1 efflux fehérjével. Az MRP1 transzportálja az acetoklór glutation konjugátumot, megelőzve ezzel a toxikus akkumulációt. Ezek a transzporter vizsgálatok igen jelentősek az új növényvédőszeres használatával járó kockázati tényezők előrejelzésében.

#### *Nemzetközi kapcsolatok*

Az intézet számos külföldi kutatóhellyel folytat tudományos együttműködést. MTA-kétoldalú egyezményes keretben 2007-ben két fő vett részt külföldi tanulmányúton, és három külföldi kutató érkezett az intézetbe. Nemzetközi konferencián 32 előadást és 24 poszter-előadást tartottak.

A COST B16 program keretében a „Reversal of multi drug resistance” c. témában három külföldi egyetemmel (University of Lisbon, Portugália; University of Reims, Franciaország; Comenius University, Bratislava, Szlovákia) folytattak közös kutatásokat. A közös munka során sikerült a vizsgált vegyületek multidrog-rezisztenciát gátló hatását kísérletileg kimutatniuk. Az eredményekből két közös publikáció született.

Az „Inverz gázkromatográfias adatok feldolgozása, hordozók, segédanyagok osztályozása” c. MTA-Lengyel TA együttműködési témában (együttműködési partner: Poznani Műszaki Egyetem, Lengyelország) sikerült csökkenteni a redundáns oldhatósági paraméterek számát és egyúttal osztályozni a segéd- és töltőanyagokat. Az eredményekről 2007-ben négy cikket jelentettek meg.

Az Institute of Medicinal Chemistry, Hellenic Academy of Science (Athén) kutatóival folytatott együttműködés során egy közös publikáció született az eddigi tudományos eredményekből.

Kiterjedt és gazdaságilag is sikeres együttműködést folytatnak külföldi iparvállalatokkal. Így pl. a Nycomed Deutschland GmbH (Konstanz, Németország) gyógyszergyárral. Számos, potenciális gyógyszermolekulát szintetizáltak, illetve klinikai tesztekhez elegendő mennyiségben állítottak elő. Hasonlóképpen jelentős volumenű megbízásos munkát végeznek az ALTANA Pharma (Konstanz, Németország) és a Sigma-Aldrich (Steinheim, Németország) vállalatok részére is.

#### **IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése**

Az NKTH-által kiemelten támogatott téma: „Hatóanyag-tervezés népegészségügyileg kiemelten fontos megbetegedésekben szerepet játszó validált célmolekulák alapján” kutatásai a MEDICHEM-konzorcium keretében 2007-ben lezárultak. Az igen sikeres kutatási program munkái során számos új vegyületet szintetizáltak, és tisztázták élettani hatásukat. A program jelentős mértékben elősegítette az egyetemi-akadémiai kutatók és a vállalati szakemberek kapcsolatainak erősítését.

„Az uracil-DNS endonukleáz molekuláris biológiai alkalmazásai” c. témában (GVOP-3.1.1-2004-05-0412/3.0) 2007. évben a címben szereplő enzim affinitás-kromatográfiai tisztítása céljából két, azonos szekvenciájú, egyenként 29 nukleotid egységből álló, a szekvencia közepén uracil-bázist tartalmazó oligonukleotidot szintetizáltak. Az egyik ligand a 3'-végen biotint, a másik az 5'-végen egy aminos hexil végcsoportot tartalmaz, amelyek révén alternatív, de mindkét esetben stabil kötések alakíthatók ki a megfelelő szilárd hordozókkal. Előállították a ligandok közös komplementerét is, mivel korábbi vizsgálatok alapján az enzim a duplex formában lévő oligomerekhez erősebben kötődik. Emellett két kettősen jelzett 28-, ill. 40-mer oligonukleotidot is szintetizáltak, amelyek mint molekuláris jelzők a BRCA1, mellrákot okozó onkogén lehetséges mutációinak kimutatására használhatók fel. A biológiai kísérleteket a koordinátor (MTA SZBK Enzimológiai Intézet) kutatócsoportja végzi.

Az „Ionotróp receptorok allosztérikus modulációja” (OTKA K62203) c. téma 2007. évi feladatainak megoldása során kifejlesztettek egy GABA<sub>A</sub> receptorokra nanomólos affinitással ható, alegység-szelektív neurosteroid antagonistát.

A „Biológiailag jelentős, nem-kovalens kölcsönhatások vizsgálata: fehérje-kötődés, nukleinsav-kötődés, önszerveződés” (OTKA T049721) c. téma keretében több gyógyszer specifikus kötődésvizsgálatát végezték el AGP genetikai variánsain. Allosztérikus kötődési kölcsönhatást mutattak ki dicoumarollal. Új analitikai módszert dolgoztak ki humán AGP-minták vizsgálatára.

A „Különböző tulajdonságok előrejelzése szerkezet-sajátság összefüggésekkel. Modellek összevetése objektív módszerekkel” c. MTA-OTKA-NSF közös projekt keretében két dolgozatot jelentettek meg.

NKTH Jedlik Ányos pályázat keretében (NKFP-1-012/2005) a „Kardioprotektív nanoformulációk karotinoidok in silico módszerekkel segített molekuláris kapszulázása útján” c. témában elvégezték számos új, vízoldható karotinoid-ciklodextrin komplex antioxidáns- és stabilitás-vizsgálatát, tanulmányozták a komplexek aggregációs sajátságait.

Az NKTH-által támogatott Jedlik Ányos pályázat keretében a Cyclolab Kft-vel közös szabadalmat dolgoztak ki.

Az EU FP-6 program „Functional genomics of complex regulatory networks from yeast to human: cross-talk of sterol homeostasis and drug metabolism (STEROLTALK)” c. témájában 10 partner (7 ország) részvételével egy olyan tesztrendszeren dolgoznak, amely alkalmas a vér koleszterinszintjét csökkentő gyógyszerek hatásának tanulmányozására és új gyógyszer-jelölt vegyületek kiválasztására. Emellett lehetőség nyílik az ismert xenobiotikumok, gyógyszerek okozta koleszterin-homeosztázis változások poszt-genomiális értékelésére. A program elsődleges célkitűzése a gyógyszerhatásra bekövetkező koleszterin homeosztázis-változások meghatározása transzkriptom, proteom és szterol-metabolom szinten. Az együttműködő partnerintézmények a következők: Universitaet des Saarlandes, Saarbrücken, Németország; University of Ljubljana, Szlovénia; CNRS, Centre de Génétique Moléculaire, Gif-sur-Yvette, Franciaország; Swansea Clinical School, University of Wales Swansea, Wales, UK; Karolinska Institutet, Huddinge University Hospital, Stockholm, Svédország; Biozentrum, University of Basel, Svájc; INSERM UMR, Montpellier, Franciaország; Lek Pharmaceuticals d.d., Ljubljana, Szlovénia, CREA d.o.o., Ljubljana, Szlovénia. A program eredményességét mutatja, hogy eddig 13 közös publikációt jelentettek meg.

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

1. Nagy I, Hajós Gy, Riedl Zs, Egyed O, Pápai I: A novel ambident reactivity of azolylacroleins, *Tetrahedron* 63(22): 4730–4736 (2007)
2. Moldvai I, Dörnyei G, Temesvári-Major E, Szántay Cs: A practical one-pot synthesis of Weinreb-like amides of (*S*)- and (*R*)-*N*-BOC-pipecolic acids from ( $\pm$ )-piperidine-2-carboxylic acid, *Organic Preparations and Procedures Int.*, 39, 503–508 (2007)
3. Simon Á, Kéri Gy, Kardos J: Comparison of the binding modes of TT-232 in somatostatin receptors type 1 and 4, *Journal of Molecular Structure-Theochem* 816(1-3): 73–76 (2007)
4. Tatai J, Fügedi P: A new, powerful glycosylation method: Activation of thioglycosides with dimethyl disulfide-triflic anhydride, *Organic Letters* 9(22): 4647–4650 (2007)
5. Héberger K: Quantitative structure-(chromatographic) retention relationships, *Journal of Chromatography A* 1158(1-2): 273–305 (2007)

## VI. A kutatóhely 2007. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA Kémiai Kutatóközpont, Biomolekuláris Kémiai Intézet

|  |         |   |           |
|--|---------|---|-----------|
| Átlagléttség <sup>1</sup> :  | 80      | Ebből kutató <sup>2</sup> :                 | 58        |
| PhD, kandidátus:   | 23      | MTA doktora:                                | 9         |
| 35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:                              |         | levelező tag:                               | 0         |
|  |         | rendes tag:                                 | 1         |
|  |         |   | 27        |
| Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> : |         |   | 47        |
| Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :                 |         |   | 47        |
| <i>Ebből</i> impakt faktoros publikáció magyarul:  | 0       | idegen nyelven:                             | 37        |
| nemzetközi együttműködés keretében:  | 18      | SCI által regisztrált folyóiratban:         | 37        |
| összesített impakt faktor <sup>5</sup> :   | 102,932 | összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :      | 773       |
| összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:   |         |   | 554       |
| <i>Magyarul</i> könyv/monográfia <sup>7</sup> :  | 0       | könyvfejezet:                               | 0         |
| <i>Idegen</i> nyelven könyv:   | 0       | könyvfejezet:                               | 4         |
|  |         | jegyzet:                                    | 0         |
|  |         | jegyzet:                                    | 0         |
| Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:   | 2       | MTA doktora:                                | 0         |
|  |         | levelező tag:                               | 0         |
|  |         | rendes tag:                                 | 0         |
| Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :                                   | 0       | <i>ebből</i> külföldön:                     | 0         |
| Értékesített szabadalmak száma:  |         |   | 0         |
| Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :         | 32      | posztterek száma:                           | 24        |
| Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :   |         |   | 0         |
| Nemzetközi tud. bizottsági tagság:   | 2       | Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:         | 2         |
| Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :             |         |   | 10        |
| Ebből doktori iskolákban oktatók száma:  | 3       | Doktori iskolát vezetőik száma:             | 0         |
| Elméleti kurzusok száma <sup>13</sup> :  | 7       | Gyakorlati kurzusok száma:                  | 2         |
| TDK munkát készítő hallgatók száma:  | 4       | Diplomamunkát:                              | 3         |
|  |         | PhD-t:                                      | 17        |
| Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>14</sup> :                  |         |   | 318       |
| Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>15</sup> :               |         |   | 353,5 MFt |
| Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>16</sup> :   | 5       | Teljes saját bevétel:                       | 366,2 MFt |
| Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :                         |         |   | 0 MFt     |
| Az év folyamán művelt OTKA témák száma:  |         |   | 7         |
|  |         | A tárgyévvel kapcsolatos szerződésállomány: | 25,3 MFt  |
| Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma <sup>18</sup> :                         |         |   | 3         |
| NKFP:  | 3       | A tárgyévvel kapcsolatos szerződésállomány: | 103,5 MFt |
| Egyéb:   | 0       | A tárgyévvel kapcsolatos szerződésállomány: | 0 MFt     |
| NFT témák száma <sup>19</sup> :  | 2       | A tárgyévvel kapcsolatos szerződésállomány: | 39,1 MFt  |
| Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>20</sup> :                          |         |   | 1         |
| EU forrásból:  | 1       | A tárgyévvel kapcsolatos szerződésállomány: | 7,2 MFt   |
| Egyéb:   | 0       | A tárgyévvel kapcsolatos szerződésállomány: | 0 MFt     |
| Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:                              |         |   | 26        |
|  |         | A tárgyévvel kapcsolatos szerződésállomány: | 191,1 MFt |
| Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>21</sup> :                            |         |   | 0 MFt     |



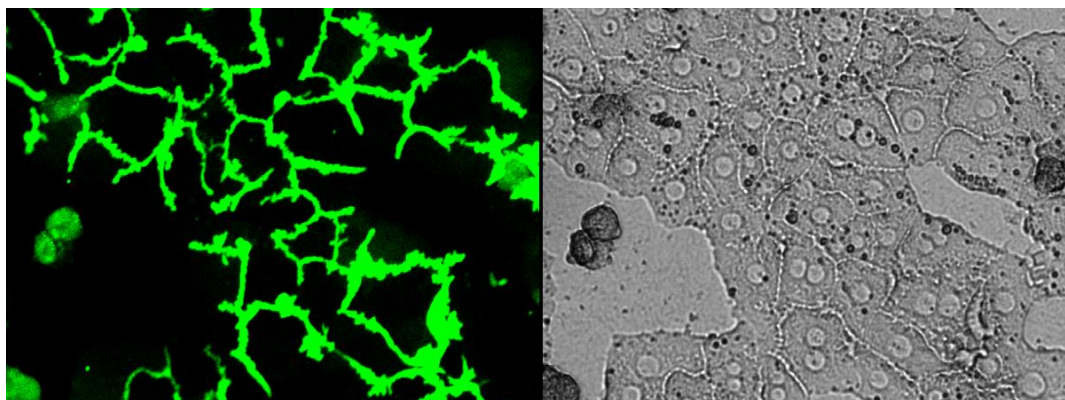
## Az MTA KK Biomolekuláris Kémiai Intézetének kiemelten sikeres kutatási területei 2007-ben

### *Gyógyszer-interakció és mellékhatás vizsgálata humán és patkány hepatocita szendvics kultúrában*

A humán populációt egyre növekvő kémiai terhelés éri. Gyógyszerek, élelmiszeradalékok, tisztítószer, kozmetikumok, növényvédőszer, ipari és mezőgazdasági szennyezők évről-évre növekvő mennyiségben kerülnek a környezetbe. A szervezet a folyamatosan bejutó, sokszor toxikus vegyületektől az ABC transzporter proteinek ellentétes irányú működése, valamint a metabolizáló enzimrendszer segítségével szabadul meg. Ennek az ún. kémiai védelmi rendszernek az összehangolt működése olyan adaptációs lehetőséget nyújt a szervezet számára, hogy az állandóan változó kémiai környezet kihívására megfelelő válaszreakciókkal védekezni tudjon.

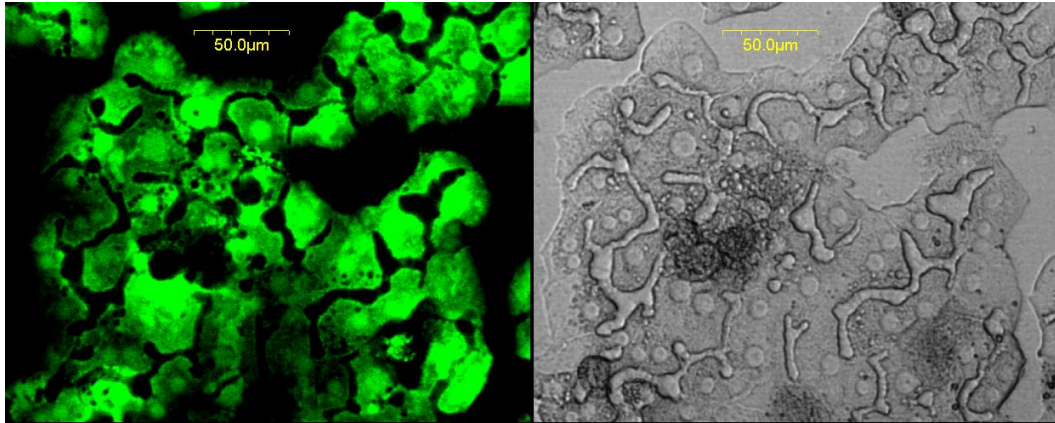
A szervezet adaptációs képessége nem minden esetben kívánatos, mivel ez a jelenség áll a gyógyszer-rezisztencia, a hozzászokás hátterében. Például, a daganat sejtek transzporter-aktivitása gyakran nagyságrendekkel magasabb az egészséges sejtekénél, ezért a citosztatikumok ilyenkor hatástalanok. Komoly kutatás folyik világszerte olyan gyógyszerkiegészítők felfedezésére, amelyek ezt a megemelkedett transzporter-aktivitást gátolják.

A xenobiotikumok döntő hányada a transzporterekben gazdag májban metabolizálódik. A máj funkcionális egysége a hepatocita, amely polarizált sejt, elkülönült szinuszoidális és apikális membránfelszínnel. A membránokban specifikusan találhatóak a transzporter proteinek, amelyek szinuszoidálisan a központi keringésbe, apikálisan az epébe transzportálnak. Ezt a vektoriális transzportot modellezték primer humán és patkány hepatocita szendvics kultúrában. Két kollagén-réteg között a sejtek visszanyerik polaritásukat, elkülönül a két membránfelszín, a transzporter proteinek megfelelően expresszálódnak a membránokba, és néhány nap alatt a sejtek között egy zárt epe-kapilláris rendszer alakul ki. Ebben az *in vitro* modellben az egyes transzporterek (ABCB1/11, ABCC2/3, ABCG2) specifikus szubsztrát vegyületeinek vektoriális transzportját és az ezt befolyásoló modulátorok hatását tanulmányozták.



1. ábra

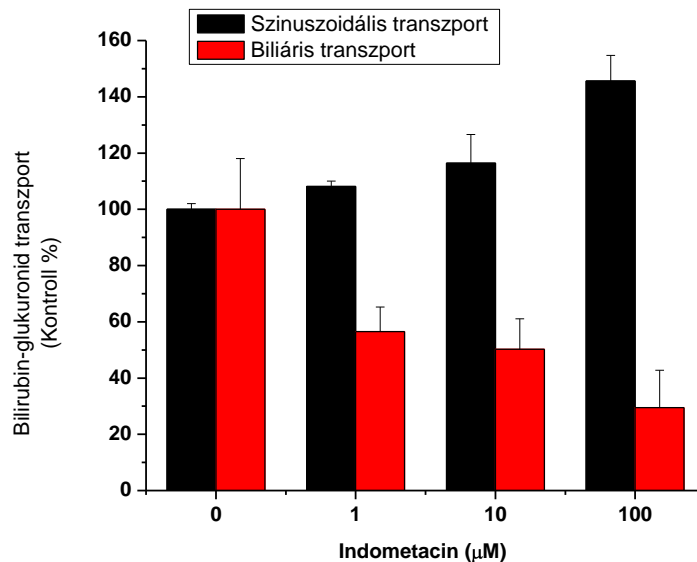
Az 1. ábra jobboldalán a hepatocita szendvics-kultúra fáziskontraszt mikroszkópos felvétele látható, jól kivehetőek a sejtek közötti epe-kapillárisok. A baloldali ábrán konfokális lézermikroszkópos felvételen a kapillárisokba transzportált ABCC2 specifikus fluoreszcens szubsztrát látható.



2. ábra

Az intézet kutatói megállapították, ha az ABCC2 működést egy modulátorral (itt 10  $\mu\text{M}$  indometacinnal) gátolják, a sejtekben a szubsztrát akkumulálódik, és a csatornák üresek, amint az a 2. ábrán látható.

Amennyiben a gátlás egy endogén vegyület (pl. bilirubin, epesavak) transzportját érinti, ez *in vivo* kolesztázishoz, hiperbilirubinémiához vezethet (3. ábra).



3. ábra

Az indometacin gátolja a bilirubin biliáris kiürülését, amelyet részben kompenzál a szinuszoidális transzport. Ez az eredmény *in vivo* májkárosító hatást jelez, amely indometacin esetében a klinikumban leírt mellékhatás.

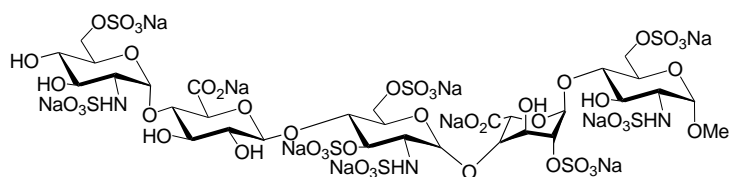
A gyógyszerfejlesztés során az általuk kidolgozott *in vitro* modell alkalmas gyógyszerjelölt molekulák interakcióinak előrejelzésére és olyan gátlószerek kutatására, ahol célzottan az egyes transzporterek aktivitásának csökkentése a cél.

### *Glikózaminoglikán oligoszacharidok szintézise*

A glikózaminoglikánok szinte minden sejt által szintetizált, változatos biológiai funkciókat betöltő, többszörös negatív töltésű, heterogén poliszacharidok. E vegyületcsoport több képviselőjét alkalmazzák a gyógyászatban, így például a heparin széleskörűen alkalmazott véralvadásgátló (antikoaguláns). A heparin e hatása mellett számos további biológiai aktivitást (gyulladásgátló, antiasztmatikus, daganatellenes) is mutat.

A heparin szerkezetileg nagymértékben heterogén, 24 különböző diszacharid egységből épül fel. A 24 diszacharidból már hexaszacharid szinten több mint 13 000 szerkezet jöhet létre, magának a poliszacharidnak az esetében a lehetséges szerkezeti variációk száma már csillagászati számokat ér el.

A glikózaminoglikánok biológiai hatásait fehérjékkel való kölcsönhatásaik révén fejtik ki. Az egyes fehérjékkel történő specifikus kölcsönhatásokért nem a heterogén makromolekula egésze, hanem annak kisebb oligoszacharid egységei a felelősek. Egy-egy fehérjéhez a heparin lánc más és más oligoszacharid egységei kötődnek. Így a heparin véralvadásgátló hatását, pl. az **1** pentaszacharid okozza. Ez a vegyület szelektíven kötődik a véralvadásban szerepet játszó antitrombin III fehérjéhez és gátolja azt hatása kifejtésében. A szintetikusan előállított heparin pentaszacharid gyógyszerként történő használatát a közelmúltban engedélyezték. Az **1** vegyület sokkal előnyösebben használható gyógyszerként mint maga a heparin, és nem mutatja annak legtöbb „mellékhatását”.

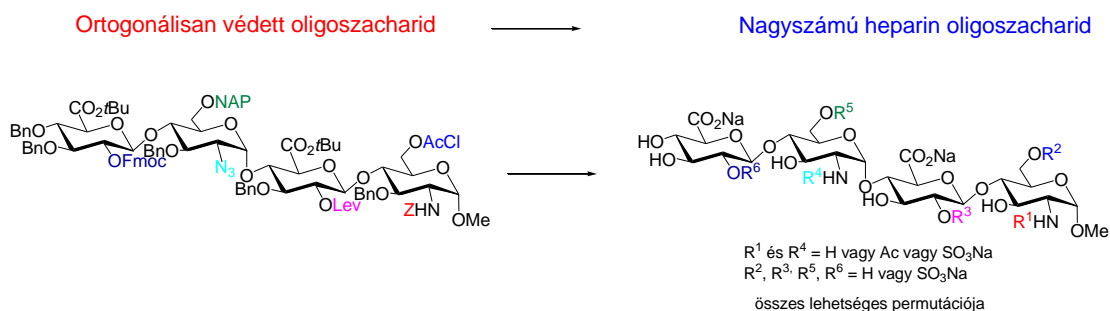


**1**

A heparin több száz fehérjéhez kötődik. Így a gyógyszerkutatásban gyakran használt zár-kulcs hasonlatban, amelyben egy gyógyszermolekula egy megadott zárba – fehérjébe – illeszkedik, a heparin egy kulcscsomónak tekinthető, amely nagyon sok zár kulcsát tartalmazza. Az egyes heparin-kötő fehérjékhez kapcsolódó oligoszacharid egységek azonosítása, és ezáltal a heparin különböző biológiai aktivitásainak szétválasztása intenzív gyógyszeripari kutatások tárgya. E vizsgálatok legfőbb akadálya, hogy a heparin oligoszacharid egységei tisztán nem hozzáférhetők és kémiai szintézissel történő előállításuk is igen bonyolult és hosszadalmas. Magának az **1** vegyületnek nagy kutatócsoportok által többévi munkával kidolgozott szintézise több mint 50 lépésből áll. Nyilvánvaló, hogy az egyes fehérjékhez kötődő heparin oligoszacharid egységek szerkezetének megállapításához

szükséges nagyszámú oligoszacharid ilyen hosszadalmas módszerekkel egyenként történő előállítása nem oldható meg.

Az MTA Kémiai Kutatóközpont Biomolekuláris Kémiai Intézet Szénhidrátkémiai Osztályán olyan új technológiát dolgoztak ki, amely lehetővé teszi az e vizsgálatokhoz szükséges nagyszámú vegyület gyors és egyszerű előállítását. Az általuk kidolgozott szintézismódszer azon alapszik, hogy a heparinban előforduló rendkívül sok szerkezetet alapjában néhány alapváz megadott helyzetekben történő szubsztitúciós variációi hozzák létre. Így az összes lehetséges heparin oligoszacharid előállításához elegendő néhány alapvázat szintetizálni olyan formában, amely lehetővé teszi az egyes szubsztitúciós helyek tetszőleges sorrendben, egymástól függetlenül történő utólagos átalakítását. Az általuk kidolgozott szintézisstratégia úgynevezett ortogonális védőcsoportok használatán alapszik; e védőcsoportok tetszőleges sorrendben történő eltávolítása révén az alapváz tetszőleges pozíciói, illetve azok minden kombinációja hozzáférhető további kémiai módosítások céljára. E módszer segítségével egyetlen ortogonálisan védett vegyületből nagyszámú célvegyület állítható elő. Így például mindössze két ortogonálisan védett származékból a heparin valamennyi diszacharid egységét szintetizálták. A szintézisstratégiát kiterjesztették magasabb tagszámú oligoszacharidokra is, ortogonálisan védett tri- és tetraszacharidokat állítottak elő. A módszer teljesítőképességét jól jelzi, hogy mindössze 4 ortogonálisan védett tetraszacharidból, a heparin valamennyi - összesen 576 - tetraszacharid egysége előállítható. Nyilvánvaló, hogy ez az út sokkal hatékonyabb, mint az egyes vegyületek külön-külön szintézissel történő előállítása.



Az intézet kutatói által kidolgozott szintézisstratégia általánosan alkalmazható nemcsak más glikozaminoglikánokra, hanem általában funkcionizált oligoszacharidok előállítására is, és segítségével új gyógyszerhatóanyagok szintetizálhatók.

Az előzőekben vázlatosan ismertetett szintézisstratégia kidolgozásával párhuzamosan több új szintetikus módszert is bevezettek. Új védőcsoportokat, védőcsoport-átalakításokat és új glikozilezési módszereket dolgoztak ki. Új reagenseket is kifejlesztettek, amiket a szintézisekhez alkalmaztak.

### **I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben**

Nemzetközi színvonalú tudományos kutatások folytatása a felületkémia és a heterogénkatalízis-kutatás területén, különös tekintettel a határfelületekre, az aszimmetrikus katalízisre, a nanodimenziójú részecskékre és szerkezetekre.

Az intézet további feladatai voltak még a következők: részvétel az egyetemi oktatásban és a posztgraduális képzésben, szakmai tanácsadás, valamint gyakorlati célú kutatási-fejlesztési feladatok elvégzése.

Az intézet kiemelkedően fontos tevékenységi területe volt 2007. évben is a hazai, illetve az európai kutatási pályázatok aktuális feladatainak teljesítése.

Az intézet tevékenysége a korábbi évekhez képest jelentősen bővült az elmúlt évben. A kutatómunkába új laboratóriumok (Reakciókinetikai Laboratórium, Nukleáris Kémiai Laboratórium) és új kutatók kapcsolódtak be. Ennek révén lehetővé vált a tematika kiszélesítése és új vizsgálati technikák bevezetése.

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

#### *Nanotudományi kutatások*

Folytatták a szén-nanocsövek funkcionálizálását. Ezek a kutatások a szén-nanocsövek felületének a kívánt célokra történő átalakításához vezettek, ami lehetővé teszi a nanocsövek sokoldalú felhasználását, új típusú bevonatrendszerek kialakítását.

A kutatás célja egy egyszerű funkcionálizáló eljárás kidolgozása volt többfalú szén-nanocsövekre olyan módosítással, melynek révén a nanocső diszpergálhatósága megnövekszik, ugyanakkor vezetőképessége nem változik. Fontos szempont volt, hogy az eljárás környezetbarát, az előállított termék pedig, termikusan elegendően stabil legyen. Az előkísérletek alapján megállapítható, hogy a kutatók által kidolgozott módosító eljárás alkalmas kisüzemi vagy ipari méretekben történő előállításra. A módosított nanocsövek egyik típusa közvetlenül vezető polimerrel, más típusa szerkezeti polimerrel történő elegyítést tesz lehetővé. A kutatás-fejlesztés eredményei az Európai Unió 6-os keretprogramja keretében (POLYCOND project) hasznosultak.

A szén-nanocső/polimer nanokompozit kombinációkat nanoindentációval és atomierő-mikroszkóppal (AFM) vizsgálták. Megállapították, hogy a keménységet a nanocső hozzáadása növeli, de a kopásállóságot rontja.

Kopásálló vékonyrétegek nanoindentációval és AFM-mel történő vizsgálata során megállapították, hogy a többkomponensű nanokompozit rétegek kemények, de nem lyukmentesek, és tulajdonságaik inhomogének. A munka EU-együttműködés keretében (EXCELL) tovább folytatódik.

Komplex szerkezetű vékonyrétegek vizsgálatára alkalmas spektrális ellipszométert helyeztek üzembe. Megvalósítás alatt áll az *in situ* elektrokémiai mérőegyütes felépítése is.

Gyorshűtéssel előállított fém-kerámia nanokompozitokról és porkohászati úton feldolgozott Al-kompozitokról kimutatták, hogy mechanikai tulajdonságaik jobbak, mint a hagyományos alumíniumtermékeké, és előállításuk a javasolt technológiával megoldható. Az eredmények konzorciumi együttműködés (Jedlik-pályázat: ALUTITAN) keretében hasznosulnak.

Nanoszenzorok kutatása terén az egészségre veszélyes gázok kimutatására szolgáló széles spektrumú vegyjelző szenzorcsoportot minősítettek impedanciaspektroszkópai mérésekkel. Meghatározták a szenzorok érzékenységét, az optimális frekvenciákat, vizsgálták a reverzibilitást és a válaszidőt.

*Kutatói kapacitás: 19,5 fő, ebből intézeti állományban: 19,5 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 79,5 M Ft, ebből pályázati forrás: 68,25 M Ft.*

#### *Komplekxkémiai kutatások*

A kobaloxim(II) és ferroxim(II) komplexek esetében megfigyelt pirokatechin oxidáz és fenoxazinon szintetáz típusú aktivitás vizsgálatát kiterjesztették vas(II) és mangán(II) dioximátokomplexekre. Megállapították, hogy a dioximáto-vas(II) komplexek metanolos oldatban katalizálják a 3,5-di-terc-butyl-pirokatechin oxidációját a megfelelő benzokinon származékká. A dioximáto-mangán(II) komplex önmagában nem reagál dioxigénnel és nem is katalizálja a 3,5-di-terc-butyl-pirokatechin, ill. a 2-amino-fenol oxidációját o-benzokinonná, ill. amino-fenoxazinonná. Ha a mangán(II)komplexet a szubsztrátumok és a trietil-amin dioxigénnel reagáló elegyeihez adjuk, akkor mindkét esetben jelentős mértékben megnő az oxidáció sebessége. Ennek oka egy új reakcióút megjelenése a bázis és a Mn-komplex kölcsönhatása következtében, ez az ún. "mangán-aktivált báziskatalízis", amit elsőként sikerült megfigyelniük.

*Kutatói kapacitás: 2 fő, ebből intézeti állományban: 2 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 8 M Ft, ebből pályázati forrás: 2 M Ft.*

#### *Heterogén katalízis kutatások*

Hordozós katalizátorok előállítása céljából már korábban kidolgozták az irányított felületi reakciók módszerét, melyet az elmúlt évben is eredményesen alkalmaztak ón-platina kétfémes rendszerek előállítására. Mössbauer-spektroszkópia segítségével sikerült bizonyítani, hogy a módszer még nagy óntartalom esetén is szelektíven módosítja az alumíniumoxid és szilícium-dioxid hordozós katalizátorok platina nanorészecskéit ón-multirétegek képződése révén. Az irányított felületi reakciók módszerét sikerült kiterjeszteni az ón mellett germánium módosítóra, valamint aktív-szén-hordozós platinakatalizátorokra is. Az ily módon előállított aktív-szén-hordozós germánium-platina katalizátorok hatékonyan alkalmazhatók a telítetlen alkoholok (citrál) hidrogénezésében. A felületi fémorganikus kémia sikeres alkalmazása aktív-szén-hordozón kivételes és újszerű a szakirodalomban.

A gyógyszer-, növényvédő szer és illatszeripar számára egyre fontosabbá váló, optikailag tiszta anyagok előállításának egyik módszere az aszimmetrikus hidrogénezés. A keto-észterek aszimmetrikus hidrogénezésének vizsgálatából megállapították, hogy a szakirodalomban általánosan elfogadott modell módosításra szorul.

Arany nanorészecskék szilikagélen történő stabilizálására és a részecskeméret szabályozására új módszert dolgoztak ki. A korábbi irodalmi adatokkal szemben az arany nagy katalitikus aktivitást mutat a szénmonoxid oxidációjában. A kutatóknak sikerült nagydiszperzitású ón-oxid nanorétegeket előállítaniuk. Szerkezetüket különböző hordozókon vizsgálták.

Bebizonyosodott, hogy a szén-monoxid oxidációs reakciójában az ón jelentősen promoveálja az alumíniumoxid-hordozós aranykatalizátorokat.

A metanol tüzelőanyag-cellák fontos eleme a szénhordozós platina anódkatalizátor, amely azonban a hidrogén tüzelőanyag szénmonoxid-tartalmától könnyen mérgeződik. A CO-tűrés növelésének módja lehet az adszorbeált szénmonoxid alacsony túlfeszültségeknél történő oxidációja.

*Kutatói kapacitás: 4 fő, ebből intézeti állományban: 4 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 31 M Ft, ebből pályázati forrás: 15,5 M Ft.*

#### *Fotokatalízis kutatások*

A hidrogén termelési és tisztítási eljárások új típusú katalizátorok kifejlesztését igénylik. Ennek érdekében katalizátor-könyvtárak optimalizálását végezték el szénmonoxid preferenciális oxidációjának nagymennyiségű hidrogén jelenlétében történő megvalósítása céljából. A többkomponensű magnéziumoxid-hordozós aranykatalizátorok tervezése során a katalizátorfejlesztés eredményeként közel 94 %-ban sikerült a széndioxidot eltávolítani, miközben az oxigén szelektivitása a CO oxidációjára 55 % felett maradt, azaz jelentősen sikerült visszaszorítani a hidrogénfogyást. Kombinatorikus módszerek alkalmazása nélkül ezt nem lehetett volna megvalósítani.

További fejlesztéseket végeztek, amelyek a vízgáz reakció (hidrogéntisztítás), az etanol reformálása és a fotokatalitikus vízbontás (hidrogénelőállítás) megvalósítására irányultak. A reformálásos vizsgálatokban bioetanol szolgál alapanyagként.

*Kutatói kapacitás: 2 fő, ebből intézeti állományban: 2 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 15 M Ft, ebből pályázati forrás: 7 M Ft.*

#### *Mikro- és mezopórusos anyagok kutatása*

A növényolajok heterogén katalitikus hidrokonzverzióját tanulmányozták gázolaj forráspont tartományába eső, nagy n-alkán-tartalmú termékeleggyé. Tisztázták a katalitikus mechanizmus leglényegesebb jellemzőit. Az alkánképződés konzekutív reakciólépésekben valósul meg. A konzverzió az olaj telítésével és a zsírsav-észterek hidrogenolízisével indul. Az alkánok a hidrogenolízisben keletkező zsírsavak oxigéntelenítésével képződnek. Az alkán termékelegyet téli minőségű dízelolajnak megfelelő hidegtulajdonságokkal és kiváló cetánszámmal (>60) rendelkező, n- és i-alkánokat tartalmazó dízelgázolaj keverőkomponenssé alakították.

Kimutatták, hogy a zsírsavak oxigéntelenítése hordozós fémkatalizátorokon (Ni, Pt, Pd) főként hidrodekarbonilezéssel játszódik le. A reakció termékei alkánok és szén-monoxid. A szén-monoxid a katalizátoron metanizálódási és vízgáz reakciókban vehet részt.

Hordozós fém-oxid (NiMoO<sub>x</sub>, CoMoO<sub>x</sub>) katalizátorokon a reakció termékei alkánok és víz.

A kutatási eredményeket ipari katalizátor fejlesztésénél hasznosítják. Az ipari katalizátorok nagylaboratóriumi vizsgálatát a MOL Zrt.-nél és a Pannon Egyetemen folytatják. A kutatás-fejlesztés eredményeire alapozva a MOL Zrt. 200 000 t/év kapacitású növényolaj-feldolgozó üzem építését tervezi. A kutatás, a létesítendő üzem révén, hozzájárul az EU biohajtóanyagokra vonatkozó előírásainak magyarországi teljesítéséhez.

*Kutatói kapacitás: 2,5 fő, ebből intézeti állományban: 1,5 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 25 M Ft, ebből pályázati forrás: 18 M Ft.*

#### *Nanoszerkezetű fémkatalizátor kutatások*

Részletesen elemezték különböző aminosavak adszorpcióját titán-dioxid( $\text{TiO}_2$ ) felületen. Emellett további, biológiai szempontból fontos felületeken ( $\text{SiO}_2$ ,  $\text{CaF}_2$ ) lejátszódó aminosav-adszorpciós folyamatokat is nyomon követték. Az eredmények megerősítik azt a korábbi feltevést, hogy a savas oldallánc jelenléte meghatározó fontosságú a  $\text{TiO}_2$ -felülethez való kötődésben. Megállapították, hogy az adszorpció a savas aminosavak esetében igen gyors: a  $\text{TiO}_2$ /aminosavoldat határfelület kialakítása után egy-két perc alatt létrejön a stabil adszorbeált réteg. Valószínű, hogy az aszparaginsav molekulák mindkét savas csoportja a felülethez koordinálódik. Megállapították továbbá, hogy  $\text{SiO}_2$ -on az oldat/szilárd határfelületen nem alakul ki adszorbeált réteg, a felületre rászárított molekulák kisméretű kristályokba rendeződnek.  $\text{CaF}_2$ -hordozón az aminosav-kristályok képződése már az oldat/szilárd határfelületen is megfigyelhető volt. Ezen kutatások tehát igazolták, hogy a  $\text{TiO}_2$  más kerámia jellegű felületekhez képest lényegesen erősebb affinitást mutat aminosavak adszorpciójára, ami feltehetőleg kapcsolatba hozható a felület biokompatibilis tulajdonságával.

Polietilénimin oldat felszínére terített semleges (ikerionos), valamint anionos foszfolipid monorétegek spektrumait vették fel az oldatkoncentráció és a pH, valamint a felületi lipidborítottság függvényében. A lipid monoréteg/polimer oldat határfelületen elhelyezkedő vízmolekulák vizsgálatával megállapították, hogy tiszta vízre terítve a foszfolipid-molekulák poláris fejcsoportjai a határfelületi vízmolekulák rendezettségét megnövelik, a polikationnal történő kölcsönhatás azonban a vízszerkezet rendezettségének csökkenéséhez vezet.

Lineáris és elágazó, rövid szénláncú alkoholok adszorpcióját tanulmányozták  $\text{TiO}_2(110)$  egykristályfelületen összegfrekvencia-keltési spektroszkópiával. Megállapították, hogy az alkalmazott kísérleti körülmények között a vizsgált alkoholok molekuláris fiziszorpcióval kapcsolódnak az oxidfelülethez.

Kémiai eljárásokkal funkcionizált, többfalú szén-nanocsövek vizsgálatát végezték el. Az összetételt és a kötésviszonyokat röntgen fotoelektron-spektroszkópiával elemezték.

Kísérleti és elméleti úton is igazolták, hogy lineáris és nemlineáris rezgési spektroszkópiai módszerek kombinációjával felületi peptidok és fehérjék szerkezetéről nagyon részletes szerkezeti információ nyerhető. Az eljárás szilárd/folyadék határfelületen vagy akár a sejtmembránban elhelyezkedő fehérjék és peptidok esetében is alkalmazható.

Alumínium ötvözetek korróziójának gátlására szolgáló  $\text{CeO}_2$ /(bis-1,2-(trietoxiszilil)-etán) rétegpárt vizsgáltak elektronspektroszkópiai eszközökkel. Az együttműködő partner által végzett elektrokémiai vizsgálatokkal együtt az eredmények igazolták, hogy a kettősréteg lényegesen jobb korrózióvédő tulajdonságokkal rendelkezik, mint az egyedi összetevő rétegek.

*Kutatói kapacitás: 4 fő, ebből intézeti állományban: 4 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 18 M Ft, ebből pályázati forrás: 5,8 M Ft.*

#### *Reakciókinetikai kutatások*

Etanol és metanol aromatizációjának tanulmányozása során megállapították, hogy a  $\text{Mo}_2\text{C}$  rávitele a savas centrumokat tartalmazó ZSM-5 mintákra megváltoztatja a zeolit katalitikus



viselkedését, és jelentős mértékben megnöveli az etanolból a különböző aromás vegyületek keletkezésének esélyét. Hasonló, de kisebb promotor-hatást tapasztaltak  $\text{Ga}_2\text{O}_3$  és  $\text{ZnO}$  hozzáadásakor. Kimutatták, hogy az aromás vegyületek képződésében döntő lépés az etanol dehidratációjában előálló etilén aktiválása és aromatiszációja. Az előbbi munkában hatásosnak talált katalizátorok aktívnak bizonyultak a metanol aromatiszációjában is. Főtermékként benzolt, xilolt, toluolt és C9 aromás vegyületeket azonosítottak. Az aromatiszáció ebben az esetben is etilénen keresztül megy végbe, de ezt megelőzően a katalizátoron lejátszódik a C-C kötés képződése.

Hidrogén előállítását vizsgálták  $\text{Mo}_2\text{C}$ -alapú katalizátorokon. Megállapították, ha a ZSM-5 hordozó helyett szén-nanocsövet, vagy Norit-szenet alkalmaznak, akkor drámaian megváltozik az alkoholok bomlása: aromás vegyületek képződése helyett a hidrogénné történő bomlás kerül előtérbe. A  $\text{Mo}_2\text{C}$  előnyös tulajdonsága a katalizátor nagy stabilitása. A  $\text{Mo}_2\text{C}/\text{C}$  katalizátorok katalitikus hatásossága összemérhető a drága nemes fémek katalitikus aktivitásával.

Az NO és az etanol katalitikus reakciójának tanulmányozásában tisztázták a reakció során képződött izocián-komplex kémiáját. Korábbi kutatásuk folytatásaként megvizsgálták a  $\text{CH}_2\text{I}_2$  bomlása révén előállított  $(\text{CH}_2)$ -species adszorpcióját és felületi reakcióját  $\text{Mo}_2\text{C}/\text{Mo}(100)$  felületen. Kísérleti módszerként nagy felbontású elektronenergia-veszteség spektroszkópiát (HREELS) és röntgen fotoelektron-spektroszkópiát alkalmaztak (XPS). Kimutatták, hogy a metilén 160 K körül  $\pi$ -kötésű etilénné alakul. Káliumadalék elősegíti a  $(\text{CH}_2)$ -fragmentek kapcsolódását.

Részletesen vizsgálták az elektron-, foton- és ionspektroszkópiai módszerekkel jellemzett mono- és bimetalikus nanoszerkezetek tulajdonságait. A morfológiát elsősorban STM-módszerrel követték. A fém-nanorészecskék szerkezetét, a hordozóval való kölcsönhatását AES-, XPS- és LEIS-módszerrel határozták meg. Szerkezetvizsgálati tanulmányaikat kiterjesztették a potenciálisan fémet helyettesítő molibdén-karbid nanostrukturákra is. Jellemezték az (Au-Mo)-bimetalikus rendszer sajátosságait, de kiterjedtebb vizsgálatokat végeztek a polikristályos hordozóra felvitt (Au-Rh)-bimetalikus nanorendszeren. Megállapították, hogy a kopartner elősegíti az arany diszperzálásának növelését és stabilitását. Tesztreakcióként elsősorban a hidrogén jelenlétében végbemenő szénmonoxid-oxidációt használtak. A technológiailag fontos, ún. PROX-reakcióban az eddigi vizsgálatok azt mutatják, hogy optimális Au-Rh arányt alkalmazva a szénmonoxid-oxidáció jó hatásfokkal hidrogén jelenlétében is lejátszódik. (C-N)-tartalmú vegyületek átalakításában az eddig tanulmányozott kétfémes nanorendszerek biztató eredményeket mutatnak mind technológiai, mind környezetvédelmi eljárásokban történő hasznosítás céljára.

*Kutatói kapacitás: 10 fő, ebből intézeti állományban: 7 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 49,5 M Ft, ebből pályázati ráfordítás: 9,5 M Ft.*

#### *Nukleáris szerkezetvizsgálati kutatások*

A Glasgow-i Caledonia Egyetemen együttműködve, sikerült újabb, igen hatásos korrózióvédelmi galvánbevonatokat készíteniük. Az elektrokémiai leválasztás paramétereinek alkalmas megválasztásával és szisztematikus változtatásával előállították az (Sn-Co-Fe) terner ötvözetbevonatot. Az elektrokémiai úton nyert ötvözetek szerkezetét, elem- és fázisösszetételét, valamint mágneses orientációját röntgendiffrakcióval, pásztázó elektronmikroszkóppal, elektron mikropróba-analízissel és  $^{57}\text{Fe}$ , valamint  $^{119}\text{Sn}$  Mössbauer-spektroszkópiával vizsgálták az előállítási paraméterek függvényében. Megállapították, hogy

az (Sn-Co-Fe)-terner ötvözetek túlnyomó részben új, eddig nem ismert fázisokból állnak. Ezek termikus úton nem állíthatók elő és nem szerepelnek az egyensúlyi fázisdiagramban sem. Ezeknek ígéretes felhasználása lehet elektródaként akkumulátorokban is.

$^{57}\text{Fe}$  Mössbauer-spektroszkópia segítségével rendkívül nagy, 157,6 T belső mágneses teret figyeltek meg a  $\text{Fe}[\text{C}(\text{SiMe}_3)_3]_2$  vasvegyületben. Ilyen nagy belső mágneses teret eddig még vasvegyületben senki sem mért. Elméleti molekulapálya-számításuk alapján magyarázatot adtak a szokatlanul nagy mágneses tér fellépésére.

A kolosszális mágneses ellenállást (KME) mutató anyagok fontosak az adattároló-gyártás és fejlesztés számára. 2007-ben perovszkit szerkezettel rendelkező KME-anyagok szerkezetvizsgálatát végezték el Mössbauer-spektroszkópia és mágneses mérések segítségével. Részletesen elemezték ezen anyagok elektromos és mágneses fázisátalakulásait mind az összetétel, mind a hőmérséklet függvényében. Ezzel párhuzamosan elemanalízist és mágneses szuszceptibilitás méréseket is végeztek. Francia együttműködés keretében további alacsony hőmérsékletű és nagy külső mágneses térben felvett Mössbauer-spektrumokat is készítettek. Méréseik alapján bizonyítható a stronciumhelyettesítés hatására történő fázisátmenet, illetve a külső mágneses térnek a mágneses klaszterekre gyakorolt hatása.

Mössbauer-spektroszkópia segítségével vizsgálták a növényi vasfelvétel mechanizmusát uborka és búza esetében. Méréseiket TÉT-együttműködés keretében kiterjesztették az uborka gyökerének folyékony hélium hőmérsékletén készült mérésére. Az eredmények alapján kiegészítették a vasfelvétel mechanizmusára vonatkozó eddigi ismereteket.

Gyógyszertechnológiailag fontos polimerekben vizsgálták az öregedés és a vízfelvétel hatásait pozitronannihilációs és hagyományos polimervizsgáló módszerek kombinációjával. A hatóanyag kioldódását különböző szerkezetű polimerekben pozitronannihilációs mérésekkel követték nyomon. A munka eredményeit a gyógyszeriparban tablettabevonatok tervezésénél alkalmazzák.

*Kutatói kapacitás: 4 fő, ebből intézeti állományban: 3 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 20 M Ft, ebből pályázati forrás: 5 M Ft.*

### **III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása**

#### *Hazai kapcsolatok*

A kutatóhely széles körben és eredményesen folytat együttműködéseket mind a hazai egyetemekkel és más akadémiai kutatóhelyekkel, mind iparvállalatokkal. A kapcsolatok magukban foglalják a közös kutatási pályázati tevékenységet, de kiterjednek az oktatásra, valamint a tudományos rendezvények szervezésére is.

Az oktatómunkában való igen aktív részvételt igazolja az Intézet kutatói által tartott elméleti kurzusok, ill. gyakorlatok, továbbá a PhD-t, diplomamunkát és szakdolgozatot készítő hallgatók jelentős száma (lásd a mellékelt összefoglaló táblázatot). Különösen a BME-vel és az ELTE-vel erősek a szakmai és oktatási kapcsolataik. Az egyetemi kutatókkal összesen 32 közös publikációt jelentettek meg 2007-ben.

Passzívált vasfelületen kialakított foszfonát védőrétegek Mössbauer-spektroszkópiai vizsgálata alapján megállapították, hogy a vas-foszfonát réteg vastagsága nem mérhető, aktívabb, párologtatott és ionimplantált  $\text{Fe}^{57}$ -réteget használva viszont a vas(II)-foszfonát és vas(III)-foszfonát réteg is kimutatható. Az ELTE Magkémia Tanszékkal folytatott együttműködés eredményeiről két tudományos dolgozatot jelentettek meg 2007-ben.

A Szegedi Tudományegyetemmel az „Új mezopórusos katalizátorok előállítása és vizsgálata” c. témában hordozós Ni-katalizátort állítottak elő egységes pórusátmérőjű, hexagonális elrendeződésű, mezopórusos szilícium-dioxid hordozó alkalmazásával. Felderítették a katalizátor hatásmechanizmusát toluol hidrogénezésében. Két közös publikációt jelentettek meg.

A BME-vel az „Új aktívszén készítmények előállítása és vizsgálata” c. témában szén molekulaszitát állítottak elő fából, és eljárást dolgoztak ki a molekulaszita tulajdonságok módosítására. Az eredményeket két publikációban foglalták össze.

A Pannon Egyetemmel a „Biogázolaj előállítása növényolaj katalitikus hidrokonzverziójával” c. témában dolgoznak közösen. Heterogén katalitikus eljárást dolgoztak ki biogázolaj cetánszámának javítására. A közösen elért eredményekről két tudományos közleményben adtak tájékoztatást.

Az ELTE Kémiai Intézet kutatóival együttműködve sikerült újabb, igen hatásos korrózióvédelmi galvánbevonatokat készíteniük. A paraméterek alkalmas megválasztásával és szisztematikus változtatásával sikerült előállítani az (Sn-Co-Fe) terner ötvözetbevonatot. 2007-ben 19 közös publikáció jelzi a nukleáris szerkezetvizsgálati módszereket alkalmazó kutatási kooperáció kiemelkedő eredményességét.

MTA-intézetekkel is sikeres közös kutatásokat folytattak, így az ATOMKI és az IKI kutatóival hét közös dolgozatot írtak.

Az intézet kiterjedt, hazai ipari kapcsolatait mutatja, hogy összesen hét K+F projektben (MAGNESOM, ALUTITAN, NANOLAKK, METANANO, NANODRUG, SPEC-PUR, ALMA-ACID) vesznek részt közösen a következő iparvállalatokkal: TKI-Ferrit Kft.; Pharmathesis Bt.; Megapharma Kft.; Vet-Pharma Kft.; BAYATI, Bay Zoltán Anyagtudományi és Technológiai Intézet; S-Metalltech 98 Anyagtechnológiai Kutató-Fejlesztő Kft.; Metal-Art Nemesfémipari Rt.; TMP Titanium Metal Processing Kereskedelmi és Szolgáltató Kft.; Egrokor Rt.; Kálmán Bútoripari Kft.; Dunamenti Tűzvédelem Rt.; Festékipari Kutató Kft.; KEMIKÁL Rt.; MAL Rt.; Poli-Farbe Vegyipari Kft.; Metal-Art Nemesfémipari Zrt; Elastico Kft., Nanochem Kft..

„Új, szennyvíz- és iszapkezelésre alkalmas adalékanyag előállítása a rudabányai vasércdúsító meddőjének kémiai feldolgozásával” c. GVOP-kutatások során eljárást fejlesztettek ki flokkulálószerként alkalmazható vas(III)-klorid oldat gyártására. Együttműködő partnerintézmények: Multiprojekt Fejlesztő, Vállalkozó, Kivitelező Kft., Budaörs; Jelen és Jövő Kft., Szeged.

### *Nemzetközi kapcsolatok*

Az intézetnek hagyományosan széles körű és eredményes nemzetközi tudományos kapcsolatai vannak. A kapcsolatoknak TÉT-együttműködési, ill. kétoldalú, akadémiák közötti szerződések adnak keretet. MTA-kétoldalú egyezmények keretében 2007-ben 13 kutatót fogadtak; az Intézet kutatói közül öten vettek részt külföldi tanulmányúton MTA-egyezményes témában. Nemzetközi konferenciákon 49 előadást tartottak.

„A réz új korróziós inhibitorai– Csökkenthető a környezeti kockázat?” c. TÉT-egyezmény lehetővé tette, hogy a University of Zagreb kutatóival új korróziós inhibitorokat fejlesszenek ki. Az eredményekről négy közös publikációban számoltak be.

A „Különböző fémek mikrobiológiai korróziója – a folyamat gátlása és gazdasági szempontok” c. Tét-projekt keretében (University of Lisbon) a mikrobiológiai korrózió gátlására új, gazdaságilag is versenyképes inhibitorokat fejlesztettek ki. Hét közös publikációt jelentettek meg.

Az „Új típusú heterogén katalizátorok alacsony hőmérsékletű oxidációra” c. román-magyar-Tét együttműködés (partnerintézmény: Institute of Physical Chemistry "Ilie Murgulescu" of the Romanian Academy of Science, Bukarest) során oxidkatalizátorokat állítottak elő. Vizsgálták elektromos vezetőképességüket és szénmonoxid-oxidációban, valamint propán oxidációban történő alkalmazhatóságukat. Az eredményeket közös publikációban foglalták össze.

A „Mikro- és mezopórusos szilikátok szerkezeti és savas tulajdonságainak módosítása és alkalmazásuk katalizátor és adszorbens anyagokként” c. témában, MTA-BTA egyezmény keretében (együttműködő partner: Institute of Organic Chemistry, Bulgarian Academy of Sciences, Szófia, Bulgária) az eredményes kutatási kapcsolatok révén három közös publikációt jelentettek meg.

Az „Indium alakulatok jellemzése indium és indium-palládium zeolitokban” c. argentin-magyar Tét-egyezmény keretében (együttműködő partnerintézmény: INCAPE, FIQ, UNL-CONICET, Santa Fe, Argentína) kölcsönös tanulmányutak valósultak meg. A közös kutatások eredményeit folyóiratcikkekben publikálták.

A Polytechnic School of the São Paulo University, Brazília kutatóival folytatott együttműködés során alumíniumötvözet korróziójának gátlására szolgáló  $\text{CeO}_2$ /(bis-1,2-(trietoxiszilil)-etán) rétegpárt vizsgáltak elektrokémiai és elektronspektroszkópiai eszközökkel. A vizsgálatok igazolták, hogy a kettősréteg lényegesen jobb korrózióvédő tulajdonságokkal rendelkezik, mint az egyedi összetevő rétegek. Az eredményekről közös folyóiratcikkekben számoltak be.

Az MTA-Orosz Tudományos Akadémia közötti együttműködés „Növényi és bakteriális metabolitok fémekkel való kölcsönhatásának vizsgálata” c. témában (partner: OTA Biokémiai és Növényélettani Kutatóintézet) megvizsgálták és leírták a vas(III)-komplex képződésének és redukciójának mechanizmusát indol-3-karbonsavat, ecetsavat, propionsavat, illetve butánsavat tartalmazó vizes oldatokban. Megállapították, hogy a két kation-kötőhely nem azonos affinitással köti meg a  $(\text{Co}^{2+})$ -ionokat. 2007-ben két közös publikációt jelentettek meg.

A „Fe-EDTE és rokon komplexek hidrogén-peroxidos oxidációja mechanizmusának vizsgálata” c. témában MTA-OTKA-NSF mobilitási támogatás (partnerintézet: Florida Institute of Technology, Melbourne, FL, USA) több tanulmányút valósult meg. Három közös folyóiratcikk jelent meg az eredményekről.

A „Mágneses ellenállást mutató perovszkitok és biológialag fontos vegyületek vizsgálata Mössbauer-spektroszkópiával” c. témában (magyar-francia Tét-egyezmény; CNRS Le Mans Szilárdtestfizikai Kutatólaboratórium) folyó együttműködés nagyon hasznos, mivel a partnerek jól kihasználják az egyes laboratóriumokban lévő, egymást kiegészítő műszereket. Az eredményekről 2007-ben két közös dolgozatban számoltak be.

Az „Elektrokémiai bevonatok előállítása és jellemzése” c. témában (együttműködő partner: Caledonian University, Glasgow, UK) új amorf és ferromágneses biner és terner ötvözetbevonatokat állítottak elő és jellemeztek. A sikeres közös munkát két közös publikáció megjelenése igazolja.

A „Fémek, ötvözetek és oxidok vizsgálata” c. témában (együttműködő partner: University of Tokyo, Japán) a spintronikában alkalmazható, dópolt félvezető, nanoszerkezetű oxidok ferromágneses tulajdonságával kapcsolatos új eredményekhez jutottak a Mössbauer-spektroszkópiai mérések révén. Az eredményeket három közös publikációban foglalták össze.

Nagyon sikeres az “Üvegállapot vizsgálata” c. kutatási projekt (együttműködő partner: Kinki University és Ube National College of Technology, Japán), aminek eredményeként elektromos vezetőképességgel rendelkező, a partner által szabadalmaztatott, Japánban már ipari gyártásban is lévő amorf üvegek vizsgálata során sikerült alkalmas hőkezelési körülményeket találni a kedvező elektromos tulajdonságok kialakításához. Három közös publikációt jelentettek meg 2007-ben.

A „Különleges elektromos és mágneses tulajdonságú anyagok előállítása és vizsgálata” c. téma kutatásainak során (együttműködő partner: Institute for Chemical Technology of Inorganic Materials, Johannes Kepler University, Linz, Ausztria) új nontronit formációt találtak és jellemeztek. Az eredményekről két publikációt jelentettek meg 2007-ben.

Kétoldalú együttműködés (partner: Lybian Petroleum Research Institute) keretében két új korróziós inhibitorösszetételt dolgoztak ki nagy kloridion-koncentrációjú hűtővízközeghez. Ezek közül az egyik foszfonát alapú termék. A projekt keretében konzultációt és szakmai továbbképzést tartottak a líbiai korróziós mérnökök és kutatók számára mind Budapesten, mind Tripoliban.

#### **IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése**

A „HUNN Sixth Framework Programme – Hungarian Network of Excellent Centers on Nanosciences” c. projekt koordinátora az intézet. A projektben 13 intézmény vesz részt, ebből 7 magyar (MTA KK, BME, ELTE, Miskolci Egyetem, Debreceni Egyetem, Szegedi Egyetem, BAYATI) és 6 külföldi intézmény (SciTech Link, Svédország; Tel Aviv University, Izrael; NMRC, Cork, Írország; Lund University, Svédország; Atomic Energy Commission Grenoble, Franciaország; University of Newcastle, Nagy-Britannia). A projekt keretében célul tűzték ki egy virtuális, magyar nanotudományi központ létrehozását, amelynek a feladata a Magyarországon nanokutatással foglalkozó intézmények hálózatának kialakítása, a kölcsönös információcsere intézményes biztosítása, adatbázisok létrehozása, kutatócserek elősegítése, közös oktatási anyagok létrehozása és a magyar részvétel elősegítése a keretprogramban. Fontos feladat volt a kutatóintézetek és a nanotechnológiával foglalkozó vállalati szakemberek munkájának összehangolása, ami az ún. „Technological Transfer Day” rendezvények keretében történt. Nagy hangsúlyt helyeztek a hazai kis- és középvállalatok bevonására.

A hidrogénnek, mint a jövő környezetbarát üzemanyagának katalitikus tisztítása fontos feladat, és hozzájárul a „hidrogéngazdaság” kiépítéséhez, ami már Magyarországon is elkezdődött. A „Funkcionalizált határfelületek fejlesztése és alkalmazása specifikus biokémiai és kémiai rendszerekben” elnevezésű NKFP-projekt keretében a szénmonoxidnak hidrogénből történő szelektív eltávolítására alkalmas többfemes oxidhordozós katalizátorokat fejlesztettek ki. A legjobb és legstabilabb katalizátornak az  $(Al_2O_3)$ -hordozós aranykatalizátorok bizonyultak, ólom, réz, cérium, szamárium bevitelét követően.

A Jedlik Ányos Program (Versenyképes ipar és agrárium) „Újgenerációs biohajtóanyagok (elsősorban biogázolaj) kifejlesztése” c. témájában a 2007. évi munka fontosabb eredményei a következők: a növényi olajok kinyerési technológiájának fejlesztése, új katalizátorok

kifejlesztése, a növényolaj gázolajjá alakítása laboratóriumi és nagylaboratóriumi méretű kísérletekben katalitikus hidrokonzverzióval.

Az „Étilalkohol átalakítása aromás vegyületekké és hidrogénné” c. NKTH által támogatott kutatások 2007. évi munkájának legfontosabb eredménye annak megállapítása, hogy a szén-alapú hordozóra felvitt  $\text{Mo}_2\text{C}$ -on a metanol és etanol átalakulása a hidrogénfejlődés irányába megy végbe.

A GVOP „Új, szennyvíz- és iszapkezelésre alkalmas adalékanyag előállítás a rudabányai vasércdúsító meddőjének kémiai feldolgozásával” c. témájában félüzemi szintű berendezést konstruáltak, ami a szennyvíztisztításban flokkulációs szerként alkalmazható vas(III)-klorid-tartalmú oldat gyártására alkalmas. A munkát az intézet koordinálja.

A „Felületi nanoszerkezeteken adszorbeált formák IR-, elektron-, foton- és ionspektroszkópiai módszerekkel” c. OTKA-témában elért eredményekről 22 tudományos publikációt jelentettek meg. Fontos eredményeket értek el a bimetallikus nanorendszerek jellemzése területén. Megállapították, hogy az (Au-Rh)-rendszer jelentős hatás fejt ki a PROX-reakcióban.

OTKA támogatás segítségével a „Mágneses ellenállást mutató perovszkitok és spinellek vizsgálata Mössbauer-spektroszkópiával, mágneses és röntgendiffrakciós módszerekkel” c. témában elért eddigi eredményeiket három publikációban és egy előadásban foglalták össze.

A „Szerkezetváltozások hatása kondenzált fázisok szabadterefogatóra: pozitronannihilációs vizsgálatok” c. OTKA téma 2007. évi kutatásainak során a gyógyszertechnológiailag fontos polimerekben az öregedés és a vízfelvétel hatásait vizsgálták pozitronannihilációs és hagyományos polimervizsgáló módszerek kombinációjával. A munka eredményeit a gyógyszeriparban tablettabevonatok tervezésénél alkalmazzák.

Az „EXCELL – Network of Excellence – to overcome the fragmentation of European research in multifunctional thin films (Network of Excellence)” (Projekt szám – 515703-2, 2005-2008) c. programban 13 intézmény vesz részt. A projekt célja egy európai kutatási hálózat létrehozása, illetve az európai kutatási erőfeszítések fragmentáltságának csökkentése a kemény, kopás- és korrózióálló, bioaktív és más „smart” nanostrukturált vékonyrétegek kutatásának területén. A projekt alapján létrejött hálózaton keresztül egy nemzetközi konferenciát szerveztek (1st International Conference on Functional Nanocoatings).

A „POLYCOND – Creating competitive edge for European polymer processing industry driving new added value products with polymer (Integral Project)” (Projekt szám – IP 515835-2, 2005-2009) c. projektben 20 intézmény vesz részt. A projekt célja az európai polimerfeldolgozó ipar olyan versenyképes ágazatának megteremtése, amely nagy értékű, vezetőképes polimertermékeket állít elő. A projektben a polimerekhez többféle adalékot, pl. jó elektromos vezető szén-nanocsövet adnak azért, hogy a célt el lehessen érni. Az iparban előállított szén-nanocső egyenletes eloszlása a polimer mátrixban nagyon nehéz feladat. A lehetséges megoldások egyike a szén-nanocső felületének fizikai vagy kémiai módosítása. A kutatócsoport felületmódosító eljárásokat dolgozott ki, amelyekkel különböző polimerekbe a szén-nanocső adalékolhatóvá tehető.

Az INTAS-Holistic Strategies For Chromate Replacement in Aluminium Surface Treatments and Protective Coatings (Projekt szám INTAS 04-80-7219, 2005-2008) c. projekt feladata olyan új, környezetbarát, korróziós védőrétegek kifejlesztése nagy szilárdságú alumínium ötvözetekhez, amelyek korrózióvédő és tapadásjavító hatással is rendelkeznek. Fontos szempont továbbá, hogy a védőréteg megakadályozza a rézben feldúsult katódos

intermetallikus szemcsék környezetében az alumínium-mátrix lokális korrózióját is. Az elmúlt évben kidolgoztak egy foszfonátos eljárást, amely kedvező eredményeket adott.

A THINFILM-Characterisation of Thin Films on Rough Steel Substrates (Projekt szám – RFS-CT-2005-00048, 2005-2008) c. projekt célja az ipar (autógyártás, csomagolóanyag előállítás) számára fontos vékonyrétegek (0.5 és 1000 nm között) jellemzése, különös tekintettel a vékonyrétegek vastagságára, összetételére, az összetétel mélységbeli és oldalirányú változására és a szubsztrátok durvaságára. A kutatás eredményeként egy kiválasztott mintát hitelesítettek, továbbá kidolgozták a vékonyrétegek vizsgálati folyamatát, és referencia anyagokat készítettek.

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

1. Gergely A, Telegdi J, Mészáros E, Pásztai Z, Tárkányi G, Kármán FH, Kálmán E: Modification of multi-walled carbon nanotubes by Diels-Alder and Sandmeyer reactions, *Journal of Nanoscience and Nanotechnology* 7(8): 2795–2807 (2007)
2. Alagta A, Felhősi I, Telegdi J, Bertóti I, Kálmán E: Effect of metal ions on corrosion inhibition of pimeloyl-1,5-di-hydroxamic acid for steel in neutral solution, *Corrosion Science* 49(6): 2754–2766 (2007)
3. Pasztornák A, Stichleutner S, Felhősi I, Keresztes Zs, Nagy F, Kuzmann E, Vértes A, Homonnay Z, Pető G, Kálmán E: Surface modification of passive iron by alkyl-phosphonic acid layers, *Electrochimica Acta* 53: 337–345 (2007)
4. Margitfalvi JL, Tálas E, Zsila F, Kristyán S: Dimer formation of cinchonidine in liquid phase: relevance to the heterogeneous catalytic enantioselective hydrogenation of ethyl pyruvate, *Tetrahedron-Asymmetry* 18(6): 750–758 (2007)
5. Lónyi F, Valyon J, Gutierrez L, Ulla MA, Lombardo EA: The SCR of NO with CH<sub>4</sub> over Co-, Co,Pt-, and H-mordenite catalysts, *Applied Catalysis B-Environmental* 73(1-2): 1–10 (2007)
6. Wang J, Pásztai Z, Clarke ML, Chen X, Chen Z: Deduction of structural information of interfacial proteins by combined vibrational spectroscopic methods, *Journal of Physical Chemistry B* 111(21): 6088–6095 (2007)
7. Széchenyi A, Solymosi E: Production of hydrogen in the decomposition of ethanol and methanol over unsupported Mo<sub>2</sub>C catalysts, *Journal of Physical Chemistry C* 111, 9509–9515 (2007)
8. Németh Z, Homonnay E, Árva F, Klencsár Z, Kuzmann E, Vértes A et. al.: Response of La<sub>0.8</sub>Sr<sub>0.2</sub>CoO<sub>3-delta</sub> to perturbations on the CoO<sub>3</sub> sublattice, *European Physical Journal B*, 57, 257–263 (2007)

## VI. A kutatóhely 2007. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA Kémiai Kutatóközpont, Felületkémiai és Katalízis Intézet

|  |        |  |           |
|--|--------|--|-----------|
| Átlaglétszám <sup>1</sup> :  | 68     | Ebből kutató <sup>2</sup> :              | 53        |
| PhD, kandidátus:   | 20     | MTA doktora:                             | 6         |
|  |        | levelező tag:                            | 0         |
|  |        | rendes tag:                              | 2         |
| 35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:                              |        |  | 16        |
| Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> : |        |  | 75        |
| Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :                 |        |  | 73        |
| <i>Ebből</i> impakt faktoros publikáció magyarul:  | 0      | idegen nyelven:                          | 39        |
| nemzetközi együttműködés keretében:  | 21     | SCI által regisztrált folyóiratban:      | 39        |
| összesített impakt faktor <sup>5</sup> :   | 87,867 | összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :   | 461       |
| összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:   |        |  | 342       |
| <i>Magyarul</i> könyv/monográfia <sup>7</sup> :  | 0      | könyvfejezet:                            | 0         |
| <i>Idegen</i> nyelven könyv:   | 0      | könyvfejezet:                            | 16        |
|  |        | jegyzet:                                 | 0         |
|  |        | jegyzet:                                 | 0         |
| Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:   | 9      | MTA doktora:                             | 0         |
|  |        | levelező tag:                            | 0         |
|  |        | rendes tag:                              | 0         |
| Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :                                   | 1      | <i>ebből</i> külföldön:                  | 0         |
| Értékesített szabadalmak száma:  |        |  | 0         |
| Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :         | 49     | posztterek száma:                        | 33        |
| Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :   |        |  | 0         |
| Nemzetközi tud. bizottsági tagság:   | 16     | Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:      | 19        |
| Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :             |        |  | 24        |
| Ebből doktori iskolákban oktatók száma:  | 5      | Doktori iskolát vezetőik száma:          | 0         |
| Elméleti kurzusok száma <sup>13</sup> :  | 18     | Gyakorlati kurzusok száma:               | 11        |
| TDK munkát készítő hallgatók száma:  | 2      | Diplomamunkát:                           | 2         |
|  |        | PhD-t:                                   | 24        |
| Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>14</sup> :                  |        |  | 970       |
| Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>15</sup> :               |        |  | 292,3 MFt |
| Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>16</sup> :   | 4      | Teljes saját bevétel:                    | 319,5 MFt |
| Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :                         |        |  | 10,1 MFt  |
| Az év folyamán művelt OTKA témák száma:  |        |  | 11        |
|  |        | A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: | 26,7 MFt  |
| Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma <sup>18</sup> :                         |        |  | 14        |
| NKFP:  | 9      | A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: | 149 MFt   |
| Egyéb:   | 5      | A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: | 1,3 MFt   |
| NFT témák száma <sup>19</sup> :  | 3      | A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: | 50,3 MFt  |
| Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>20</sup> :                          |        |  | 8         |
| EU forrásból:  | 5      | A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: | 13,2 MFt  |
| Egyéb:   | 3      | A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: | 1,5 MFt   |
| Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:                              |        |  | 19        |
|  |        | A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: | 67,2 MFt  |
| Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>21</sup> :                            |        |  | 0 MFt     |

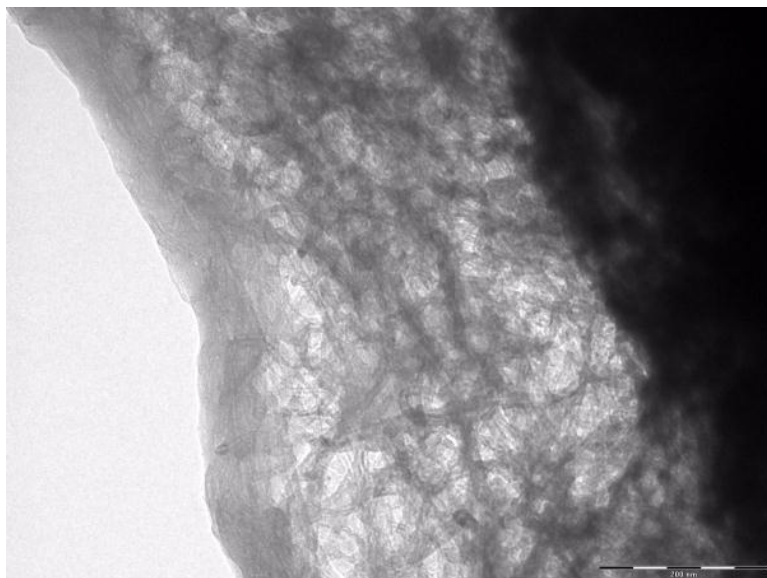


## Az MTA KK Felületkémiai és Katalízis Intézetének kiemelten sikeres kutatási területei 2007-ben

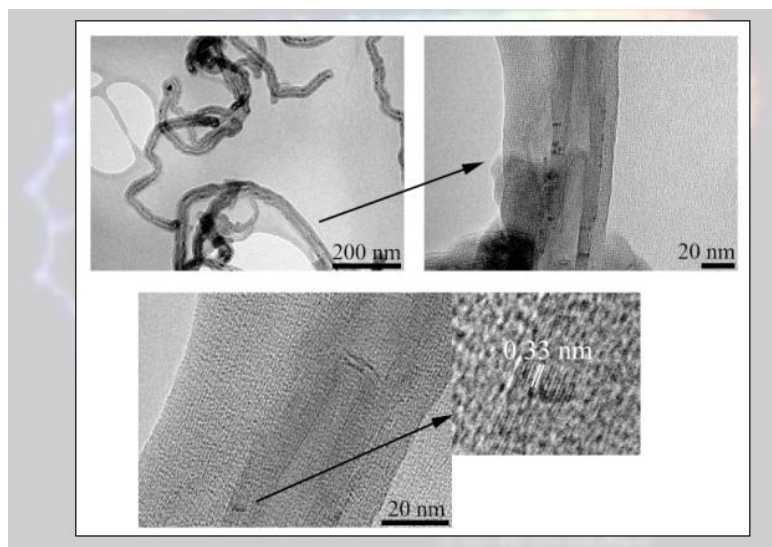
### *Új tulajdonságú szén-nanocsövek és nanokompozitok kutatása*

A szén-nanocsövek (melyek néhány  $\mu\text{m}$  hosszú feltekeredett grafitsíkok, amelyek pl. 1-2 nm átmérőjűek, vezetők vagy félvezetők lehetnek) ígéretes tulajdonságokat mutatnak mind az anyagtudományi, mind az orvosi alkalmazhatóság területén. Felhasználhatók például polimerek töltőanyagaként, mivel a nanocsövek jelenléte az alappolimer fizikai tulajdonságait nagymértékben megváltoztatja. Mivel alkalmazásuknak határt szab inert tulajdonságuk (oldhatóságuk, ill. diszpergálódásra való képtelenségük), kutatásuk az egy- és többfalú szén-nanocsövek fizikai és kémiai módosításán kívül a (hidrofil/hidrofób) műanyagokba való beépíthetőségére is kiterjedt. Kémiai módosítással, ill. fiziszorpcióval sikerült a szén-nanocsöveket úgy átalakítani, hogy új tulajdonságú, széles felhasználási lehetőséget kínáló termékek keletkezzenek, vagyis a nanocsöveket a felületmódosítás során a felhasználási területnek megfelelően hidrofíllé vagy hidrofóbbá tudják alakítani. Így vezetőképes, antisztatikus polimer nanokompozit előállításuk válik lehetővé. Ezen az úton új, korróziógátló festékek, égésgátló adalékanyagok, bio-szenzorok, valamint pl. új aerogélek előállítására nyílik lehetőség.

Az alábbi ábrán jól látszik, hogy a tisztítatlan szén-nanocsöveket kiterjedt amorf szénháló veszi körül. Az elektronmikroszkópos felvétel egyértelműen feltárja azt is, hogy a nanocső halmok gombolyag szerkezetűek. Ezek a gombolyagok fizikailag sem engedik az egyes szén-nanocsövek diszpergálását.



**1. ábra.** Nyers, tisztítatlan és módosítatlan szén-nanocső TEM felvétele (20000-es nagyítás).



**2. ábra.** Többfalú nanocső (MWNT)

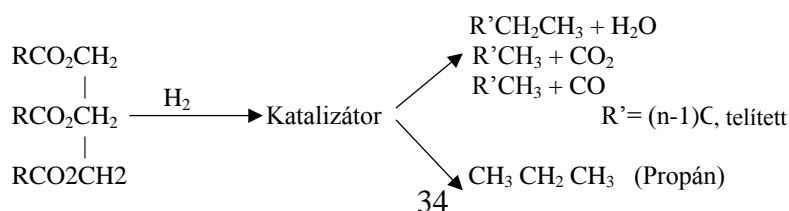
A viszonylagosan jó minőségű szén-nanocső gyártása nagy mennyiségben ma kizárólag katalitikus kémiai gőzfázisú leválasztással történik (CCVD). A módszer hátránya, hogy kismértékben hibás szerkezetű, nem tökéletesen grafitizált szén-nanocsövek is képződnek a katalitikus reakció során, olyanok, melyek a nanocső palástján néhol hibahelyet és külső felületükön nagy mennyiségű amorf szenet tartalmaznak szennyezésként.

A kutatás célja egy egyszerű funkcionálizáló eljárás kidolgozása volt többfalú szén-nanocsövekre olyan módosítással, melynek révén a nanocső diszpergálhatósága megnövekszik, ugyanakkor vezetőképessége nem változik. Fontos szempont volt, hogy az eljárás környezetbarát, az előállított termék pedig termikusan elegendően stabil legyen. Az előkísérletek alapján megállapítható, hogy a kutatók által kidolgozott módosító eljárás alkalmas kisüzemi vagy ipari méretekben történő előállításra. A módosított nanocsövek egyik típusa közvetlenül vezető polimerrel, más típusa szerkezeti polimerrel történő elegyítést tesz lehetővé. A kutatás-fejlesztés eredményei az Európai Unió 6-os keretprogramja keretében (POLYCOND project) hasznosultak.

#### *Biogázolaj előállítás növényolaj katalitikus hidrokonzverziójával*

A növényolaj katalitikus hidrokonzverziójával olyan nagy értékű terméket lehet előállítani, amely a hagyományos dízelolajhoz hasonlóan egyenes és elágazó szénláncú alkánok keveréke, de nagyobb cetánszáma és kisebb szennyezőanyag-tartalma, például kisebb kéntartalma miatt, a hagyományos dízelolaj minőségjavító keverőkomponenseként alkalmazható.

A munka során növényolajok heterogén katalitikus hidrokonzverzióját tanulmányozták gázolaj forráspont tartományába eső, nagy n-alkán tartalmú termékeleggyé. A lejátszódó folyamatok sematikusan a következők:



Triglicerid, R=nC, telítetlen kötésekkel

Modellvegyületként a még növényolaj tulajdonságokat mutató legegyszerűbb trigliceridet, a trikaprilint (kaprilsav-glicerin-észtert) választva, tisztázták a katalitikus mechanizmus leglényegesebb jellemzőit. Az alkánképződés konszekutív reakciólépésekben valósul meg. A konverzió az olaj telítésével és a zsírsav-észterek hidrogenolízisével indul. Az alkánok a hidrogenolízisben keletkező zsírsavak oxigéntelenítésével képződnek. Kimutatták, hogy a zsírsavak oxigéntelenítése hordozós fémkatalizátorokon (Ni, Pt, Pd) főként hidrodekarbonilezéssel játszódik le. A reakció termékei alkánok és szén-monoxid. A szén-monoxid a katalizátoron metanizálódási és vízgáz reakciókban vehet részt. Hordozós fémoxid (NiMoOx, CoMoOx) katalizátorokon a zsírsav zsír-aldehiden és zsír-alkoholon keresztül vízképződés közben redukálódik alkánná.

A kutatási eredményeket ipari katalizátorok fejlesztésénél hasznosítják. Az ipari katalizátorok nagylaboratóriumi vizsgálata a MOL Zrt.-nél és a Pannon Egyetemen folytatódik. A kutatás-fejlesztés eredményeire alapozva a MOL Zrt. egy 200 000 t/év kapacitású növényolaj-feldolgozó üzem építését tervezi. A kutatás, a létesítendő üzem révén, hozzájárul az EU biohajtóanyagokra vonatkozó előírásainak magyarországi teljesítéséhez. A kutatás-fejlesztést az NKFP-A2-2006-0034 sz. projekt támogatta.

### *Szénmonoxid preferenciális oxidációja (PROX)*

Az elektromos energia hidrogénből történő előállítása üzemanyagcellákban nagy tisztaságú hidrogénforrást igényel, hiszen az üzemanyagcellák elektródjai könnyen mérgeződhetnek már kis mennyiségű szénmonoxid (CO) jelenlétében is. Az intézet munkatársai katalizátorkönyvtárak kémiai összetételét optimalizálták CO preferenciális oxidációjára nagymennyiségű hidrogén jelenlétében. A kombinatorikus módszerek alkalmazása nagyobb lehetőséget ad új komponensek tesztelésére és megnöveli új, katalitikusan aktív anyagok kifejlesztésének az esélyét. Nyilvánvalóvá vált, hogy az optimális katalitikus hatás elérése egyrészt csak többkomponensű katalizátorokkal lehetséges, másrészt az optimális katalizátorok összetétele jelentős mértékben függ a katalizátor reakció előtti előkezelésének hőmérsékletétől és az alkalmazott gáz atmoszférájától.

A többkomponensű magnéziumoxid-hordozós aranykatalizátorok tervezése során az ólom, a szamárium és a vanádium bizonyult a legjobb módosítónak. A katalizátorfejlesztés eredményeként közel 94 %-ban sikerült a szénmonoxidot eltávolítani, miközben az oxigén szelektivitása a szénmonoxid oxidációjára 55 % felett maradt, azaz jelentősen sikerült visszaszorítani a hidrogénfogyást.

A módosítók szerepének felderítésére irányuló kinetikai vizsgálatok egyértelműen mutatták a vanádium és a szamárium közötti szinergetikus hatást, amelynek eredményeképpen jelentősen megnőtt a CO oxidációjának sebessége. A vanádiumhoz és a szamáriumhoz hozzáadott ólom gyakorlatilag nem hatott a szénmonoxid oxidációjának sebességére, viszont jelentősen lecsökkentette a hidrogén oxidációjának sebességét.



**Kémiai Kutatóközpont**  
**SZERKEZETI KÉMIAI INTÉZET**

1025 Budapest, Pusztaszeri út 59-67, 1525 Budapest, Pf. 17.  
Telefon: 438-1120, Fax: 438-1100/276 m.  
e-mail: kubinyi@chemres.hu, honlap: www.chemres.hu

### **I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben**

Az Intézet alapvető feladata: nemzetközi színvonalú tudományos kutatások végzése a molekulák és a szupramolekuláris szerkezetek sajátosságainak különböző spektroszkópai és diffrakciós mérési módszerekkel, továbbá elméleti kémiai vizsgálatokkal történő feltárására.

Az intézet feladatai közé tartoztak még a következők: részvétel az egyetemi oktatásban és a posztgraduális képzésben, szakmai tanácsadás, valamint gyakorlati célú kutatási-fejlesztési feladatok elvégzése. 2007-ben az intézet összetevékenységeiben jelentős hányadot képviselt a hazai, valamint a különböző európai projektekhez kapcsolódó, kémiai szerkezetkutatási feladatokban való részvétel is. A kutatóhely számos témában folytat meghatározó jelentőségű tudományos együttműködések a Kémiai Kutatóközpont Biomolekuláris Kémiai és Felületkémiai és Katalízis Intézetével.

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

#### *Molekulaspektroszkópai kutatások*

Az elmúlt évben beszerzett multidetektoros mikroszkóp és hagyományos FTIR-spektroszkópai módszerek segítségével, a Budapesti XVI. kerületi Rendelőintézettel együttműködve, az emberi bőr és haj színképét vizsgálták. A közel 500 beteg adatait jelenleg dolgozzák fel kemometriai és egyéb eljárásokkal. A cél bizonyos betegségtípusok (pl. rákos megbetegedések) diagnózisához való hozzájárulás.

Új spektroszkópai módszert dolgoztak ki hét fontos légköri szennyező detektálására hosszúfényutas fotolízises cella alkalmazásával. A detektálási határokat közel egy nagyságrenddel sikerült csökkenteniük, pl. benzol és toluol esetében.

Meghatározták néhány, proteolitikus enzimeknek ellenálló D-aminosav szubsztituált *mucin-2* fehérje-epitóp (TPTPTGTQTPT) NMR-szerkezetét. Míg a *TPTPTGTQTPT* és *TPTPTGTQTPT* peptidek esetében (ahol a dőlt betűk a D-aminosavakat jelölik) az NMR-vizsgálatok rendezetlen szerkezetre utalnak, a *TPTPTGTQTPT*-származék a natív peptidhez hasonló, jól definiált  $\beta$ -kanyar szerkezetet mutat.

Ón(IV)- és aranytartalmú szupramolekuláris fémkomplexeket oldat és szilárd fázisú, multinukleáris NMR-módszerrel vizsgáltak. Szilárd- és oldatfázisú  $^{31}\text{P}$ -NMR mérések segítségével kétfémes komplexekben tanulmányozták az Au-Au aurofil kölcsönhatás dinamikáját és energetikáját.

Kimutatták, hogy a mikrokörnyezet és az ionpár-képződés alapvetően befolyásolja egy tumorelles hatású alkaloid, a berberin, fotofizikai sajátságait. Így e vegyület kiválóan alkalmazhatónak bizonyult fluoreszcenciás jelzőanyagként, például epesav aggregátumok szerkezetváltozásának követésére. Igazolták, hogy a cianidsoporttal szubsztituált indolin-származékok fluoreszcenciájának poláris, protikus közegben tapasztalható gyors kioltásért a cianidsoport nitrogénjén keresztül kialakuló hidrogénhidas-komplexek a felelősek. Többféleképpen szubsztituált diaril- és tetraaril-porfirin származékok fotofizikai tulajdonságait határozták meg, elsősorban a fotodinamias terápiában történő potenciális felhasználhatóságuk megítélése érdekében.

Biológiai rendszerek gyökös folyamataiban kulcsszerepet játszó reaktív oxigén specieszek, mindenekelőtt a szuperoxid szabad gyökök kimutatásában és vizsgálatában értek el jelentős előrelépést a Mito-DEPMPO szintetizálásával, amely egyfelől jelentősen megnöveli a csapdázott szabad gyökök élettartamát, másfelől lehetőséget nyit a szabad gyökök mitokondriumban való kimutatására.

A szuperoxid-gyökök molekuladinamikai vizsgálatára új spektrumfelület szimulációs eljárást dolgoztak ki.

*Kutatói kapacitás: 20 fő, ebből intézeti állományban: 16,5 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 90 M Ft, ebből pályázati forrás: 11,6 M Ft.*

*Kristály-, por és folyadékdiffrakciós kutatások*

Egykristályok, porok és folyadékok röntgenszórásának vizsgálatára új mérési és számítási technikákat vezettek be és alkalmaztak. A megfelelő mérésekhez képlemez-térdetektort alkalmaztak, ami világviszonylatban is úttörő eljárás.

Szilárd fázisú reakció megtörténtét igazolták cukor-só komplexekben.

Meghonosították a krisztallográfiai fázisprobléma megoldásának új módszerét, továbbfejlesztették a korlátozott felbontású szórással bíró anyagok szerkezetvizsgálatát. Szupramolekuláris átalakulások rendszerezésére alkalmazták a morfotrópia – izostrukturalitás antinómia módszerét.

Új típusú ionos – molekuláris rendszerek, ill. komplexek kialakítását kezdték meg, egyes esetekben nemes-, átmeneti-, ill. alkáli-fém komplexek létrehozásával együtt.

Hazai együttműködésben meghatározták a galliumhidroxid és a nagy töménységű nátriumhidroxid oldatainak szerkezetét röntgendiffrakcióval. Ilyen vizsgálatokat még nem írtak le az irodalomban. Az eredmények hatással lehetnek a gallátok ipari kezelési eljárásaira, és javíthatják az alumíniumgyártás technológiáját is.

Amerikai, valamint osztrák kutatókkal együttműködésben (TÉT-egyezmény keretében) folytatták egyes önszerveződő, szupramolekuláris rendszerek (makrociklusos platina- és aranykomplexek, nitrometán és metilénklorid oldatok) szerkezetének meghatározását, a kialakuló szupramolekuláris formák geometriai jellemzését. Ezek módszertani szempontból is úttörő jelentőségű munkák. Környezetvédelmi jelentősége van a nitrometán

folyadékszerkezetére vonatkozó vizsgálatainknak, amelyek kombinált módszerekkel (röntgen- és neutrondiffrakció, szimuláció) történtek.

*Kutatói kapacitás: 13 fő, ebből intézeti állományban: 13 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 85 M Ft, ebből pályázati forrás: 17 M Ft.*

#### *Tömegspektrometriai kutatások*

A tömegspektrometriai kutatások profilja egyre nagyobb mértékben a proteomikai biokémiai, valamint a bioinformatikai feladatok megoldása irányába tolódik el. Az elmúlt év legfontosabb eredménye, az AGP glikozilációs mintázatának meghatározása volt mintegy 70 egészséges és különböző rákos megbetegedésben szenvedő beteg esetén. Az eredmények kiértékeléséhez új szoftvert fejlesztettek ki. Vizsgálataik eredményei igazolják, hogy a glikozilációs mintázat jelentősen függ a rákos megbetegedés típusától. A felismerések (új tumor marker) lehetővé teszik egy szabadalom benyújtását is. A kifejlesztett szoftvert más kutatócsoportok számára is elérhetővé teszik.

*Kutatói kapacitás: 6,5 fő, ebből intézeti állományban: 6,5 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 40 M Ft, ebből pályázati forrás: 5 M Ft.*

#### *Elméleti kémiai kutatások*

A hidrogénatom (H) és az oxigénmolekula (O<sub>2</sub>) reakciójának dinamikai vizsgálatával megállapították, hogy az égésekben alapvetően fontos (H + O<sub>2</sub>)-reakcióban általában nem keletkezik HO<sub>2</sub> komplex, hanem a partnerek pillanatszerű ütközésben találkoznak, amelyben legtöbbször nem játszódik le reakció.

A Fe<sub>2</sub>(CO)<sub>9</sub> és a Co<sub>2</sub>(CO)<sub>8</sub> komplexekben a Ponc-féle átlagolt Fermi-lyuk analízis alapján megállapítható, hogy a komplexekben nem alakul ki direkt fém-fém kötés, hanem a két fématom közt a hídhelyzetű (CO)-csoportokon keresztül háromcentrumú kötés létesít kapcsolatot.

Előállítottak egy vízoldható Fe(II)-porfirin komplexet. A komplex magjának oxigénfelvevő képességét vizsgálva megállapították, hogy az oxigén reverzibilis felvételét a víz koordinálódása megakadályozza. Ez az oka annak, hogy a hemoglobinban a vasatomot hidrofób környezet veszi körül.

A nem-adiabatikus effektusok figyelembevételével továbbfejlesztették a CH<sub>2</sub>BrCl-molekula disszociációjának koherens szabályozására kidolgozott eljárást, és hozzájárultak a halometán-molekulákon (CH<sub>2</sub>I<sub>2</sub>, CH<sub>2</sub>BrI) ultrarövid lézerpulzusokkal végzett időfelbontásos mérések eredményeinek értelmezéséhez.

Klasszikus, illetve Car-Parrinello molekuláris dinamikai szimulációs számítások segítségével, valamint diffrakciós (röntgen és neutron) mérések alapján jellemezték a folyadék fázisú nitrometán szerkezetét.

Új elméleti módszert javasoltak gerjesztett állapotok értelmezéséhez, amely lehetővé teszi a lokális gerjesztések "kinyerését" a delokalizált MO-k bázisában végzett CIS-számítások eredményeiből.

Tisztázták a lokális spin-négyzet fogalmát.

Általánosították a molekuláris viriál-tételt.

Kiterjedt piritmodelleken elvégzett kvantumkémiai számítások segítségével azonosították a vas Fe(IV) állapotát.

A széndioxid vízben való kémiai oldódásának részlépéseit *ab initio* molekuláris dinamikai szimulációs számításokkal tanulmányozták, és meghatározták az egyes lépésekhez tartozó aktiválási energiákat, illetve az egyensúlyi lépések szabadenergiáit.

Felmérték különböző DFT és *ab initio* kvantumkémiai módszerek alkalmazhatóságának határait organokatalitikus addíciós reakciók mechanizmusának leírására. Megállapították, hogy az eddig ismert funkcionálok közül csak a legújabban kifejlesztett meta-GGA típusú funkcionálok alkalmazhatók megbízhatóan. Megmutatták, hogy az SCS-MP2-módszer sikeresen alkalmazható viszonylag nagy rendszerekre is.

Kvantumkémiai számítások segítségével részletesen feltárták az etilén fémhez (Pd) kötődő karboxiláttal végbemenő addíciós reakciójának mechanizmusát. A számítások eredményeivel értelmezni tudták azt a kísérleti tapasztalatot, miszerint a keletkezett akriláttermék eliminációja sikeresen kivitelezhető.

*Kutatói kapacitás: 8 fő, ebből intézeti állományban: 8 fő, Becsült intézeti ráfordítás: 49 M Ft, ebből pályázati forrás: 7 M Ft.*

### **III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása**

#### *Hazai kapcsolatok*

Az Intézetnek széles körű kapcsolatai vannak a hazai egyetemekkel és az MTA-támogatású kutatócsoportokkal. Mind a tudományos kutatási, mind az oktatási együttműködések jelentősek. Az együttműködés eredményességét a 2007-ben egyetemi kutatókkal közösen megjelent 29 tudományos publikáció is mutatja. Tevékenyen részt vállalnak az egyetemi oktatásban. Az Intézet 10 kutatója oktat rendszeresen különböző egyetemeken. Elsősorban a BME-vel alakultak ki kölcsönösen előnyös kutatási és oktatási kapcsolatok. Ebben fontos szerepet játszik az intézet és a BME közös lézerspektroszkópai laboratóriuma.

A BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszékével együttműködve sikeresen szimulálták, az IR-spektrum, a kvantumkémiai számítások és az egykristály röntgendiffrakciós szerkezet ismeretében, a hidrát és a vízmentes galluszsav teljes hozzárendelésű spektrumait.



A BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszékkel közösen végezték el teofillintartalmú molekulavegyületek és ko-kristályok előállítását, valamint TG/DTA-MS, TG-FTIR és szerkezeti vizsgálatát. Olyan teofillintartalmú kristályt állítottak elő, melyben a semleges, ill. ionos molekularétegek váltakoznak, szigetelő-vezető rétegeket alkotva. Az (R)- és (S)-1-(1-naftil)-etilammónium (R)-N-[1-(1-naftil)etil]oxalamát sók röntgendiffrakciós szerkezetét összehasonlították az (R)- és (S)-1-fenil-etilammonium (R)-N-(1-feniletil)oxalamát szerkezetekkel.

A BME Szerves és Szerves Kémiai Technológia Tanszékkel együttműködésben foszfin-oxidok kristályosítással való reszolválásának földéítéséhez, ko-kristályokat alkottak különféle foszfin-oxid származékok, valamint a TADDOL és származékai közt. E szerkezetek a solvatáció és a molekuláris szubsztitúció különféle állapotait mutatják. Az említett témákban a BME-vel folytatott kutatások eredményeiről hat közös publikációban számoltak be.

A „Gázok FTIR-spektrometriai analízisének fejlesztése és alkalmazásai” c. témában (együttműködő partner: Pannon Egyetem Műszaki Informatikai Kar, MÜKKI) három publikáció született a közös kutatások eredményeként.

A Pannon Egyetemmel (Veszprém) kialakított tudományos együttműködés során vizsgálható Fe(II)-porfirin komplex oxigénfelvevő képességét vizsgálták. Az eredményeket két közös publikációban foglalták össze.

„Az alkilánc szerepe a  $Zn_4O(RCO_2)_6$  komplexek szimmetriájában és szerkezetében (FTIR spektroszkópiai tanulmány)” c. témában (együttműködő partner: Szegedi Tudományegyetem Fizikai Kémiai Tanszék) egy közös közleményt publikáltak.

A Richter Gedeon Nyrt. részére ismeretlen eredetű szennyezéseket azonosítottak tömegspektrometriai módszerek segítségével.

#### *Nemzetközi kapcsolatok*

Az Intézet nemzetközi kapcsolatai rendkívül sokrétűek és eredményesek. A kutatólaboratóriumok a megfelelő szakterületek minden jelesebb kutatóhelyével kapcsolatban állnak. Számos meghívás és közös publikáció mutatja az együttműködések eredményességét. 2007-ben hét MTA-egyezményes, külföldi tanulmányutat tettek. Számos európai és amerikai egyetemmel alakítottak ki eredményes kutatási együttműködések. Kétoldalú akadémiai egyezmények keretében az intézet 17 kutatót fogadott a partner-intézményekből. A látogatók többsége előadást is tartott. Az intézet kutatói 44 előadást és 34 poszter-előadást tartottak nemzetközi konferenciákon.

Az „Egyszerű kénvegyületek XANES és rezgési spektroszkópiai szerkezetvizsgálata” c. téma eredményeiről (együttműködő partner: Department of Physical, Inorganic and Structural Chemistry, Stockholm University, Svédország) egy publikációt közöltek 2007-ben.

Az „Orientált molekulák tanulmányozása infravörös lineáris dikroizmus alapján, elméleti számítások segítségével” c. kutatások (MTA-BTA kétoldalú egyezmény; együttműködő

partner: Institute of Organic Chemistry, BAS, Szófia, Bulgária) eredményeiről egy közös publikációban számoltak be 2007-ben.

„A rezgési spektrumok tanulmányozása kísérleti és kvantumkémiai számítási módszerekkel” c. téma keretében (együttműködő partner: Department of Physical Sciences, Helsinki University, Finnország) a kutatások eredményeiről közös publikációban számoltak be.

A „Reaktív oxigén specieszek és biológiai fontosságú komplexek ESR-vizsgálata” c. témában (együttműködő partnerintézmények: Université de Provence, Marseille, Franciaország; The Ohio State University, USA; Dept. Biophysics, Medical College of Wisconsin, Milwaukee, USA; Eindhoven University of Technology, Hollandia; University of Rosario, Argentína) egy közös folyóiratcikket közöltek 2007-ben.

A „H-hidas komplexek fotofizikája” c. téma eredményeiről, osztrák-magyar TÉT-egyezmény keretében a Max F. Perutz Laboratories Department of Chemistry University of Vienna, Ausztria kutatóival egy közös folyóiratcikket jelentettek meg.

Az „Olefinok epoxidációja (ReO<sub>3</sub>)-alapú komplexek segítségével” c. témában (TÉT-DAAD-egyezmény) egy közös publikáció jelent meg a Technical University München, Németország kutatóival.

Az „Új tulajdonságú anyagok a szupramolekuláris és szilárd fázisú kémiában” c. magyar-dél-afrikai TÉT-együttműködés keretében (együttműködő partner: University of Cape Town) az  $\alpha$ -(4-piridil)benzohidrol származékainak polimorfizmusát is mutató kristályszerkezeteit határozták meg. Az egyik származék sósavas sójának szublimációját vizsgálva tapasztalt orientált kristálytranszformációt a parciális izostrukturalitás jelenségével magyarázták. Elkezdték ciklodextrin gyógyszerhatóanyagokkal képzett zárványainak és polimorfjainak előállítását, szerkezet- és izostrukturalitás-vizsgálatát.

Napelem-cellák félvezető vékonyrétegének előállítására használt fém-tiokarbamid komplexek vizsgálatának során meghatározták a diklór-bisz(tiokarbamid-S)-cink(II) szerkezetét. Megállapították, hogy a bizonytalan tércsoportleírások közül a *Pnma* a helyes (együttműködő partnerek: Laboratory of Inorganic and Analytical Chemistry, Helsinki University of Technology és Department of Materials Science, Tallinn University of Technology). Az eredményekről közös publikációban számoltak be.

Előállították a citotoxikus arilpirazol ligandum 1,2-bisz[(1,3-difenilpirazol-4-il)metil]diaminoetánt és Cu-komplexeit; meghatározták a szerkezeti jellemzőket. (Együttműködő partner: Faculty of Sciences, University of Novi Sad, Trg, Szerbia.) Az eredményeket közös folyóiratcikkekben foglalták össze.

Arany szolvatációját tanulmányozták poláros és nempoláros oldószerekben magyar-osztrák TÉT-együttműködés keretében (együttműködő partner: University of Innsbruck, Institute for Ion Physics). Az igen eredményes együttműködést egy megjelent és három beküldött publikáció igazolja.

Román-magyar TÉT-együttműködés keretében folytatták biológiai és orvosi minták tömegspektrometriai eredményeinek összehasonlító elemzését.

Argentín-magyar Tét-együttműködés során természetes gombaölő anyagokat és származékaikat jellemezték tandem-tömegspektrometriás módszerekkel.

Ukrán TA-MTA kétoldalú megállapodás keretében biomolekulák tömegspektrométerben végbemenő elemi reakcióit modellezték.

MTA-CNR egyezményes kutatások keretében (együttműködő partner: University of Bari) első ízben sikerült egy olyan reakciót megvalósítani, melyben a széndioxid olefinekkel reagálva akrilát termékeket ad, és azok a fémcentrumtól eliminálódnak. Az eredményekről közös publikációban számoltak be.

Magyar-spanyol Tét-egyezmény keretében (együttműködő partnerek: Department of Chemistry és Institute of Computational Chemistry, University of Girona) a "fuzzy atomos" energiefelbontás DFT-általánosítását végezték el, az energiakomponenseket analizálták, különös tekintettel a kicserélődés és kicserélődési potenciál térbeli eloszlására. Az együttműködésből közös publikáció született.

A University of New Mexico, Albuquerque, NM, USA kutatóival folytatott együttműködési téma (A H-atom és az O<sub>2</sub>-molekula reakciójának dinamikai vizsgálata) eredményeiből 2007-ben hét publikációjuk jelent meg.

Az Institute for Chemical Process Fundamentals, Czech Academy of Sciences intézménnyel végzett közös kutatások (Dinukleáris vas- és kobaltkarbonilok kötéstérképének vizsgálata) eredményeit közös publikációban foglalták össze.

A „Halometán-molekulák fotokémiájának vizsgálata elméleti módszerekkel” c. téma eredményeként meghatározták a CH<sub>2</sub>I<sub>2</sub><sup>+</sup> kation gerjesztett elektronállapotait; értelmezték a CH<sub>2</sub>I<sub>2</sub> és CH<sub>2</sub>BrI molekulákon végzett femtoszekundumos időfelbontású méréseket. Az Institute of Physical Chemistry, Friedrich Schiller University Jena, Németország és a Department of Physics and Astronomy, Stony Brook University, New York, USA intézményekkel folytatott együttműködés eredményeit közös publikációban foglalták össze.

Egy „ab initio molekulamechanikai módszer” létrehozásának lehetőségéről (téma: geminál-hullámfüggvény energiaképlete átfedő bázis esetére, a létrehozandó módszer elvi alapjainak előzetes felvázolása) folytatott diszkussziók eredményeként (együttműködő partner: Karpov Institute of Physical Chemistry, Moszkva) közös folyóiratcikket publikáltak.

#### **IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése**

A „Hatóanyag-tervezés népegészségügyileg kiemelten fontos megbetegedésekben szerepet játszó validált célmolekulák alapján” (NKFP 1A005/04) c. program „Gyógyszerjelölt molekulák fototoxikus sajátságának előrejelzése” c. témájában fotodinamikus terápiában használható fotoszenzibilizátorokat minősítettek fototoxicitás szempontjából, valamint cianid-szubsztituált indolin-származékok fluoreszcencia-kioltásának okát határozták meg. Az említett program „Potenciális hatóanyagok fluoreszcenciás vizsgálata” c. témájában kimutatták, hogy a berberin természetes izokinolin-vázú alkaloid nemcsak számos kedvező

biológiai hatást mutat, hanem fluoreszcenciás jelzőanyagként is kiválóan alkalmazható. Feltárták továbbá az 1-alkil-3-metil-imidazolium-bromid ionfolyadék-micellák sajátosságait. Elvégezték továbbá a reaktív oxigén specieszek közé tartozó szuperoxid gyök dinamikai vizsgálatát spin-csapdázott állapotban. A hőmérsékletnek a gyök mozgékonyására való hatását is vizsgálták. Kétdimenziós spektrumszimulációkat végeztek a termodinamikai paraméterek meghatározása érdekében.

Az OTKA T-046953 sz. szerződés „Szabad gyökök termodinamikai paramétereinek meghatározása ESR-spektroszkópiával biológiai és modell rendszerekben” c. témájában az enzimatikusan képződő karbonilgyökök kimutatására a DMPO ciklikus nitron vegyületet alkalmazták. Felderítették a csapdázott karbonilgyökök átalakulási folyamatait. Kifejlesztettek egy új csapdát, a mito-szubsztituált ciklikus nitronokat, amik megháromszorozzák a csapdázott szuperoxid-gyökök élettartamát. A módszert egyéb reaktív oxigén specieszek és tiil szabad gyökök kimutatására is alkalmazták. A DEPMPO-nitron által csapdázott szuperoxid-gyök kémiai cseréjét az általuk kifejlesztett új, kétdimenziós szimulációs technikával értelmezték, és meghatározták termodinamikai paramétereit. Leírták a két geminális foszforral szubsztituált lineáris nitroxid szabad gyök kémiai cserefolyamatait.

OTKA-pályázat támogatásával 2007-ben előállították a trimetilón(IV)-benzoátot, és vizsgálták a vegyület melegítésre végbemenő *kristály-olvadék-kristály* átalakulását. Megállapították, hogy hő hatására metilcsoport vándorlásával járó diszmutációs reakció megy végbe, az olvadékból egykristályok válnak ki, valamint hogy a diszmutációs bomlás olvadékban sokkal gyorsabban megy végbe, mint folyadékfázisban. A röntgendiffrakciós szerkezet a diszmutációs reakcióknál eddig meg még nem megfigyelt tetraorgano-disztannoxánt azonosított.

Az „Önszerveződő fémorganikus vegyületek szintézise és szerkezeti jellemzése” c. OTKA téma keretében a  $[Pd(N-N)]^{2+}$  sarokelemek ligandumjának térigényét számszerűen leírták. Kimutatták, hogy e kationok 4,4'-bipiridinnel való kölcsönhatása trimer/tetramer egyensúly kialakulására vezet, azaz az oldatban  $[Pd(N-N)(4,4'-bpy)]_n^{2n+}$  kationok vannak jelen ( $n = 3, 4$ ). Az új ligandumok komplexképző sajátosságainak felderítésére vizsgálatokat végeztek, két kelátképző helyet, valamint véghelyzetű donoratomot és kelátképző helyet egyidejűleg tartalmazó ligandumokkal.

A Jedlik Ányos program keretében a „Molekuláris célpontok és biomarkerek azonosítása kóros elhízás mechanizmusában és gyógyításában” c. témakörben értek el fontos eredményeket a folyamatban szerepet játszó molekulák felderítésével.

A „Biomolekulák szerkezetének és kölcsönhatásainak vizsgálata informatikai és tömegspektrometriai módszerek együttes alkalmazásával” c. OTKA-téma kutatásaiban a tavalyi év folyamán folytatták különböző modell-peptidek tandem tömegspektrometriás vizsgálatát QQQ és ioncsapda típusú készülékeken. Ezeket a kísérleteket Q-TOF és FT-ICR készüléktípusok alkalmazásának irányában is kibővítették. Részletesen vizsgálták a tandem tömegspektrumok energiafüggését. Vizsgálataik kiterjedtek a glikopeptidekre is.

Megállapították, hogy ioncsapda és FT-ICR készüléktípusok esetén az ütközéses aktiváció mellett a radiatív folyamatoknak (spontán fotonemisszió, ill. abszorpció) igen jelentős hatása van a fregmentációra. A világon elsőként új módszert dolgoztak ki a radiatív hűlés és az ütközéses aktiválás egyidejű meghatározására. A módszert YGGFL modellpeptid esetén a

gyakorlatban is alkalmazták és publikálták. A peptidfragmentáció elméleti leírása során megállapították, melyek azok a fizikai-kémiai paraméterek, amelyek ezt a legnagyobb mértékben meghatározzák. Új, számítógépes programot fejlesztettek ki a paramétereknek az optimalására. Az így kapott paraméterek alkalmazásával és egy újabb szoftver kidolgozásával, lehetővé vált a peptid tandem-tömegspektrumának elméleti (prediktív jellegű) meghatározása.

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

1. Tárkányi G, Király P, Pálinkás G, Deák A: Conformational analysis of a helically distorted gold(I) macrocycle derived from xantphos: evidence for the aurophilic Au...Au interaction from NMR, *MAGNETIC RESONANCE IN CHEMISTRY* 45(11): 917-924 (2007)
2. Pál K, Kállay M, Köhler G, Zhang H, Bitter I, Kubinyi M, Vidóczy T, Grabner G: Efficient singlet-state deactivation of cyano-substituted indolines in protic solvents via CN-HO hydrogen bonds, *CHEMPHYSICHEM* 8(18): 2627-2635 (2007)
3. Hardy M, Chailier F, Ouari O, Finet JP, Rockenbauer A, Kalyanaraman B, Tordo P: Mito-DEPMPO synthesized from a novel NH<sub>2</sub>-reactive DEPMPO spin trap: a new and improved trap for the detection of superoxide, *CHEMICAL COMMUNICATIONS* (10): 1083-1085 (2007)
4. Deák A, Tunyogi T, Tárkányi G, Király P, Pálinkás G: Self-assembly of gold(I) with diphosphine and bitopic nitrogen donor linkers in the presence of trifluoroacetate anion: formation of coordination polymer versus discrete macrocycle, *CRYSTENGGCOMM* 9(8): 640-643 (2007)
5. Czugler M, Körtvélyesi T, Fábián L, Sipos M, Keglevich Gy: Intra- and intermolecular interactions and water pincer in the crystal structure of a 3-P(O)Ph-2 substituted 1,2,3,6-tetrahydrophosphinine oxide hydrate, *CRYSTENGGCOMM* 9(7): 561-565 (2007)
6. Rokob TA, Hamza A, Pápai I: Computing reliable energetics for conjugate addition reactions, *ORGANIC LETTERS* 9(21): 4279-4282 (2007)
7. Peltz Cs, Drahos L, Vékey K: SORI excitation: Collisional and radiative processes, *JOURNAL OF THE AMERICAN SOCIETY FOR MASS SPECTROMETRY* 18(12): 2119-2126 (2007)
8. Stirling A, Bernasconi M, Parrinello M: Defective pyrite (100) surface: An ab initio study, *PHYSICAL REVIEW B*, 75(16): 165406-1–165406-8 (2007)
9. Van Wyngarden AL, Mar KA, Boering KA, Lin JJ, Lee YT, Lin SY, Guo H, Lendvay Gy: Nonstatistical behavior of reactive scattering in the O-18+O-32(2) isotope exchange reaction, *JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY* 129(10): 2866-2870 (2007)
10. Megyesi M, Biczók L: Berberine alkaloid as a sensitive fluorescent probe for bile salt aggregates, *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B* 111(20): 5635-5639 (2007)

## VI. A kutatóhely 2007. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA Kémiai Kutatóközpont, Szerkezeti Kémiai Intézet

|  |        |  |           |
|--|--------|--|-----------|
| Átlagléttség <sup>1</sup> :  | 51     | Ebből kutató <sup>2</sup> :              | 46        |
| PhD, kandidátus:   | 10     | MTA doktora:                             | 14        |
| 35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:                              |        | levelező tag:                            | 0         |
|  |        | rendes tag:                              | 2         |
|  |        |  | 16        |
| Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> : |        |  | 97        |
| Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :                 |        |  | 97        |
| <i>Ebből</i> impakt faktoros publikáció magyarul:  | 0      | idegen nyelven:                          | 83        |
| nemzetközi együttműködés keretében:  | 45     | SCI által regisztrált folyóiratban:      | 83        |
| összesített impakt faktor <sup>5</sup> :   | 218,24 | összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :   | 1769      |
| összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:   |        |  | 1368      |
| <i>Magyarul</i> könyv/monográfia <sup>7</sup> :  | 0      | könyvfejezet:                            | 2         |
| <i>Idegen</i> nyelven könyv:   | 0      | könyvfejezet:                            | 3         |
|  |        | jegyzet:                                 | 0         |
|  |        | jegyzet:                                 | 0         |
| Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:   | 0      | MTA doktora:                             | 1         |
|  |        | levelező tag:                            | 0         |
|  |        | rendes tag:                              | 0         |
| Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :                                   | 0      | <i>ebből</i> külföldön:                  | 0         |
| Értékesített szabadalmak száma:  |        |  | 0         |
| Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :         | 44     | posztterek száma:                        | 34        |
| Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :   |        |  | 0         |
| Nemzetközi tud. bizottsági tagság:   | 6      | Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:      | 8         |
| Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :             |        |  | 12        |
| Ebből doktori iskolákban oktatók száma:  | 3      | Doktori iskolát vezetőik száma:          | 0         |
| Elméleti kurzusok száma <sup>13</sup> :  | 11     | Gyakorlati kurzusok száma:               | 9         |
| TDK munkát készítő hallgatók száma:  | 2      | Diplomamunkát:                           | 3         |
| Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatók órák száma <sup>14</sup> :                   |        | PhD-t:                                   | 15        |
|  |        |  | 557       |
| Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>15</sup> :               |        |  | 339,9 MFt |
| Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>16</sup> :   | 5      | Teljes saját bevétel:                    | 111,6 MFt |
| Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :                         |        |  | 0 MFt     |
| Az év folyamán művelt OTKA témák száma:  |        |  | 14        |
|  |        | A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: | 28,1 MFt  |
| Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma <sup>18</sup> :                         |        |  | 8         |
| NKFP:  | 2      | A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: | 50,8 MFt  |
| Egyéb:   | 6      | A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: | 14,1 MFt  |
| NFT témák száma <sup>19</sup> :  | 0      | A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: | 0 MFt     |
| Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>20</sup> :                          |        |  | 1         |
| EU forrásból:  | 1      | A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: | 2,4 MFt   |
| Egyéb:   | 0      | A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: | 0 MFt     |
| Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:                              |        |  | 23        |
|  |        | A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: | 16,3 MFt  |
| Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>21</sup> :                            |        |  | 0 MFt     |

## Az MTA KK Szerkezeti Kémiai Intézetének kiemelten sikeres kutatási területe 2007-ben

### Folyadék és szilárd fázisú NMR-szerkezetvizsgálatok kombinációja funkcionális anyagok tervezésében

Az MTA Kémiai Kutatóközpont Szerkezeti Kémiai Intézetének kutatói sikerrel vezették be az orvosi diagnosztikából közismertté vált *mágneses magrezonancia* (MRI) képalkotó mérés technikának különleges, nagy felbontóképességű szerkezetvizsgáló módszereit. A kapott információkból a molekulák térbeli szerkezetére és mozgásuk dinamikájára következtethetünk. A GVOP-3.2.1.-2004-04-0210/3.0 sz. projekt keretében 2006-ban beszerzett, nagy felbontóképességű NMR-berendezés segítségével lehetőség nyílt mind a folyadék, mind pedig a szilárd halmazállapotú minták roncsolásmentes összehasonlító vizsgálatára. Ezekkel a módszerekkel nélkülözhetetlen adatokat kaphatunk új anyagok és gyógyszermolekulák kifejlesztéséhez. A szilárd anyagok oldás hatására történő szerkezetváltozásának felderítése központi gondolata az új funkcionális anyagok előállításának és jellemzésének, függetlenül attól, hogy a sejtmembrán egy alkotójáról, egy polimerhordozóval tablettázott gyógyszerről vagy egy újrahasznosítható, szerves alapú katalizátorról van szó.



A bevezetett NMR-módszerek segítségével választ kaphatunk arra is, hogy az emberi szervezet molekuláris alkotói (pl. fehérjék, DNS) milyen kölcsönhatásba lépnek egymással, vagy a fejlesztés alatt álló gyógyszermolekulákkal. A módszerek segítségével nemcsak a molekuláris összetevők arányát, hanem a kémiai, biokémiai átalakulások sebességét is kimérhetjük. Az NMR Laboratóriumban meghonosított szerkezetvizsgáló módszerek révén azoknak a kis- és közepes vállalkozásoknak a vizsgálati igényei is teljesülhetnek, amelyek anyagi, szellemi erőforrások hiányában önállóan nem képesek NMR-technika működtetésére. Példa erre a 2007-ben indult Jedlik-pályázat

(NATURSEP-projekt), melyben a kozmetikai- és élelmiszeriparban felmerülő, az anyagok összetételével, ill. formulálásával kapcsolatos fejlesztésekbe kapcsolódtak be. Az alkalmazások mellett az intézeti kutatások a mérés technikai lehetőségek mind szélesebb körű kiaknázását és új mérés technikák kidolgozását egyaránt célozzák.

### *Antimikrobiális peptidek vizsgálata lipid kettősrétegekben*

A hagyományos antibiotikumokkal szembeni rezisztencia fokozódó elterjedése idején nagy figyelmet érdemlő vegyületcsoport az antimikrobiális peptidek (AMP) családja. Az AMP-k rövid, 15-40 aminosavból álló, erősen amfipatikus, fiziológiai körülmények között általában többszörösen pozitív töltésű, gének által kódolt aminosavláncok, melyek a kórokozók szervezetbe jutását követően szintetizálódnak és – többnyire poszttranszlációs módosulás révén – aktivizálódnak a gazdaszervezetben. Bár működésük pontos mechanizmusát tekintve még sok a tisztázatlan kérdés, *in vivo* és *in vitro* vizsgálatok egyaránt arra utalnak, hogy a kórokozók sejtmembránjával kölcsönhatásba lépve, abban ioncsatornákat, pórusokat képezve növelik a sejtmembrán átjárhatóságát, ami a sejtplazma és az extracelluláris tér közötti elektromos potenciálkülönbség felborulását, illetve – magasabb koncentrációban - a membrán destabilizálódását eredményezi. Hatásmechanizmusuk fizikai, a hagyományos antibiotikumokétól eltérő jellege értékes és ígéretes célponttá teszi őket a gyógyszerkutatás számára.

Egy 2007-ben elnyert OTKA-pályázat keretében kezdődtek meg azok a szilárd fázisú NMR-vizsgálatok, amelyek betekintést nyújtanak az AMP-k pórusképzésének mechanizmusába. A vizsgálatok magukban foglalják a peptidlánc másodlagos szerkezetének és helyzetének meghatározását a lipid kettősrétegekben, a peptidláncok közötti kontaktusok vizsgálatát a membránban, valamint annak tanulmányozását, hogy a membrán összetételének hatása hogyan befolyásolja a peptidek hatásmechanizmusát. A stratégia ezekben a mérésekben specifikus  $^{13}\text{C}$ ,  $^{15}\text{N}$  izotópok jól megválasztott helyre történő beépítése az aminosavszekvenciába, és a magok között fellépő dipoláris csatolás meghatározása révén intra- és intermolekuláris atomi kapcsolatok (távolságkényszerek) feltérképezése a peptidmembrán rendszerben.

A laboratóriumban folyó kísérletek hozzásegítenek az AMP-lipid kölcsönhatás mélyebb megértéséhez, és lehetőséget teremtenek hatékonyabb és mellékhatásoktól mentes AMP alapú gyógyszerek tervezéséhez.

### *Fémorganikus- és organokatalizátorok szerkezeti kémiája*

Az MTA KK NMR Laboratóriuma évtizedek óta molekulászerkezeti információkkal segíti a gyógyszermolekulák előállítását célzó szerves kémiai szintéziseket. A gyakran bonyolult térkémiájú molekulák egyszerű építőkövekből, környezetbarát módon történő felépítése hatékony katalizátorok kifejlesztését, valamint az alkalmazási lehetőségek kiterjesztését igényli. A fejlődő műszerezettség birtokában a vizsgálatok napjainkra kiterjedtek a katalizátorok szerkezet-funkció összefüggéseinek vizsgálatára az ón-, arany-, platina- és palládiumtartalmú fémkomplexek, valamint a bifunkcionális organokatalizátorok esetében. Ezen katalizátorok működési mechanizmusának felderítése számos közös elemet tartalmaz, melyek közül az egyik legfontosabb a másodlagos intermolekuláris kölcsönhatások (pl. hidrogénhíd, fém-fém és fém-heteroatom kötés, pi-pi kölcsönhatás stb.) feltérképezése, majd pedig szerkezetmódosítással történő finomhangolása. A kovalens kötésnél gyengébb másodlagos kölcsönhatások tanulmányozása alacsony hőmérsékletű oldat-, valamint szilárd fázisú multinukleáris NMR-vizsgálatok segítségével történik párhuzamosan a röntgendiffrakciós szerkezetvizsgálatokkal. A kutatások során számos új szupramolekuláris rendszert fedeztek fel és jellemeztek elsőként az irodalomban. Kiaknázva az NMR-spektroszkópia analitikai lehetőségeit, a kémiai reakciók komponensarányainak időbeli követésével vizsgálták az organokatalitikus reakciók mechanizmusát. Az alap kutatások



eredményeit a katalizátorok produktívitasának és enantioszelektívitasának növelését célzó kísérleteikben alkalmazzák.

#### *Anyagtudományi alkalmazások*

A szilárd fázisú NMR-spektroszkópia rendkívül hatékony módszer nemcsak kristályos, hanem amorf anyagok szerkezetvizsgálatában is. Hazai és nemzetközi együttműködések keretében szintetikus és természetes alapú makromolekuláris rendszereket vizsgáltak: ilyen anyagok az „intelligens” polimer gélek, a tabletták hordozói és bevonatai vagy a nanotechnológia új anyagai a módosított szén-nanocsövek. Szilárd halmazállapotú mintákról készített NMR-spektrumok analízisével a molekulaláncok elágazásai, végcsoportjai és keresztkötései egyaránt jellemezhetők. A polimer rendszerek ezen sajátságai közvetlen összefüggésben állnak azok fizikai-kémiai sajátságaival, végső soron pedig a funkciójával. Megkezdtek a hőmérsékletváltozás, lágyítószeres és duzzasztás hatására bekövetkező változások jellemzését deutérium-izotópjelölt polimerek vizsgálatával. Többdimenziós NMR-módszerek segítségével vizsgálták a makromolekulák között kialakuló másodlagos kötések, valamint az oldalláncok között fellépő kölcsönhatásokat és a kismolekulák adszorpcióját.



**Kémiai Kutatóközpont**  
**ANYAG- ÉS KÖRNYEZETKÉMIAI INTÉZET**  
1025 Budapest, Pusztaszeri út 59–67., 1525 Budapest, Pf. 17.  
Telefon: (1) 438–1130, Telefax: (1) 438–1147  
e-mail: szepvol@chemres.hu, honlap: <http://www.chemres.hu/aki>

## **I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben**

Az intézetben 2007-ben főként olyan komplex kutatási témákat műveltek, amelyekben az anyagtudományi és környezeti kémiai vonatkozások együtt, egymást kiegészítve jelentek meg.

Modern kísérleti és elméleti módszerekkel tanulmányozták célszerűen kiválasztott funkcionális és szerkezeti anyagok kémiai és szerkezeti jellemzőit, az ezek kialakulásához vezető folyamatokat, és befolyásolásuk lehetőségeit. Környezeti kémiai kutatásaik fő célja a természeti környezet terhelésének csökkentésére irányuló eljárások és termékek fejlesztésének tudományos megalapozása volt.

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

### **Anyagkémiai kutatások**

#### *Nanorétegek előállítása és vizsgálata*

Ultranagy molekulatömegű polietilén felületét módosították nitrogén plazmában, plazmaimmerziós ionimplantációval, különböző gyorsítófeszültség, részecske dózis és dózisteljesítmény mellett. A változásokat XPS, Raman-spektroszkópiái, nanomechanikai és nanotribológiai módszerekkel vizsgálták. Megállapították, hogy kezelés során az anyag dehidrogéneződött, a réteg tömörödött, és hidrogénezett, amorf szénitrid-szerű réteg képződött. Eközben a felületi rétegbe 13–20 at%-nyi, többféle kémiai állapotú nitrogén épült be. A módosított réteg keménysége mintegy négyszerese a kezeletlen polietilén keménységének, jellemző kopási térfogata pedig mintegy negyede annak. A kutatási eredményeket már alkalmazzák növelt élettartamú humán csípőízületi protézisek gyártásánál.

Újságpapír felületét kezelték atmoszférikus, nagy teljesítmény-sűrűségű, kis hőmérsékletű, ún. diffúz koplánáris, felületkorlátozott plazmakisülési módszerrel. XPS vizsgálataik szerint a nitrogénplazmás kezelés nagyobb mértékű oxidációt eredményezett, mint a levegőplazmás. Az oxigén főleg C=O és C-O típusú kötésekbe épült be. Az eltéréseket imin-csoportok átmeneti képződésével és hidrolízisével értelmezték. Ezeket az eredményeket a nyomdaiparban lehet felhasználni.

*Kutatói ráfordítás: 2 fő, ebből intézeti állományban van: 2 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 8,4 M Ft, ebből pályázati forrás: 4,2 M Ft.*

### *Mikro- és nanoszerkezetű, funkcionális társított rendszerek előállítása*

Új, fehérje hatóanyagot tartalmazó, szabályozott leadású gyógyszerformátumokat fejlesztettek ki, szerves és szervetlen alapú, nanoszerkezetű kompozit hordozórendszerekre alapozva. Ezek a készítmények komfortosabb és kisebb terheléssel járó gyógyszeradagolást tesznek lehetővé. Az új gyógyszer típust - a megfelelő preklinikai és erre épülő hatósági vizsgálatokat követően - a Trigon Biotechnológia Zrt. kívánja gyártani és forgalmazni.

Nanoszerkezetű biokatalizátor hordozóként használható kitozán mikrogömbök emulziós térhálósítással történő előállításakor vizsgálták a kísérleti körülmények hatását a keletkezett részecskék méreteloszlására és átlagméretére, valamint enzim megkötő-képességére, és az előállított hordozós biokatalizátor aktivitására.

Az intézetben kidolgozott újszerű módszerrel, RF termikus plazmában, nanoszerkezetű, többkomponensű hidrogénező katalizátorokat állítottak elő egy lépésben.

Mikro- és nanoszemcsékből álló, különleges morfológiájú és szerkezetű nikkél-cink ferrit porokat állítottak elő őrléssel, oldatból kicsapással, valamint RF termikus plazmában történő szintézissel. Vizsgálták a kapott termékek alkalmazhatóságát tekercselt induktivitásokban. Az eredményeket az EPCOS Elektronikai Alkatrész Kft. fogja alkalmazni. A termikus plazmában előállított Ni-Zn-ferrit nanorészecskék alkalmazhatóságát vizsgálták hisztidin tartalmú fehérjék tisztítására is.

Mikrohullámú technológiákban alkalmazható nanoporokat ( $\text{Si}_3\text{N}_4$ ,  $\text{Si}_2\text{N}_2\text{O}$ , SiC, ferritek) és nanokompozitokat állítottak elő egy nemzetközi projektben. A nanoporok alkalmazástechnikai vizsgálatait az együttműködő hazai és külföldi partnerek végzik. Fémek kerámia réteggel történő bevonásához plazmaszóró berendezést terveztek és helyeztek üzembe. Alakemlékező szintézissel szénszálakból szilícium-karbid nanoszálakat állítottak elő. Az általuk előállított porokhoz és szálakhoz hasonló morfológiájú anyagok kereskedelmi forgalomban nem kaphatók.

*Kutatói ráfordítás: 9 fő, ebből intézeti állományban van: 8 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 117 M Ft, ebből pályázati forrás: 105,3 M Ft.*

### *Permanganátok és poligalakturonátok szintézise és vizsgálata*

A bárium-permanganátot széles körben használják fel, pl. szelektív oxidációs reagensként egyes szerves kémiai szintéziseknél. Megbízható és jó kitermelést adó előállítási módja azonban a mai napig nincs. Kálium-permanganátból kálium-jodid segítségével, bárium-klorid és nátrium-hidroxid jelenlétében bárium-manganátot állítottak elő, amely szén-dioxid hatására, 100°C-on, víz jelenlétében 1,5 óra alatt átalakult bárium-permanganáttá. A bárium-permanganátból kiindulva más permanganát-sókat (Zn, Cd, Cu, Mg, Ca, Ni, Al, Fe, Ce) is elő lehet állítani.

A vashiányos állapot kezelésére alkalmas vas-poligalakturonátból a vas felszívódása és hasznosulása sok tényező függvénye, így pl. a vas oxidációs állapota és koordinációja is befolyásolja. Az intézetben vizsgálták a poligalakturonátok szerkezetét abból a célból, hogy különböző vastartalom mellett információt szerezzenek a vas mikrokozmoszteréről, valamint a Fe(II) és a Fe(III) oxidációs állapotok arányáról. Mössbauer spektroszkópiai és ICP-OES vizsgálataik egyértelműen azt mutatták, hogy a vegyületekben két fő Fe(II) mikrokozmoszter létezik. A Mössbauer vizsgálatok igazolták a vas beépülését is a vas-poligalakturonát komplexbe. Valamennyi vas-poligalakturonát vegyületben a vas főként Fe(II) oxidációs

állapotban fordult elő. Ez igen fontos eredmény, mivel az emberi szervezet a Fe(II)-t jobban fel tudja venni és hasznosítani, mint a Fe(III)-t. Az előállított poligalakturonátok gyógyhatású készítmény formájában kereskedelmi forgalomba kerültek.

*Kutatói ráfordítás: 3 fő, ebből intézeti állományban van: 2 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 4 M Ft, ebből pályázati forrás: – M Ft.*

#### *Korszerű elektrokémiai vizsgálati módszerek fejlesztése és ezek gyakorlati alkalmazása*

Modellt dolgoztak ki a perklorátionok elektroszorpciójának és ródiumon lejátszódó elektrokémiai redukciójának kinetikai leírására. A modell alapján jól lehetett értelmezni az elektrokémiai mérések eredményeit. Kimutatták, hogy hidrogén WO<sub>3</sub> felületen való adszorpciója, illetve az ezzel kapcsolt hidrogéntranszport esetében a rendszer impedanciája jó összhangban van az ún. „diffusion-trapping” modellel. Elemezték a szilárd elektródok felületi energiájának mérésével kapcsolatos újabb eredményeket.

Ir(210) és Rh(111) és a platinacsoportba tartozó más fémek egykristályain is végeztek elektrokémiai vizsgálatokat. Impedancia mérésekkel kimutatták, hogy a határfelületen kialakuló elektromos kettősréteg töltése még az ún. kettősréteg-tartományban is elsősorban az adszorbeált anionok töltéséből áll; az impedancia-spektrumok arra adnak felvilágosítást, hogy ezen anionok milyen sebességgel mozognak a külső- és a belső Helmholtz sík között. Megmutatták, hogy megfelelő körülmények között impedancia mérésekkel az anionok és a hidrogénionok adszorpciója külön-külön jellemezhető.

Kimutatták, hogy a platina előfeszültséggel válik le aranyfelületen. Meghatározták az előfeszültség értékét, az elektrokémiai platina-adszorpció potenciáltartományát, és az adszorbeálódó platinaatomok helyigényét. Megállapították, hogy elektrokémiai úton előállítható egyetlen platina réteggel borított aranyfelület is.

Tovább fejlesztették a molekuláris elektronikában és nano-elektrokémiában használható nagy felbontású (~5fA), nagy dinamikájú (9-12 nagyságrend), gyors tranziensek rögzítésére alkalmas árammérési módszereket.

A savas közegben történő hidrogénfejlődés kinetikáját elektrokémiai zaj alapján vizsgálták. Az Erdey-Grúz-Former-Heyrovsky mechanizmus alapján megmutatták, hogy kellően nagy túlfeszültségen a látszólagos töltésszám-változás a hidrogénborítottságtól függő, 1 és 2 közötti szám. Ezüst és réz mikroelektródokon végzett mérések során az elmélettel jó egyezést kaptak.

Impedancia spektroszkópia módszerrel vizsgálták környezetbarát, vízzel hígítható festékgyantákból kialakított filmek vízfelvételének mechanizmusát, és meghatározták a gyantafilmek elektromos paramétereinek változását vízfelvétel hatására.

*Kutatói ráfordítás: 5 fő, ebből intézeti állományban van: 4 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 35 M Ft, ebből pályázati forrás: 6,4 M Ft.*

#### *Nanoszerkezetű amfifil polimer kotérhálók és alkalmazásuk*

Az amfifil polimer kotérhálókkal (AKT) kapcsolatos kutatásaikban a poli(N-vinil-imidazol) alapú AKT-k fémion-megkötését tanulmányozták. Megállapították, hogy az előállított poli(N-vinil-imidazol)-1-poli(tetrahidrofurán) (PVIm-1-PTHF) nanofázisú morfológiával rendelkezik. Fémion-megkötő tulajdonságukat szilárd fázisú <sup>13</sup>C-NMR-rel és ICP-OES módszerrel vizsgálták. A polimer-fémion komplex rendszerek transzmissziós elektronmikroszkópiai vizsgálata egyértelműen igazolta, hogy különleges, nano-hibrid anyagok képződtek.

Új atomerő mikroszkópos (AFM) felvételeket készítettek a poli(N,N-dimetil-akrilamid)-1-poliizobutilén amfifil polimer kotérhálókról a teljes összetétel-tartományban. Megállapították, hogy a térhálókat alkotó fázisok minden esetben igen szűk méreteloszlásúak.

Nemzetközi együttműködésben különböző metakrilsav (MAA) alapú AKT-kat állítottak elő, melyekben a hidrofil PMAA-tartalom mellett a hidrofób polimer minőségét és mennyiségét változtatták. Hidrofób monomerként metil-metakrilátot (MMA), butil-oktil-metakrilátot (BOMA), valamint poliizobutilén-metakrilátot (PIBMA) alkalmaztak. Vizsgálataik új összefüggéseket szolgáltatnak a kotérháló kémiai szerkezete, összetétele és tulajdonságai között.

*Kutatói ráfordítás: 6 fő, ebből intézeti állományban van: 6 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 25 M Ft, ebből pályázati forrás: 8,5 M Ft.*

#### *Újszerű polimerek előállítása*

Kvázielő karbokationos polimerizációval szabályozható tulajdonságú polimereket állítottak elő. Az izobutilén polimerizációs mechanizmusának kutatása során vizsgálták a protoncsapdának a vegyületek polimerizációjára kifejtett hatását. Megállapították, hogy protoncsapda jelenlétében a poliizobutilén láncok összekapcsolódásának mértéke – a várttól eltérően – maximum görbe szerint változik a katalizátor koncentráció növekedésével.

Több éve folytatnak kutatásokat láncvégi funkciós csoportokat tartalmazó poliizobutilének környezetkímélő előállítására. Az elmúlt évben vizsgálták a különböző olefin végcsoportú poliizobutilének oxidatív láncvég-módosítását ózonnal. Az eljárások során karboxil és aldehid funkciós csoportokat sikerült kialakítani.

A makromolekuláris tervezési eljárásokkal olyan polimerek előállítására nyílik lehetőség, amelyek tulajdonságai felülmúlják számos eddig használt polimer fizikai és kémiai tulajdonságait. A korábbi években új szintézis módszert dolgoztak ki hiperelágazásos polimerek előállítására. Ezek folytatásaként 2007-ben olyan hiperelágazásos kopolimereket állítottak elő kvázielő gyökös polimerizációval, amelyek fontos gyakorlati jelentőségűek lehetnek. Az egyik alkalmazási terület különleges fogtömő anyagok előállítása kereskedelmi forgalomban kapható monomerekből. Az e területen szerzett tudást az intézet a DuPont Co. amerikai vállalattal több éve tartó kutatási együttműködésben is kamatoztatja.

*Kutatói ráfordítás: 5 fő, ebből intézeti állományban van: 5 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 24 M Ft, ebből pályázati forrás: 3,5 M Ft.*

#### *Poliolefinek degradációja és stabilizálása*

A különböző katalizátorokkal gyártott polietilén és polipropilén lebomlását és stabilizálását befolyásoló tényezőket tanulmányozták a termékek feldolgozási és alkalmazási körülményei között. Vizsgálták, hogy a polietilén alapanyagokban levő katalizátormaradékok milyen szerepet játszanak a polimerek lebomlásában. Tanulmányozták továbbá a különböző adalékok (antioxidánsok, savmegkötők) hatását a polimer feldolgozása során lejátszódó kémiai folyamatokra. Összefüggést állapítottak meg a poliolefinek gyártástechnológiai paraméterei, az adalékok összetétele és a polimer kémiai szerkezete között.

Poliolfineknél - modellkísérletekkel - vizsgálták a foszfortartalmú antioxidánsok kémiai szerkezete és hatásmechanizmusa közötti összefüggést a feldolgozási körülményei között. Polietilén csövek esetében összefüggést állapítottak meg az adalékok hidrolitikus stabilitása,

valamint a különböző antioxidáns rendszerek hatékonysága között. Fröccsöntött polietilén termékekben használt különböző fénystabilizátorok kémiai szerkezete és hatékonysága között is összefüggést állapítottak meg. Elemezték továbbá az adalékok közötti kölcsönhatás szerepét a hatékonyságban.

Propilén/etilén kopolimerekben vizsgálták különböző adalékok hatását a polimer organoleptikus tulajdonságaira. A kutatást a TVK-val, mint poliolefin gyártóval és a Clariant Huningue céggel, mint adalékgyártóval együttműködésben végezték. A kutatás eredményeit a TVK közvetlenül hasznosítja a különböző poliolefin adalékrendszereinek kidolgozásában.

*Kutatói ráfordítás: 4 fő, ebből intézeti állományban van: 4 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 10 M Ft, ebből pályázati forrás: – M Ft.*

#### *Természetes és szintetikus polimerek és társított rendszereik*

Tanulmányozták a különböző polimerek és társított rendszereik szerkezet-tulajdonság összefüggéseit és a terhelés hatására végbemenő deformációs folyamatokat. Külső feszültség hatására a kompozitokban mikromechanikai deformációs folyamatok indulnak meg. Akusztikus emisszióval és a térfogati deformáció módszerével vizsgálták e folyamatokat. Megállapították, hogy a töltőanyagot tartalmazó kompozitokban a határfelületek elválása az uralkodó részfolyamat. Több társított rendszerben (nanokompozit, faliszt erősítésű anyagok) azonban egyéb mechanizmusok, pl. az erősítő anyag törése, a mátrixból történő kihúzódnása is előfordulhatnak. További vizsgálatokat végeztek és jelentős haladást értek el a delaminációval előállított rétegszilikát nanokompozitok tanulmányozásában. Vizsgálták a feldolgozási körülményeknek a rétegszilikát eloszlására és exfoliációjára gyakorolt hatását. A kapott eredmények azt mutatták, hogy bár a feldolgozási paramétereknek a kompozit tulajdonságaira gyakorolt hatása a vártnál kisebb, de a maximális delaminációt biztosító feldolgozási paraméterek meghatározhatók. Saját és irodalmi adatok elemzésével megállapították, hogy a jelenleg használt megközelítéssel csak kismértékű, legfeljebb 10%-os exfoliáció érhető el. Ennél nagyobb mértékű exfoliációnál - a feldolgozási paraméterek hatása mellett - a komponensek közötti kölcsönhatásokat is figyelembe kell venni. Jelentős erőforrásokat fordítottak a természetes erősítőanyaggal módosított, illetve biológiailag részben vagy egészben lebontható polimerek vizsgálatára is.

*Kutatói ráfordítás: 6 fő, ebből intézeti állományban van: 5 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 12 M Ft, ebből pályázati forrás: 1,4 M Ft.*

### **Környezetkémiai kutatások**

#### *Légkörkémiiai kinetika és fotokémia*

Kifejlesztettek egy újszerű, lézerspektroszkópai detektálást alkalmazó kinetikai mérési eljárást, amellyel az acetyl-gyök és acetonil-gyök oxigénmolekulával végbemenő elemi reakcióját tanulmányozták. Megállapították, hogy a két szabadgyök lényegesen eltérő módon reagál O<sub>2</sub>-nel, ami ellentmond a légkörkémiában szokásos feltételezésnek. Az acetyl-gyök és az oxigén közötti reakció - kémiai aktiválással - hidroxil-gyököt szolgáltat kis nyomásokon, míg a acetonil-gyök és az oxigénmolekula kölcsönhatása a nyomásfüggő asszociációs reakciók sajátosságait mutatja. Az eltérő kinetikai viselkedést a köztiterméként keletkező, gerjesztett peroxil-gyökök továbbalakulásának eltérő molekuláris mechanizmusával magyarázták.

Nagyérzékenyséű környezetanalitikai módszerek kifejlesztésének tudományos megalapozása céljából fotofizikai alapkutatásokat végeztek folyadékfázisban. Megállapították, hogy a kettős lumineszcenciát mutató 4-dimetilamino-piridin töltésátviteli állapotához tartozó fluoreszcencia intenzitása alkoholokkal történő komplexképződés hatására megerősödik, és a gerjesztett állapot dipólusmomentuma jelentősen megnő. Új, a korábbi irodalmi adatnál lényegesen alacsonyabb dipólusmomentum értéket határoztak meg az alapvető fontosságú 4-dimetilamino-benzonitril molekula tripllett gerjesztett állapotára.

*Kutatói ráfordítás: 4 fő, ebből intézeti állományban van: 3 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 38 M Ft, ebből pályázati forrás: 6 M Ft.*

#### *Műanyag hulladékok kezelésével és polimerek környezetileg előnyösebb előállításával kapcsolatos kutatások*

Tanulmányozták a műanyagiparban nagy mennyiségben használt ólom-sztearát hőstabilizátor és a 2,6-di-terc-butil-4-metilfenol antioxidáns hatását a PVC oxidáló körülmények között bekövetkező hőbomlására. A folyamatot oldószerben vizsgálták, mert így az egyedi reakciók jobban nyomon követhetők, mint szilárd minták esetén, és a térhálósodás helyett a láncszakadás kerül előtérbe. Oldószerként 1,2,4-triklór-benzolt és dioktil-ftalátot alkalmazták. Előbbi gyakran alkalmazott apoláris közeg polimerek vizsgálatánál, utóbbi a PVC gyakran használt lágyítószer. Eredményeik azt mutatják, hogy mindkét adalék esetén kidolgozható egy enyhe termooxidatív eljárás, melynek során a poli(vinil-klorid) hulladékból értékes másodlagos termék hozható létre. Így a PVC hulladékot környezetileg előnyös módon lehetne feldolgozni.

Foszfortartalmú szerves és szervetlen égésgátló adalékok hatását tanulmányozták elektronikai hulladékok jellemző műanyag komponenseinek (polikarbonát, vinil-polimerek és –kopolimerek) hőbomlására. Megállapították, hogy a szerves foszfít égésgátló nem befolyásolja e polimerek hőbomlását. Az illékony termékek között azonban megjelennek az égésgátló szerves csoportjaiból származó alkil-fenolok. A szervetlen foszfátok jelentős mértékben elősegítik a polimerek elszenesedését, és hátráltatják a magas hőmérsékleten lejátszódó, illékony termékek képződésére vezető gyökös kémiai reakciókat. Polikarbonátokban a foszfátok a karbonát csoport részleges hidrolízisét idézik elő, így a bomlás már alacsonyabb hőmérsékleten bekövetkezik.

A környezetszennyezés mértékének csökkentése érdekében kutatásokat végeztek polimerek környezetileg előnyösebb előállítására. Sikeresen állítottak elő polisztirolt benzotrifluorid oldószerben, amely kevésbé illékony, mint az eddig alkalmazott, környezetre káros diklór-metán.

*Kutatói ráfordítás: 4 fő, ebből intézeti állományban van: 4 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 26 M Ft, ebből pályázati forrás: 1 M Ft.*

#### *Biomassza anyagok hasznosításának kutatása termikus módszerekkel*

Faipari és bútorigipari hulladékok, energiaültetvényről származó termékek, valamint mezőgazdasági és élelmiszeripari melléktermékek hőbomlását vizsgálták. A szervetlen anyagokat és a kioldható komponenseket előzetesen eltávolítva tanulmányozták e komponensek hőbomlásra gyakorolt hatását. Kísérleteikkel igazolták, hogy az extrahálható anyagok (zsírsavak és fitoszterolok) könnyebben meghatározhatók termikus hidrolízissel és metilezéssel összekapcsolt gázkromatográfia-tömegspektrometria módszerrel, mint a



hagyományos módszerekkel. A minták termikus viselkedésének összehasonlítására főkomponens elemzést végeztek, amelynek segítségével korrelációkat találtak a különféle kísérleti adatok között. Nagy teljesítményű reakciókinetikai kiértékelő módszereket fejlesztettek és alkalmaztak, melyekkel az eddigieknél pontosabban leírhatók a minták hőbomlásakor lejátszódó folyamatok.

*Kutatói ráfordítás: 3 fő, ebből intézeti állományban van: 3 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 20 M Ft, ebből pályázati forrás: 2 M Ft.*

#### *Anyag- és energiatakarékos technológiák talaj-, víz- és levegő tisztítására*

Folytatták a modell-számításokat a napenergiás sótalánító rendszer hőtani és fluidmechanikai jellemzésére a legkedvezőbb geometriai és fluidmechanikai megoldások kialakítása, valamint a hő- és anyagtranszport intenzívebbé tétele céljából. Az együttműködő olasz iparvállalat (ECOS S.R.L., Cagliari) területén az intézet munkatársai által telepített ipari modul folyamatosan gyártja a desztillált vizet a vállalat belső igényeinek kielégítésére.

A 2005-ben, OMFB-támogatással épített 50 m<sup>3</sup>/nap kapacitású kombinált napenergiás fotokatalitikus és sztrippeléses víztisztító üzem technológiai egyszerűsítése és gazdaságosságának javítása céljából az eddigiekben használt szuszpendált TiO<sub>2</sub> (anatáz) fotokatalizátort a reaktor belső felületére rögzített anatáz réteggel helyettesítették. A sztrippelési és a napenergiás fotokatalitikus oxidációs folyamatok kinetikáját részletesen leírták az általuk használt vékonyrétegű átfolyósos reaktorokra, valamint kevert tankreaktorokra is.

Felszerelték, és hidegüzemben kipróbálták a festőüzemekben levegőtisztításra használt aktív szén adszorbensek helyszíni regenerálására – GVOP projekt keretében – kifejlesztett technológia mérő és folyamatszabályozó rendszerét.

*Kutatói ráfordítás: 1 fő, ebből intézeti állományban van: 1 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 16 M Ft, ebből pályázati forrás: 3,2 M Ft.*

#### *Analitikai módszerfejlesztés és korróziós inhibitor-kompozíció kidolgozása*

Vizsgálták talajok, szennyvíziszapok és üledékek feltárásának, illetve kivonatkészítésének hatását a szennyezőként jelenlevő poliaromás szénhidrogének mennyiségi meghatározására, és optimalizálták az egyes komponensek visszanyerésének körülményeit az extrakció során. Szennyvíziszapok, hulladékok feltárásának hatásfokát elemezték eltérő savkeverékek és feltárási körülmények mellett, különböző vizsgálandó komponensek esetén. Módszereket fejlesztettek ki biológiai eredetű anyagok kromatográfias vizsgálatára, valamint a polimer láncban nitrogént tartalmazó szerves anyagok nitrogéntartalmának meghatározására.

Inhibitor-kompozíciót dolgoztak ki dízelmotorok hűtőrendszere - mint több galvanikus kapcsolatban levő fémet tartalmazó rendszer - korrózió elleni védelmére. A kifejlesztett kompozíció kísérleti gyártása megkezdődött, üzemi vizsgálatára a Paksi Atomerőműben kerül sor.

*Kutatói ráfordítás: 3 fő, ebből intézeti állományban van: 2 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 8 M Ft, ebből pályázati forrás: – M Ft.*

### III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Az AKI kutatói 2007-ben is számos hazai kutatóhellyel dolgoztak együtt sokféle kutatási témában. Különösen intenzívek voltak kutatási kapcsolataik az MTA intézeteivel, így a Kémiai Kutatóközpont másik három intézetével és a Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Kutatóintézettel. A hazai egyetemek közül az Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Karával, a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki Karával, a Semmelweis Egyetemmel, a Szegedi Egyetem Gyógyszertechnológiai Intézetével, a Pannon Egyetem Műszaki Informatikai, illetve Mérnök Karával, a Debreceni Egyetemmel, a Pécsi Egyetem Általános Orvostudományi Karával és a Miskolci Egyetemmel működtek együtt különböző kutatási témákban.

Az intézet a Pannon Egyetem Műszaki Informatikai Karának Műszaki Kémiai Intézetével közös professzori laboratóriumot működtet. Az Alkalmazott Polimer Fizikai Kémiai Osztály egy szakmai egységet alkot a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszékével.

Az intézet munkatársai több egyetemen (Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Eötvös Loránd Tudományegyetem, Miskolci Egyetem, Pannon Egyetem, Közép-Európai Egyetem) tartottak egyetemi és posztgraduális előadásokat, vezettek szemináriumokat és laborgyakorlatokat.

Témáik többségét nemcsak hazai, hanem nemzetközi kutatási együttműködésben is művelték. Formális kétoldalú kutatási együttműködések keretében az alábbi témákban és partnerekkel dolgoztak együtt.

Az intézet munkatársai a pozsonyi Comenius Egyetemmel higiénikus textilanyagok előállításán dolgoztak és újságpapír felületét kezelték nyomdaipari alkalmazás céljából.

A belgrádi Vinca Magfizikai Kutatóintézet kutatóival fullerének RF termikus plazmában történő előállításának tanulmányozása kapcsán a grafit, mint kiindulási anyag egyes szennyezőinek szerepét vizsgálták. A moszkvai Általános és Szervetlen Kémiai Intézettel együttműködve a Si/C/N/O/B/H anyagrendszer esetén a termikus plazmában lezajló kémiai folyamatok termodinamikai modellezését végezték el.

A platinacsoport tagjainak egykristályain elektrokémiai kettősréteg-vizsgálatokat végeztek a német Ulmi Egyetemmel közösen. A Jülichi Kutató Központtal együttműködve elektrokémiai úton állítottak elő és módosítottak nanoréseket.

A felső troposzférára vonatkozó kinetikai és fotokémiai laboratóriumi kísérleteket végeztek az orleans-i Égési és Reaktív Rendszerek Laboratóriumának kutatóival közösen. Ugyancsak fotofizikai témában dolgoztak együtt a göttingeni Max-Planck-Intézettel.

A kínai Dongying városban működő China University of Petroleummal együttműködve biomassza anyagok termikus viselkedését tanulmányozták az új típusú aktív szén előállítási módszereknél lejátszódó folyamatok megismerése céljából.

A Cagliari Egyetemmel a napenergiás sótalanításra irányuló kutatásokban működtek együtt.

#### IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

##### *Hazai pályázatok*

Az intézet kutatói által 2007-ben művelt OTKA, illetve OTKA–NKTH pályázatok közül az alábbiakban értek el figyelemre méltó eredményeket:

- Poletilén-tereftalátot kezeltek nitrogén plazmaimmerziós ionimplantációval és feltárták a módosított réteg felületkémiái és kopásállósági tulajdonságainak változásait (K 066741).
- XPS módszerrel minőségi, mennyiségi és kötésszerkezeti, míg XPS MultiQuant módszerrel morfológiai modellvizsgálatot végeztek politejsav-poliglikolsav alapú nanostrukturált rendszereken (K 068120).
- Kidolgozták tervezett tulajdonságú ferritek előállítási módszerét, és meghatározták a grafit szennyezőinek hatását fullerének termikus plazmában történő előállításakor (T 047360).
- Kidolgozták többféle különleges nanoszerkezetű polimer kotérháló szintézisét, és felderítették a kapott anyagok szerkezetét, valamint egyéb fontos tulajdonságait (T 046759).
- Összefüggést állapítottak meg csillag polimerek szerkezete és a kiindulási lineáris polimer karok molekulatömege között, és új módszert dolgoztak ki hiperelágazásos polimerek előállítására (T 048409).
- Különböző polimer kotérhálók előállításával és nanoszerkezetű morfológiájuk nagyműszeres analizisével foglalkoztak (IN64295).
- Kidolgozták szabályosan váltakozó szerkezetű amfil polimer kotérhálók és többfunkciós inimerék szintézisét (F 061299).
- A polimer mátrix jellemzőinek, elsősorban merevségének a töltőanyag tartalmú polimerek szerkezetére, mikromechanikai deformációs jellemzőire gyakorolt hatását vizsgálták (F 068579).
- Rétegszilikát tartalmú nanokompozitok előállítására alkalmas új típusú töltőanyagokat jellemeztek (K 067936).
- Kísérleteket végeztek talaj- vagy szennyvizek perklorát-, nitrát- és halogénezett szénhidrogén tartalmának eltávolítására, valamint kismennyiségű platina meghatározására (K 067874).
- Kísérleti és elméleti kutatásokat végeztek fotofizikai folyamatok oldószerfüggésének általánosabb leírására (T045890).
- Megállapították, hogy a légkörkémiában fontos etil-metil-keton fotobomlási kvantumhatásfoka nyomásfüggő, és leírható a lineáris Stern-Volmer összefüggéssel (K 068486).
- Termoanalitikai vizsgálatokkal összefüggéseket állapítottak meg a növényi eredetű minták szervesanyag-összetétele, a szervesetlen sók és az extrahálható anyagok mennyisége, valamint a hőbomlás sebessége és a bomlástermékek eloszlása között (K 061504).
- Feltárták foszfortartalmú szervesetlen és szerves égésgátló adalékoknak vinil-polimerek és -kopolimerek hőbomlási reakcióira gyakorolt hatását (K 068752).

Az intézet kutatói egyéb hazai kutatási pályázatokban a következő eredményeket érték el 2007-ben:

- Többféle, a fehérjék szabályozott hatóanyag leadását biztosító gyógyszerkészítményt állítottak elő (GVOP-3.1.1.-2004-05-0031/3.0).

- Nanoméretű, oxid- és nemoxid kerámiaporokat állítottak elő RF termikus plazmában, és vizsgálták azok alkalmazását különböző területeken (OMFB-00252/2007).
- Vizsgálták fémgözők viselkedését az eddig ismert plazmatechnológiai eljárásokban, fémgöz-ívű plazmafáklya kifejlesztése érdekében (JÁP\_TSZ\_P0400808).
- Megállapították, hogy a tumoros állapot előrehaladásának mértéke megállapítható a szervezetben szignifikánsan megváltozó redox-paraméterek és fémkoncentrációk alapján (NKFP 1A005/2004).
- Előre meghatározott tulajdonságú poli(etilén-imin)-t állítottak elő (DermaVi\_HIKC05 Asbóth program).
- Felszerelték, és hidegüzemben kipróbálták az általuk kifejlesztett aktív szén adszorbensek regenerálására használható mérő és folyamatszabályozó rendszert (GVOP-3.1.1./2004-05-0153/3.0).

### *Nemzetközi pályázatok*

Az intézet kutatói 2007-ben, a nemzetközi együttműködésben művelt EU pályázatokban az alábbi eredményeket érték el:

- Módszereket dolgoztak ki enzimek rögzítésére alkalmas makro-, mikro- és nanoszemcsés kitozán hordozó részecskék előállítására (MRTN-CT-2004-512247)
- Oxigéntartalmú szerves molekulák és szabadgyökök légköri lebomlására adtak meg kinetikai és fotokémiai paramétereket (GOCE-CT-2004-505390-SCOUTO3).

Egyéb nemzetközi vagy külföldi forrásból művelt témák:

- Sokkomponensű nanoszemcsés katalizátorokat állítottak elő RF termikus plazmában. Együttműködő partner: BASF (Németország). RF plazmában mágneses nanorészecskéket tartalmazó szénhagymák előállítását vizsgálták a Varsói Egyetem Kémia Tanszékével együttműködve.
- PP és PA nanokompozitok szerkezet/tulajdonság összefüggéseinek megállapításában eredményesen működtek együtt a holland Twente Egyetemen, Szlovák Tudományos Akadémia Polimer Intézetével és a koreai Inha Egyetem kutatóival.
- A Clariant International Ltd. megbízásából különböző antioxidánsok hatékonyságát és hatásmechanizmusát, továbbá a hatékonyságot befolyásoló tényezőket tanulmányozták poliolefinekben.
- DuPont Research Award jóvoltából új típusú multifunkciós polimerek előállítását tanulmányozták.
- Új, amfifil tulajdonságú, nanotemplátként alkalmazható (önszerveződő) poliizobutilén-b-poli(etilénoxid) blokk-kopolimerek előállításában és vizsgálatában a Kolloidok és Határfelületek Max Plank Intézetével (Németország) működtek együtt.
- A francia Lille-i Egyetemen közösen irányítottak PhD munkát az atmoszféra fizikai kémiája témában (ARCUS / PhyCAFoR, 2006/09).
- Különböző biomassza hulladékok és a faszenek hasznosítási lehetőségeinek felderítésében a trondheimi Norvég Tudomány és Technológiai Egyetem és az USA-beli Hawaii Egyetem kutatóival dolgoztak együtt.

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

1. Bertóti I, Mohai M, Tóth A, Ujvári T: Nitrogen-PBII modification of ultra-high molecular weight polyethylene: composition, structure and nanomechanical properties, SURFACE & COATINGS TECHNOLOGY 201: 6839–6842 (2007)
2. Markovic Z, Todorovic-Markovic B, Mohai I, Farkas Z, Kováts E, Szépölggyi J, Otasevic D, Scheier P, Feil S, Romcevic N: Comparative process analysis of fullerene production by the arc and the radio-frequency discharge methods, JOURNAL OF NANOSCIENCE AND NANOTECHNOLOGY 7: 1–13 (2007)
3. Feczko T, Puxbaum H, Kasper-Giebl A, Handler M, Limbeck A, Gelencsér A, Pio C, Preunkert S, Legrand M: Determination of water and alkaline extractable atmospheric humic-like substances with the TU Vienna HULIS analyzer in samples from six background sites in Europe, JOURNAL OF GEOPHYSICAL RESEARCH 112: D23S10, (2007)
4. Váli L, Stefanovits-Bányai É, Szentmihályi K, Fébel H, Sárdi É, Lugasi A, Kocsis I, Blázovics A: Liver-protecting effects of table beet (Beta vulgaris var. rubra) during ischemia-reperfusion, NUTRITION 23: 172–178 (2007)
5. Georgiou TK, Groh WP, Iván B, Patrickios CS: Amphiphilic model conetworks of polyisobutylene methacrylate and 2-(Dimethylamino)ethyl methacrylate prepared by the combination of quasiliving carbocationic and group transfer polymerizations, MACROMOLECULES 40: 2335–2343 (2007)
6. Dányádi L, Janecska T, Szabó Z, Nagy G, Móczó J, Pukánszky B: Wood flour filled PP composites: compatibilization and adhesion, COMPOSITES SCIENCE AND TECHNOLOGY 67(13): 2838–2846 (2007)
7. Nádásdi R, Kovács Gg, Szilágyi I, Demeter A, Dóbbé S, Bérces T, Márta F: Exciplex laser photolysis study of acetone with relevance to tropospheric chemistry, CHEMICAL PHYSICS LETTERS 440: 31–35 (2007)
8. Pajkossy T, Kolb DM: Double layer capacitance of the platinum group metals in the double layer region, ELECTROCHEMISTRY COMMUNICATIONS 9: 1171–1174 (2007)
9. Mészáros G, Li C, Pobelov I, Wandlowski T: Current measurements in a wide dynamic range – applications in electrochemical nanotechnology, NANOTECHNOLOGY 18: 424004 (8pp) (2007)
10. Demeter A, Mile V, Bérces T: Hydrogen bond formation between 4-(dimethylamino)-pyridine and aliphatic alcohols, JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 111: 8942–8949 (2007)

11. Binder WH, Petraru I, Roth T, Groh WP, Pálfi V, Keki S, Iván B: Magnetic and temperature-sensitive release gels from supramolecular polymers, *ADVANCED FUNCTIONAL MATERIALS* 17: 1317–1326 (2007)

## VI. A kutatóhely 2007. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA Kémiai Kutatóközpont, Anyag- és Környezetkémiai Intézet

|  |       |  |           |
|--|-------|--|-----------|
| Átlagléltszám <sup>1</sup> :   | 83    | Ebből kutató <sup>2</sup> :              | 54        |
| PhD, kandidátus:   | 18    | MTA doktora:                             | 11        |
|  |       | levelező tag:                            | 1         |
|  |       | rendes tag:                              | 2         |
| 35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:                              |       |  | 25        |
| Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> : |       |  | 114       |
| Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :                 |       |  | 111       |
| <i>Ebből</i> impakt faktoros publikáció magyarul:  | 0     | idegen nyelven:                          | 54        |
| nemzetközi együttműködés keretében:  | 30    | SCI által regisztrált folyóiratban:      | 54        |
| összesített impakt faktor <sup>5</sup> :   | 115,1 | összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :   | 1244      |
| összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:   |       |  | 1018      |
| <i>Magyarul</i> könyv/monográfia <sup>7</sup> :  | 0     | könyvfejezet:                            | 6         |
|  |       | jegyzet:                                 | 0         |
| <i>Idegen</i> nyelven könyv:   | 0     | könyvfejezet:                            | 20        |
|  |       | jegyzet:                                 | 0         |
| Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:   | 1     | MTA doktora:                             | 1         |
|  |       | levelező tag:                            | 0         |
|  |       | rendes tag:                              | 0         |
| Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :                                   | 0     | <i>ebből</i> külföldön:                  | 0         |
| Értékesített szabadalmak száma:  |       |  | 0         |
| Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :         | 46    | posztterek száma:                        | 73        |
| Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :   |       |  | 0         |
| Nemzetközi tud. bizottsági tagság:   | 12    | Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:      | 10        |
| Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :             |       |  | 15        |
| Ebből doktori iskolákban oktatók száma:  | 4     | Doktori iskolát vezetőik száma:          | 0         |
| Elméleti kurzusok száma <sup>13</sup> :  | 28    | Gyakorlati kurzusok száma:               | 11        |
| TDK munkát készítő hallgatók száma:  | 13    | Diplomamunkát:                           | 13        |
|  |       | PhD-t:                                   | 12        |
| Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>14</sup> :                  |       |  | 1716      |
| Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>15</sup> :               |       |  | 355 MFt   |
| Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>16</sup> :   | 5     | Teljes saját bevétel:                    | 346,9 MFt |
| Saját szabadalmi, know-how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :                         |       |  | 2,3 MFt   |
| Az év folyamán művelt OTKA témák száma:  |       |  | 16        |
|  |       | A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: | 36,5 MFt  |
| Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma <sup>18</sup> :                         |       |  | 5         |
| NKFP:  | 2     | A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: | 218,7 MFt |
| Egyéb:   | 3     | A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: | 0,9 MFt   |
| NFT témák száma <sup>19</sup> :  | 2     | A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: | 8,5 MFt   |
| Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>20</sup> :                          |       |  | 5         |
| EU forrásból:  | 1     | A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: | 0,8 MFt   |
| Egyéb:   | 4     | A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: | 4,3 MFt   |
| Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:                              |       |  | 34        |
|  |       | A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: | 74,8 MFt  |
| Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>21</sup> :                            |       |  | 0 MFt     |

## **Az MTA KK Anyag- és Környezetkémiai Intézetének kiemelten sikeres kutatási területei 2007-ben**

### *Nanoszerkezetű kompozit gyógyszerformák kifejlesztése fehérjék terápiás hatékonyságának növelésére*

A különböző fertőző betegségek leküzdése az egészségügy egyik legfontosabb problémája világszerte, beleértve Európát és Magyarországot is. Az ilyen betegségek jelentős hányadát kitevő vírusfertőzések elleni küzdelem egyik leghatékonyabb eszköze a különféle fehérje alapú készítmények terápiás alkalmazása. Az e készítményekben használt alapanyagokat többnyire biotechnológiai úton, rendszerint igen drágán állítják elő.

A magyar egészségügy évente több milliárd forintot fordít az említett hatóanyagokat alkalmazó terápiák támogatására. A gyógyszerköltségeket jelentős csökkenteni lehet és a terápiákat nagyobb betegcsoportra lehet kiterjeszteni, ha az igen drága hatóanyagot olyan gyógyszerformátumként vinnék be az emberi szervezetbe, hogy az a szervezet megfelelő helyén, a lehető legkisebb koncentrációban, és minél hosszabb ideig fejtsse ki hatását. Szélesebb értelemben e célok úgynevezett szabályozott és célzott hatóanyag leadású készítmények (controlled and targeted drug delivery systems) kifejlesztésével és alkalmazásával érhetők el.

Az MTA KK AKI részvételével végrehajtott GVOP-3.1.1.-2004-05-0031/3.0 projekt olyan mikro- és nanorészecskék előállítására és alapvető tulajdonságaik meghatározására irányult, amelyek alkalmasak fehérje alapú gyógyszer-hatóanyagok (adott esetben természetes interferon) megfelelő formában történő megkötésére, emberi szervezetbe való bevitelére, és ott szabályozott és elnyújtott idejű leadásra. A projekt céljai között szerepelt a hordozóhoz kötött hatóanyag többféle gyógyszerformában történő alkalmazásának előkészítése is. A projekt vezetője Szegedi Tudományegyetem volt, a konzorcium további tagjai pedig az MTA KK AKI kívül a Pannon Egyetem és a Trigon Biotechnológiai Zrt. voltak. Az MTA KK AKI feladata a hordozóként használható mikro- és nanorészecskék előállítása, tulajdonságaik jellemzése és hatóanyag-megkötő képességének tanulmányozása volt. A projekt 2007-ben sikeresen zárult. A projekt megvalósítása során született fontosabb eredmények az alábbiakban foglalhatók össze.

### **Fehérje hatóanyagot tartalmazó, injekciós gyógyszerformátumban alkalmazható primer és kompozit szemcséket állítottak elő.**

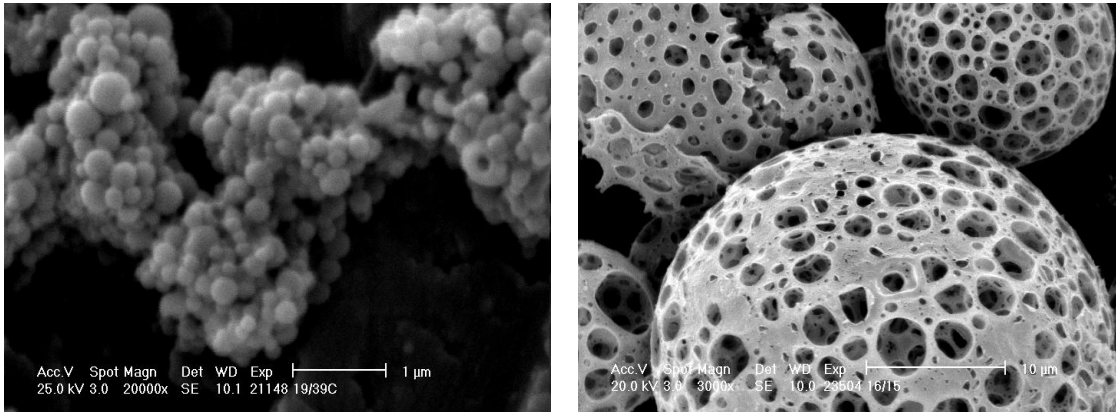
Ehhez háromféle módszert alkalmaztak.

1. A fehérje modellanyag primer részecskéit oldatból elektrolit oldatokkal, vagy etanollal csapatták ki, majd a szilárd részecskéket felületaktív anyagokkal stabilizálták.
2. Kitozán és polisztirol-szulfonát önszerveződő rétegzési folyamatával ún. mag-héj szerkezetű, fehérje típusú hatóanyagot tartalmazó nanokompozitokat állítottak elő. A részecskék átlagmérete 150 - 650 nm közé esett. A felhasznált hatóanyag biológiai aktivitásának kb. 40%-át lehetett a kompozitban visszanyerni. A mag-héj kompozitok előállítására magyar szabadalmat jelentettek be.
3. Emulziós eljárással a politejsav-glikolsav (PLGA)/fehérje hatóanyagból 200 nm - 300 µm mérettartományba eső kompozit részecskéket állítottak elő (1. ábra). A kompozitban a felhasznált hatóanyag biológiai aktivitásának kb. 35-40%-át lehetett visszanyerni.



**Kidolgozták szilárd formában kinyerhető szervesen hordozófehérje kompozitok előállítási módszerét.**

Plazmatechnológiai módszert dolgoztak ki nagy fajlagos felületű, kedvező felületi töltéssűrűségű, a felületén a modell fehérjét csaknem 100%-ban megkötő szervesen hordozóanyag előállítására. A módszerrel 12 – 42 nm jellemző méretű hordozószemcséket lehet előállítani. A szemcsékre külön lépésben, reverzibilisen adszorbeáltatott hatóanyag molekulák az élő szervezetben fennálló körülmények között időben elhúzódva szabadulnak fel. A biofarmáciai kísérletekben a felhasznált hatóanyag biológiai aktivitásának kb. 25-35%-át lehetett visszanyerni.



1. ábra Emulziós eljárással előállított, kapszulázott fehérje hatóanyagot tartalmazó nano- és mikrorészecskék pásztázó elektronmikroszkópos képe

**Kifejlesztették nyújtott hatóanyag leadást biztosító gyógyszerformák (injekció, kúp, tableta) előállítási módszerét.** Injekciós készítmények esetén a gyógyszer szállító nanogömböknek 200 nm-nél kisebbnek és viszonylag szűk méreteloszlásúnak kell lenniük azért, hogy ultraszűrővel sterilizálni lehessen a készítményt. A kis méret, a szűk méreteloszlás, a gömbszerű szerkezet és sima felület a szervezeten belüli gátak leküzdésekor is kitüntetett fontosságú. A tableta az injekciónál komfortosabb, és a betegek által jóval kedveltebb gyógyszerforma. Ennek érdekében a szervesen hordozón megkötött fehérje hatóanyagból intesztinoszolvens bevonattal ellátott tablettákat állítottak elő. Az intesztinoszolvens bevonatra azért van szükség, mert a fehérjék a gyomorban a savas pH és a pepszin hatására emésztődnek (2. ábra).



2. ábra Szervetlen hordozóra adszorbeáltatott fehérje hatóanyagot tartalmazó tabletták

**Biofarmáciai vizsgálatokat végeztek a kifejlesztett gyógyszerformákra.** A *sub cutan* injekció és a tabletták, mint szerformátumok in vivo leadási kinetikáját nyulakon tesztelték. Az injekciós formátumként vizsgált három nanokompozit esetében megállapították, hogy mindhárom elnyújtott hatóanyag leadású, de a leadás kinetikája a három esetben különböző volt. A tablettáknál nem tapasztaltak jelentős kinetikai eltérést a pozitív kontrollhoz képest. Ugyanakkor megállapították, hogy a tablettákkal bevitt hatóanyag bejut a vérkeringésbe. A készítmények nem a gyomorban adják le a hatóanyagot, hanem az a bélből szívódik fel. Egy kellő hatóanyag tartalmú, enteroszolvens bevonattal ellátott tabletták megfelelő alternatívát jelenthetnek a betegek által kevésbé kedvelt *sub cutan* bevitellel szemben.

A projekt során kifejlesztett eljárások alkalmasak a bioaktív hatóanyag biológiai tulajdonságainak megtartására, a kísérleti rendszerben kapott kitermelési eredmények elfogadhatóak voltak. A készítmények iparszerű gyártását megalapozó további kutatásokat, az előállítási technológia kidolgozását és léptéknövelését, a termékfejlesztéshez szükséges preklinikai, valamint az 1. és 2. fázisú klinikai vizsgálatokat további pályázati források bevonásával tervezzük elvégezni.