

Beszámoló a 2008. évi tudományos tevékenységről



TARTALOM

| | |
|--|-----------|
| KÉMIAI KUTATÓKÖZPONT | 5 |
| Biomolekuláris Kémiai Intézet..... | 9 |
| Nanokémiai és Katalízis Intézet | 23 |
| Szerkezeti Kémiai Intézet | 37 |
| Anyag- és Környezetkémiai Intézet | 53 |

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>

Biomolekuláris Kémiai Intézet

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

Nanokémiai és Katalízis Intézet

1025 Budapest Pusztaszeri út 59/67.
(1525 Budapest, Pf. 17.)
Tel.: 438-1166, Fax: 438-1164
e-mail: erika.kalman@chemres.hu

Szerkezeti Kémiai Intézet

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

Anyag- és Környezetkémiai Intézet

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

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

A kutatóközpont alapvető közfeladata, hogy a kémia és a vele rokon tudományágak (elsősorban az élettudományok, az anyagtudományok, a környezettudományok és a nanotudományok) fontos területein olyan nemzetközi színvonalú tudományos kutatásokat folytasson, amelyek több kutatócsoport összehangolt tevékenységét és különféle, 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, Kémiai Kooperációs Kutatási Központ tevékenységének megerősítése, a technológiai folyamatok elősegítése” c. (Új Magyarország Fejlesztési Terv, Közép-Magyarországi Operatív Program) pályázat feladatai 2008. évi teljesítésének. Az említett projekten kívül összesen 27 NKTH, ill. NKFP-által támogatott témában is részt vettek a Központ kutatói 2008-ban. Ezeknek a programoknak az eredményei reményeink szerint hozzájárulnak az ország gazdasági stabilizációjához, valamint az akadémiai-egyetemi kutatóhelyeknek a vállalati kutatási-fejlesztési programokba való bevonásához. A kitűzött célok elérését jelentős mértékben segítette az EU kutatási programokban való aktív részvétel is.

Az MTA Kémiai Kutatóközpont 2008. 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, valamint diagnosztikumok kidolgozására,
- Nanokémiai és katalíziskutatások, különös tekintettel a felületekkel kapcsolatos 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.

A kutatások említett irányainak tematikai koncepcióját és az egyes témákban eddig elért eredményeket a Központ Nemzetközi Tudományos Tanácsadó Testülete 2008. május 20-22-én megtartott ülésén megtárgyalta és nemzetközi színvonalúnak minősítette.

VI. A kutatóhely 2008. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA Kémiai Kutatóközpont

| | | |
|--|--|-----------------|
| Átlagléttség ¹ : 377 | Ebből kutató ² : 239 | |
| PhD, kandidátus: 93 | MTA doktora: 39 | levelező tag: 1 |
| rendes tag: 1 | | |
| 35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma: 91 | | |
| Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma ³ : 259 | | |
| Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ⁴ : 255 | | |
| <i>Ebből</i> impakt faktoros publikáció magyarul: 1 | idegen nyelven: 164 | |
| nemzetközi együttműködés keretében: 75 | SCI által regisztrált folyóiratban: 171 | |
| összesített impakt faktor ⁵ : 384.238 | összes hivatkozás száma ⁶ : 4158 | |
| összes hivatkozás száma önidézetek nélkül: 3206 | | |
| <i>Magyarul</i> könyv/monográfia ⁷ : - | könyvfejezet: 3 | jegyzet: |
| <i>Idegen</i> nyelven könyv: 1 | könyvfejezet: 26 | jegyzet: |
| Tud. fokozat megszerzése ⁸ : PhD: 16 | MTA doktora: 1 | levelező tag: - |
| rendes tag: - | | |
| Elfogadott találmányok, szabadalmak száma ⁹ : 2 | <i>ebből</i> külföldön: 1 | |
| Értékesített szabadalmak száma: - | | |
| Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos | | |
| szóbeli előadások száma ¹⁰ : 102 | poszterek száma: 98 | |
| Tanácsadói tevékenységek száma ¹¹ : - | | |
| Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 32 | Nemzetközi folyóirat szerk. tagság: 43 | |
| Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹² : 47 | | |
| Ebből doktori iskolákban oktatók száma: 14 | Doktori iskolát vezetőik száma: - | |
| Elméleti kurzusok száma ¹³ : 58 | Gyakorlati kurzusok száma: 48 | |
| TDK munkát készítő hallgatók száma: 13 | Diplomamunkát: 23 | PhD-t: 81 |
| Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma ¹⁴ : 3203 | | |
| Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ : | 1904,5 | MFt |
| Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁶ : 20 | Teljes saját bevétel: | MFt |
| Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel ¹⁷ : | 14,5 | MFt |
| Az év folyamán művelt OTKA témák száma: 50 | | |
| A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: | | 104,8 MFt |
| Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma ¹⁸ : 27 | | |
| NKFP: 27 | A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: 414,0 MFt | |
| Egyéb: - | A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: - MFt | |
| NFT témák száma ¹⁹ : | A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: - MFt | |
| Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma ²⁰ : 12 | | |
| EU forrásból: 11 | A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: 125,0 MFt | |
| Egyéb: 1 | A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: 2,4 MFt | |
| Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma: 429 | | |
| A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: | | 414,8 MFt |
| Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány ²¹ : - 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 közfeladata volt 2008. évben, 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 gazdasági célú kutatási-fejlesztési feladatok elvégzése.

Az intézet fontos kötelezettségei közé tartozott 2008. 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

Heterociklusos kémiai kutatások

Újabb, palládium-katalizált keresztkapcsolások végrehajtásával fenotiazinnal szubsztituált dién-származékokat szintetizáltak, melyeknek a multidrog-rezisztenciára gyakorolt hatását kooperációban kutatták. A rezisztenciagátlás vizsgálata az életminőség javítása szempontjából napjaink egyik kiemelt területe.

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

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

Kutatói ráfordítás: 5 fő, ebből intézeti állományban: 5 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 25 MFt, ebből pályázati forrás: -.

Organokatalízis kutatások

A korábbi években egy olyan fázisjelölő módszert fejlesztettek ki, amely kiküszöböli az eddigi módszerek gyengéit, ugyanakkor azoknál lényegesen olcsóbb. Nem a korábbi gyakorlatnak megfelelő, nagyméretű fázisjelölő csoportokat alkalmazták, hanem a lehető legkisebbeket: a trifluorometil-, illetve a tercier-butil-csoportot. Ennek kidolgozását az az alapvető megfigyelés tette lehetővé, hogy a minimálisan fluorozott vagy tercier-butilezett

vegyületek oldhatósága és megoszlási hányadosa sokkal érzékenyebben reagál a víz jelenlétére, mint a „normál” szerves molekulák. Erre a felismerésre építve számos, ipari szempontból is értékes eljárást tettek fázisjelöltté, mint pl. a ketonok aszimmetrikus CBS redukcióját, a Wittig-reakciót és a Mitsunobu-reakciót, valamint a kereszt-kapcsolásos reakciókat. Különösen értékes e módszer abból a szempontból is, hogy az olcsó 3,5-bisztrifluorometil-brómbenzolt alkalmazták mint kiindulási vegyületet. E fejlesztések mellett törekedtek továbbá új elválasztási technikák kidolgozására is. Így elsőként figyelték meg a korund alkalmazhatóságát szilárdfázisú extrakciónál. Méretnövelhető, folyadékmembránnal működő, extrakciós berendezést hoztak létre. A kidolgozott berendezés és eljárás környezetvédelmi szempontok alapján is előnyös. A munka eredményei két nemzetközi szabadalom beadását, illetve egy spin off vállalkozás elindítását tették lehetővé.

Kutatói ráfordítás: 4 fő, ebből intézeti állományban: 4 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 24 MFt, ebből pályázati forrás: 6 MFt.

Szénhidrátkémiai kutatások

A heparin szerkezet-hatás összefüggéseinek tanulmányozásával kapcsolatban folytatták az ortogonálisan védett oligoszacharidok előállítását. Négy olyan, ortogonálisan védett tetraszacharidot szintetizáltak, amelyekből a heparin összes - több mint ötszáz - tetraszacharid egysége előállítható.

Az ortogonális védőcsoportstratégiát sikeresen alkalmazták a heparin bioszintézisében szerepet játszó heparánáz enzim inhibitorainak szintézisére, e területen számos azacukor-tartalmú heparin-diszacharid analógot állítottak elő.

Kidolgoztak egy új védőcsoportot hidroxilcsoportok védelmére. Megállapították, hogy az általuk bevezetett 2-nitrofenilacetyl-csoport stabilis a legfontosabb kémiai átalakítások során, ugyanakkor szelektíven eltávolítható a leggyakrabban használt védőcsoportok mellől. Kimutatták továbbá, hogy az új védőcsoport ortogonális a heparin oligoszacharidok szintézisében eddig használt védőcsoportokra, ami lehetőséget ad az ortogonális védőcsoportstratégia további kiterjesztésére.

Génterápiás célokra nagyszámú, transzfekciós vektorként alkalmazható, szénhidráttal módosított polimerszármazékot állítottak elő. Szisztematikusan változtatva a molekuláris paramétereket, részletesen vizsgálták e vegyületek hatás-szerkezet összefüggéseit géntranszfekciós kísérletekben. Megállapították a maximális transzfekciós hatékonysághoz szükséges molekulatömeget és szénhidráttartalmat. A szintetizált géntranszfekciós vektorok között több olyan vegyület található, melyeknek hatékonysága meghaladja az irodalomból ismert leghatékonyabb vegyületekét.

Kutatói ráfordítás: 3 fő, ebből intézeti állományban: 3 fő. Becsült teljes ráfordítás: 30 MFt, ebből pályázati forrás: 20 MFt.

Természetes szerves vegyületek szintézise

Az elmúlt évben a D-gyűrűben héttagú homoergolénváz kialakítására végeztek kísérleteket. Ennek során a már korábban előállított alfa-amino-Uhle ketont Michael-addícióban N-alkilezték metil-vinil-ketonnal, majd a képződött diketonból aldol-kondenzációval próbálták meg kialakítani a homoergolén-vázat. Az elvégzett számos kísérlet ellenére ez a munka nem járt eredménnyel. A kívánt héttagú homológot végül is a dehidroergolén-vázra történő karbénaddícióval állították elő. Ezen eljárás segítségével alakították ki a D-gyűrűben 7 szénatomot tartalmazó D-homo-ergolinvázat. A módszer hasznosításával előállítottak néhány,

a 9,10-kettőskötés helyére beépített ciklopropánnal kondenzált ergolin analogont. A cikloklavin első szintézisét publikálták 2008-ban a Tetrahedron c. folyóiratban.

Tovább vizsgálták a dialkilaminometil-indol-2-karbonsavészterek sajátos viselkedését, amikor is a dialkilaminocsoport igen enyhe körülmények mellett klórmetil-csoportra cserélhető.

Indolból és 5-szubsztituált (NO₂, Cl) indolból kiindulva indolvázias 1,3-propándiolokat, indol-3-(2-hidroximetil-propán-1-ol)-származékokat állítottak elő. A BME Szerves Kémiai és Technológiai Tanszékével együttműködve, elvégezték ezen optikailag inaktív diolok enzimkatalizált enantioszelektív acilezését.

Kutatói ráfordítás: 4,2 fő, ebből intézeti állományban: 4,2 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 30 M Ft, ebből pályázati forrás: -.

Nukleotidkémiai kutatások

Új, 5-szubsztituált-pirimidin peptid-nukleinsav (PNS) építőegységek előállítását célzó munkájuk során, az uracil analogonok szintézisét követően, kísérleteket végeztek a megfelelő 5-szubsztituált-citozin PNS monomerek oldatfázisú szintézisére. Megállapították, hogy az alacsony hozamok miatt az U→C átalakítást inkább szilárd fázison célszerű végrehajtani az oligomerszintézis után. Az 5-aril-, ill. 5-alkinil-uracil bázisokat tartalmazó peptid-nukleinsavak, erős és szelektív hibridizációs tulajdonságuk folytán, elsősorban analitikai célra, géndiagnosztikai szerekként (pl. PNS mikrochipekben) alkalmazhatók különféle kórokozók kimutatására.

L-arabinózból kiindulva lineáris szintézis-stratégia alkalmazásával, három lépésben szintetizálták az N1-(béta-L-arabinofuranozil)-uracilt mint kulcsintermediert, amiből kiindulva, ortogonális cukor-védőcsoportok alkalmazásával, számos új 2'-, ill. 3'-módosított L-ribo- és L-arabino-nukleozid szintézise valósítható meg. A cukor-, ill. bázisrészben módosított L-nukleozidok között több jelentős antivirális aktivitással rendelkező analogon található. Ezeknek a vegyületeknek, nagyobb metabolikus stabilitásuk és kisebb toxicitásuk miatt, jobb a terápiás indexük, mint a természetes D-nukleozidoknak. Így a tervezett új származékok is ígéretes potenciális antivirális szereknek tekinthetők.

Kutatói ráfordítás: 3 fő, ebből intézeti állományban: 3 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 24 MFt, ebből pályázati forrás: -.

Biológiai kémiai kutatások

A világ éves gyógyszerforgalmának jelentős hányada peptid típusú gyógyszerek eladásából származik. A peptidek gyógyszerként történő használatát azonban számos kedvezőtlen fizikai-kémiai tulajdonságuk korlátozza. A peptidek hidrolitikus stabilitása általában kicsi (gyors a metabolizmus és a szervezetből történő kiürülés), emiatt orális alkalmazhatóságuk limitált. A peptidek célhelyre történő eljutását a sejtmembránon keresztül történő transzportjuk szintén nehezíti. A felsorolt hátrányok leküzdésének egyik módja szénhidrát egységeknek a peptidláncba történő beépítése, ami megnöveli a peptidek *in vivo* élettartamát. A hidrolitikus stabilitás tovább növelhető C-glikozidok alkalmazásával. A C-glikozidos kötést tartalmazó glikopeptidek kémiai és enzimatisz stabilitása jelentősen meghaladja az O-glikozidokét. A kutatócsoport alfa- és béta-glikozilnitriletet, majd e vegyületekből módosított Strecker-szintézissel glikoaminonitriletet állított elő. Ezekből a glikoaminosavak hidrolízissel és védőcsoport-eltávolítással érhetők el.

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

Biokémiai-farmakológiai kutatások

2008. évben folytatták az ABC transzportereken (ABCC2/3; ABCB11) lejátszódó gyógyszer-interakciók vizsgálatát humán és patkány hepatocita szendvicskultúrában, kibővítve az ABCG2-vel. Kidolgoztak egy szkrínelésre alkalmas módszert, amely fejlesztés alatt álló potenciális gyógyszermolekulák várható *in vivo* interakcióját jelzi a vizsgált transzporter a fejlesztés korai szakaszában, és segít a vezérmolekula kiválasztásában. A módszer szendvicskultúrában tartott humán és patkány hepatocitákon teszteli a kérdéses transzporter specifikus szubsztrátjai eliminációjának változását a tesztanyag hatására. A módszer lehetővé teszi a bazolaterális és kanalikuláris transzporterek működésének egyidejű és egymástól független vizsgálatát. Az epébe történő kiválasztásban kiemelkedő jelentőségű ABCC2 és ABCB11 transzporterekre vonatkozó patkány hepatocita szendvicskultúra-vizsgálatok eredményeit több modellvegyület alkalmazásával sikeresen validálták *in vivo* patkánykísérletek segítségével. Ezek a tapasztalatok megerősítik a humán májsejteket alkalmazó módszer prediktív voltát az ember esetében.

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

Gyógyszer-kölcsönhatások kutatása

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

Kutatói ráfordítás: 7 fő, ebből intézeti állományban: 4 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 15 M Ft, ebből pályázati forrás: - M Ft.

Molekuláris farmakológiai kutatások

Indukált CD-spektrumok vizsgálatából megállapították, hogy a biliverdin és dimetil észtere erősen kötődnek az AAG F1/S genetikai variánsához. Kiszámították a kötődési paramétereket, azonosították a kötőhelyet.

Elsőként írták le nagyméretű szerves aranykomplex AAG-kötődését, jellemezve a kötődéssel járó optikai spektroszkópiai változásokat. Kiszámították a kötődési paramétereket, azonosították a kötőhelyet. A kötődés tényéből kiindulva új AAG homológiamodellt állítottak elő. Kimutatták, hogy AGP F1-S genetikai variánsán a deramciklán és annak enantiomerje eltérő kötődési interakciót mutat dikumarol antikoagulánsal.

Kidolgoztak egy kapilláris izoelektromos-fókuszálás metodikát az AGP genetikai variánsainak kimutatására.

Meghatározták a warfarin enantiomerek és ciklodextrin-származékok közötti kötődési állandókat az optimális elválasztás körülményei között. A kapilláris elektroforézis vizsgálatok

eredményei alapján új, hatékony királis állófázist fejlesztettek ki, HPLC technikával tesztelték a kereskedelmi forgalomba kerülő új oszlop elválasztóképességét.

Kutatói ráfordítás: 4,5 fő, ebből intézeti állományban: 4,5 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 14 MFt, ebből pályázati forrás: 8 MFt.

Neurokémiai kutatások

Transzport-célfehérjék által szabályozott idegi folyamatok mechanizmusának jobb megértése céljából modellezték a gliális gamma-aminovajsav (GABA) transzporter altípusok (hGAT-2 és hGAT-3) GABA transzport mechanizmusának egyes lépéseit. Elektrofiziológiai módszerek alkalmazásával kimutatták a gliális glutaminsav (Glu) és a GABA-transzporterek aktiválásának hatására bekövetkező Glu-GABA cserefolyamat funkcionális hatását agyszeletben. Konfokális lézer-fluoreszcencia technika alkalmazásával észlelték és jellemezték az intercelluláris connexin-csatornákon keresztül bekövetkező kalciumion-hullám keletkezését agyszeletben.

Kutatói ráfordítás: 4 fő, ebből intézeti állományban: 4 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 32 MFt, ebből pályázati forrás: 14 MFt.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Hazai kapcsolatok

Az MTA-kutatóhelyekkel és a felsőoktatási intézményekkel igen széles körű együttműködésekkel folytatnak, ezek mind az oktatás, mind a kutatás területére kiterjednek.

Az oktatómunkában való intenzív részvételüket mutatja, hogy az intézet 8 kutatója rendszeresen végez oktatási tevékenységet az ELTE-n, ill. a Semmelweis Egyetemen. Az egyetemi kutatókkal összesen 15 közös publikációt jelentettek meg. A hazai kutatóhelyekkel folytatott együttműködések jelentős részben pályázatokhoz is kapcsolódnak. 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 további molekuláris jelzőket állítottak elő.

Az MTA SzBK Enzimológiai Intézetével három különböző témában folytatnak eredményes kutatásokat: DNS metilezésének tanulmányozása, K-vitaminok meghatározása vérből, hibaként előforduló uracil kimutatása DNS-ből.

A Semmelweis Egyetem Transzplantációs és Sebészeti Klinikájával kialakított együttműködés keretében rendszeresen vizsgálják a transzplantációra kerülő (donor) máj gyógyszerlebontó (méregtelenítő) képességét, és közösen kialakítják a transzplantáción átesett betegek egyéni gyógyszeres terápiáját. Eddig öt közös publikációt jelentettek meg az együttműködés eredményeiről.

A „Humán Agyminta Bank” c. téma keretében (partner: Semmelweis Egyetem) megállapították, hogy a borostyánkősav specifikusan kötődik a humán *nucleus accumbens* agymintákból izolált szinaptikus membránfrakcióban.

A Szent István Egyetem Kémiai Intézetével a „(Nor)tropein(di)észterek és a glicin receptorhoz való kötődés vizsgálata” c. témában közös OTKA-pályázaton dolgoznak. Eddig egy közös publikációt jelentettek meg.

A Szent István Egyetemmel folytatott együttműködési témában („Idegi szubcelluláris frakciók elektronmikroszkópiája”) patkányagykéregből izolált szinaptikus membránfrakciót jellemeztek.

A Pannon Egyetem, Veszprém kutatóival közösen 6-merkaptohexil-2-(3,5-dinitrobenzamido)propanoát izotioronium só köztiterméken keresztül történő előállítására új eljárást dolgoztak ki.

A Solvo Biotechnology, Szeged céggel együttműködésben növényvédőszeres kölcsönhatását vizsgálták humán efflux transzporter (MDR1 (P-gp), MRP1, MRP2 és BCRP) fehérjékkel. Megállapították, hogy a klóracetanilid herbicidek az MDR1 szubsztrátjai, és e vegyületek 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 transzportervizsgálatok hatékony eszközök lehetnek az újonnan kifejlesztett növényvédőszeres használatával járó kockázati tényezők előrejelzésében. A témából egy közlemény jelent meg a Toxicology c. folyóiratban.

A Servier Kutatóintézettel (Budapest) folytatott együttműködés eredményeként 2008-ban közös publikációt jelentettek meg.

Nemzetközi kapcsolatok

Az intézet számos külföldi kutatóhellyel folytat tudományos együttműködést. 2008-ban összesen 28 fő külföldi tanulmányúton, ebből MTA-kétoldalú egyezményes keretben egy fő vett részt. Nemzetközi konferencián 24 előadást és 28 poszter-előadást tartottak.

A “Synthesis and receptor binding of new thieno[2,3-d]pyrimidines as selective ligands of 5-HT₃ receptors” c. együttműködési téma (együttműködő partnerintézmények: Dipartimento di Scienze Farmaceutiche, Università di Catania; Istituto di Ricerche Farmacologiche "Mario Negri", Milano; Department of Pharmacodynamics and Biopharmacy, University of Szeged; Institute of Pharmaceutical Chemistry, University of Szeged) eredményeiről 2008-ban közös publikációban számoltak be.

A „Hyperplexia mutation R271L of alpha₁-glycine receptors and [³H]strychnine binding” c. téma kutatásai (együttműködő partnerintézmény: Department of Neurochemistry, Max-Planck-Institute for Brain Research, Frankfurt) 2008-ban egy közös publikációt eredményeztek.

A „Nukleozid analogonok szintézise és antivirális hatásuk vizsgálata” c. témában (együttműködő partner: Rega Institute for Medical Research, Katholieke Universiteit Leuven, Belgium) 2008-ban 35 nukleozid származékot állítottak elő. A vegyületek közül az egyik jelentős aktivitást mutatott HSV-1, HSV-2, ill. vaccinia vírusok ellen.

A „Reversal of Multi Drug Resistance” c. témában, EU-program keretében három külföldi egyetemmel (University of Lisbon, University of Reims, University of Marseille) folytattak közös kutatásokat.

A School of Pharmacy, University of London kutatóival „Szénhidrát-módosított peptidek kutatása” c. témában dolgoztak együtt.

Számos, potenciálisan gyógyszerhatóanyagként alkalmazható vegyületet szintetizáltak a Nycomed Deutschland GmbH (Konstanz, Németország) gyógyszergyár részére.

Az elmúlt évben megbízásos szerződés keretében jelentős volumenű szintetikus munkát végeztek a Sigma-Aldrich (Steinheim, Németország) cég számára.

Célzott biológiai vizsgálatok érdekében, számos vegyületet és különböző származékokat szintetizáltak a Bayer CropScience Co. (Frankfurt, Németország) és a Dupont Co. (USA) részére.

Kutatási együttműködést indítottak a Biopredic International biotechnológiai céggel, aminek a keretében azt vizsgálják, hogy helyettesíthetőek-e HepaRG humán májsejtekkel a primer hepatociták gyógyszerinterakciós vizsgálatokban.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

Hazai pályázatok

Új, géntranszferációs ágensek kifejlesztésére végzett vizsgálataikat az NKTH-által támogatott konzorcium keretében, több partnerrel (Genetic Immunity Kft., Szegedi Tudományegyetem Bőr és Allergológiai Klinika, Kémiai Kutatóközpont Anyag és Környezetkémiai Intézet Polimerkémiai osztálya) együttműködésben végezték.

Az MTA SZBK Enzimológiai Intézetének kutatóival 2008-ban közös NKTH-OTKA pályázatot nyújtottak be „Intracellular phosphorylation of nucleoside based anti-HIV drugs as a tool of inhibition of HIV reverse transcriptase” címmel.

Az „Új, gazdaságos elválasztási módszerek fejlesztése biztonságos élelmiszerkiegészítők előállítására hazai természetű gyógynövényekből” c. Jedlik Ányos Program keretében elvégzett vizsgálatok eredményei alapján új, hatékony királis HPLC állófázist fejlesztettek ki, ami rövidesen kereskedelmi forgalomba kerül. Együttműködő partnerintézmények: Gradiens Termékfejlesztő Kft., CycloLab Kft., Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Delta Informatika Zrt.

A közös kutatási eredményekről három publikációban számoltak be.

Az „Új, gazdaságos elválasztási módszerek fejlesztése biztonságos élelmiszerkiegészítők előállítására hazai termesztésű gyógynövényekből” c. Jedlik Ányos Program keretében 2008-ban a ciklodextrin származékok és a kumarin vegyületek közötti kölcsönhatás kapilláris elektroforézissel történő vizsgálatának eredményei alapján új, hatékony királis állófázist fejlesztettek ki, HPLC-technikával tesztelték a kereskedelmi forgalomba kerülő új oszlop elválasztóképességét.

A „Kardioprotektív nano-formulációk karotinoidok in silico módszerekkel segített molekuláris kapszulázása útján” c. Jedlik Ányos pályázati téma keretében 2008-ban számos új, vízoldható karotinoid-ciklodextrin komplex antioxidáns és stabilitás vizsgálatát végezték el, és tanulmányozták a komplexek aggregációs sajátságait.

A „Biológiailag jelentős nem-kovalens kölcsönhatások vizsgálata: fehérje-kötődés, nukleinsav-kötődés, önszerveződés” c. OTKA-pályázat keretében 2008-ban cirkuláris dikroizmus, abszorpció, fluoreszcencia spektroszkópiás és kromatográfiás módszerek alkalmazásával kimutatták és jellemezték gyógyszerek, epepigmentek és egy szerves aranykomplex emberi szérum alfa1-savanyú glikoprotein (AAG), valamint albumin kötődését. Új analitikai módszert dolgoztak ki humán AGP-variánsok vizsgálatára.

A Richter Gedeon Nyrt. által 2008. tavaszán “Gyógyszercélpont felfedezésére, azonosítására, validálására szolgáló kutatási javaslat és megvalósítási terv kidolgozása” tárgyban meghirdetett Richter Témapályázaton a “Design and Discovery of New Anxiolytics Acting via Astroglial Glutamate and GABA Transporters” címmel benyújtott pályázatukat a cég támogatásra érdemesnek ítélte.

2008. folyamán „Központi Fehérjeexpressziós Laboratórium” kiépítése kezdődött el azzal a céllal, hogy szerkezeti és biokémiai vizsgálatok kivitelezéséhez szükséges mennyiségű fehérjét bioszintetikus úton előállítsanak, majd izoláljanak és tisztítsanak. A beruházás első fázisában a 25 MFt értékű kutatóközponti beruházási támogatással beszerzett berendezések lehetővé teszik rekombináns fehérjék kész expressziós vektorokkal történő kifejezését *E. coli* sejtekben. A fehérjék izolálásához és tisztításához szükséges második fázis megindításának a támogatására benyújtott pályázatot (22,8 MFt értékben) az MTA Elnöke támogatásra érdemesnek ítélte.

Nemzetközi pályázatok

A STEROLTALK EU FP-6 program keretében 10 partner (7 ország) részvételével egy olyan tesztrendszer dolgoznak ki, amely alkalmas a vér koleszterinszintjét csökkentő gyógyszerek hatásának tanulmányozására és új gyógyszerjelölt vegyületek kiválasztására. A program elsődleges célkitűzése a gyógyszerhatásra bekövetkező koleszterinhomeosztázis-változások meghatározása transzkriptom, proteom és szterol-metabolom szinten.

Együttműködő partnerintézmények: Universitaet des Saarlandes, Saarbrücken; University of Ljubljana; CNRS, Centre de Génétique Moléculaire, Gif-sur-Yvette; Swansea Clinical School, University of Wales Swansea; Karolinska Institutet, Huddinge University Hospital, Stockholm; Biozentrum, University of Basel; INSERM UMR, Montpellier; Lek Pharmaceuticals, Ljubljana; CREA, Ljubljana.

A program keretében a vér koleszterinszintjét csökkentő gyógyszerek hatását tanulmányozták, az új gyógyszerjelölt vegyületek gyógyszerinterakciós sajátosságait és a koleszterin-homeosztázis-változásokat poszt-genomiális szinten értékelték.

A programban résztvevő kutatók eddig 18 közös publikációt jelentettek meg.

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

1. Tatai J, Fügedi P: Synthesis of the putative minimal FGF binding motif heparan sulfate trisaccharides by an orthogonal protecting group strategy, *TETRAHEDRON* 64(42): 9865-9873 (2008)
2. Lengyel Gy, Veres Zs, Tugyi R, Vereczkey L, Molnár T, Glavinas H, Krajcsi P, Jemnitz K: Modulation of sinusoidal and canalicular elimination of bilirubin-glucuronides by rifampicin and other cholestatic drugs in a sandwich culture of rat hepatocytes, *HEPATOLOGY RESEARCH* 38(3): 300-309 (2008)
3. Zsila F, Visy J, Mády Gy, Fitos I: Selective plasma protein binding of antimalarial drugs to alpha(1)-acid glycoprotein, *BIOORGANIC AND MEDICINAL CHEMISTRY* 16(7): 3759-3772 (2008)
4. Incze M, Dörnyei G, Moldvai I, Major E, Egyed O, Szántay Cs: New routes to clavine-type ergot alkaloids. Part 2: Synthesis of the last, so far not yet synthesized member of the clavine alkaloid family, (+/-)-cycloclavine, *TETRAHEDRON* 64(13): 2924-2929 (2008)
5. Filák L, Rokob TA, Vaskó GyÁ, Egyed O, Gömöry Á, Riedl Zs, Hajós Gy: A new cyclization to fused pyrazoles tunable for pericyclic or pseudopericyclic route: An experimental and theoretical study, *JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY* 73(10): 3900-3906 (2008)
6. Molnár T, Barabás P, Héja L, Kútiné-Fekete E, Lasztóczi B, Szabó P, Nyitrai G, Simon-Trompler E, Hajós F, Palkovits M, Kardos J: Gamma-hydroxybutyrate binds to the synaptic site recognizing succinate monocarboxylate: A new hypothesis on astrocyte-neuron interaction via the protonation of succinate, *JOURNAL OF NEUROSCIENCE RESEARCH* 86(7): 1566-1576 (2008)

VI. A kutatóhely 2008. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA Kémiai Kutatóközpont, Biomolekuláris Kémiai Intézet

| | | | |
|---|--------------------------------|---|---------------|
| Átlagléttség ¹ : 97 | Ebből kutató ² : 57 | | |
| PhD, kandidátus: 27 | MTA doktora: 6 | levelező tag: - | rendes tag: - |
| 35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma: 26 | | | |
| Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma ³ : 51 | | | |
| Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ⁴ : 51 | | | |
| <i>Ebből</i> impakt faktoros publikáció magyarul: - | | idegen nyelven: 36 | |
| nemzetközi együttműködés keretében: 13 | | SCI által regisztrált folyóiratban: 36 | |
| összesített impakt faktor ⁵ : 99,001 | | összes hivatkozás száma ⁶ : 842 | |
| összes hivatkozás száma önidézetek nélkül: 578 | | | |
| <i>Magyarul</i> könyv/monográfia ⁷ : - | könyvfejezet: - | jegyzet: - | |
| <i>Idegen</i> nyelven könyv: - | könyvfejezet: 9 | jegyzet: - | |
| Tud. fokozat megszerzése ⁸ : PhD: 2 | MTA doktora: - | levelező tag: - | rendes tag: - |
| Elfogadott találmányok, szabadalmak száma ⁹ : - | | | |
| Értékesített szabadalmak száma: - | | | |
| Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma ¹⁰ : 24 | | | |
| poszterek száma: 28 | | | |
| Tanácsadói tevékenységek száma ¹¹ : - | | | |
| Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 3 | | Nemzetközi folyóirat szerk. tagság: - | |
| Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹² : 8 | | | |
| Ebből doktori iskolákban oktatók száma: 3 | | Doktori iskolát vezetőik száma: - | |
| Elméleti kurzusok száma ¹³ : 10 | | Gyakorlati kurzusok száma: 1 | |
| TDK munkát készítő hallgatók száma: 1 | | Diplomamunkát: 3 | |
| Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma ¹⁴ : 274 | | PhD-t: 25 | |
| Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ : | | 475,0 | MFt |
| Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁶ : 5 | | Teljes saját bevétel: | 150,0 MFt |
| Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel ¹⁷ : | | - | MFt |
| Az év folyamán művelt OTKA témák száma: 8 | | | |
| A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: | | | 19,1 MFt |
| Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma ¹⁸ : 5 | | | |
| NKFP: 5 | | A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: 54,2 MFt | |
| Egyéb: - | | A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: - MFt | |
| NFT témák száma ¹⁹ : - | | A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: MFt | |
| Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma ²⁰ : 2 | | | |
| EU forrásból: 2 | | A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: 7,3 MFt | |
| Egyéb: - | | A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: - MFt | |
| Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma: 30 | | | |
| A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: | | | 63,7 MFt |
| Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány ²¹ : | | | - MFt |

VI/a. Az MTA KK Biomolekuláris Kémiai Intézet 2008. évi tevékenységének egyéb bemutatható jellemzői

A Qualyst Inc. korábban szabadalmaztatta azt a hepatocita szendvicskultúra-eljárást, ami az intézet kutatási eredményeire épül. Ennek a módszernek a segítségével a máj működése sejtkultúrában modellezhető. Ennek révén lehetővé válik az egyes gyógyszerjelöltek transzporterfüggő viselkedésének (felszívódás, megoszlás, kiürülés) tanulmányozása. Az intézet kutatói a Solvo Biotechnológiai Zrt.-vel együttműködésben az eredeti szabadalmat meghaladó színvonalú technológiai fejlesztést vittek véghez. Ennek eredménye a Solvo és a Qualyst együttműködésében 2008-ban piacra dobott B-CLEAR® *májszendvics-kultúra kit* és vizsgálati szolgáltatás, amit Európában kizárólag a Solvo forgalmaz.

- Bejelentett szabadalmak, és egyéb szabadalmi jellegű alkotások száma: 3
 - a Magyarországon bejelentettek: 2
 - a nem Magyarországon bejelentettek: 1
- A kutató nők száma: 27
 - vezető beosztásokban: 2
 - nem vezető beosztásokban: 25
- A mobilitással kapcsolatban az intézetből az állásukat megtartott, munkaviszonyban levő diplomások közül hat hónapnál hosszabb időre távollevők száma: 2
 - Magyarországon
 - egyetemen, kutatóintézetekben
 - gazdasági társaságnál
 - Nem Magyarországon: 2
 - egyetemen, kutatóintézetekben: 2
 - gazdasági társaságnál
- az adott intézethez érkező kutatók száma: 4
 - 1-6 hónap időtartamra
 - Magyarországról
 - nem Magyarországról
 - 6 hónapnál hosszabb időre:
 - Magyarországról
 - nem Magyarországról: 4
- Vállalati kapcsolatok
 - jelentősebb ipari partnereik felsorolása és a kapcsolat típusa: pl. közös K+F, vagy kutatási megbízás, stb. teljesítése
K+F kutatási megbízás:
Solvo Kft., Teva Zrt., Richter G. Nyrt., Nycomed GmbH (Németország), Sigma-Aldrich GmbH (Németország), Alfa-Aesar Co. (Nagy Britannia)
 - az intézet holdudvarába tartozó kisvállalkozások száma: 5
Közös pályázatok:
Vichem Kft., Cyclolab Kft., Delta Informatika Kft., Gradiens Kft. Genetic Immunity Kft.
- A társadalmi párbeszéd eredményei:
 - Az általános tudománynépszerűsítő közlemények száma: 2
 - Az intézet tevékenységét népszerűsítő rendezvények száma: 2

Az MTA KK Biomolekuláris Kémiai Intézetének kiemelten sikeres kutatási területe 2008-ban

Új fázisjelölő módszer kifejlesztése

A szerves szintetikus kémiai gyakorlatban - ipari és laboratóriumi méretekben egyaránt - a sikeres reakció végrehajtása a szintézis első lépése csupán, amit a reakcióelegy feldolgozása követ. Ez a második folyamat – a reakciótermék tiszta állapotban történő kinyerése – gyakran komolyabb kihívást jelent mint maga a szintézis.

A probléma megoldásának kézenfekvő módja, ha a feldolgozás lehetőségét integrálják a molekulába, vagyis ún. fázisjelölő csoportokat építenek be a célmolekulába (ami leggyakrabban a katalizátor vagy a reagens). Ezen molekulaelem, amely akár egy szilárd hordozó vagy egy hidrofil, illetve hidrofób molekularészlet is lehet, nagymértékben befolyásolja a teljes molekula kromatográfiás, illetve egyéb fizikai-kémiai sajátosságait, s ezáltal annak egyszerű és olcsó elválasztását teszi lehetővé. Annak ellenére, hogy számos fázisjelölési technikát dolgoztak ki az elmúlt évtizedekben, azok mind a mai napig nem terjedtek el széleskörűen. Ennek egyik oka a fázisjelölt vegyületek magas ára, a másik oka pedig a fázisjelölés miatt módosult, gyakran csökkent reaktivitás.

Az MTA Kémiai Kutatóközpont Biomolekuláris Intézetében folyó kutatások célja egy olyan fázisjelölő módszer kifejlesztése volt, amely kiküszöböli az eddigi módszerek gyengéit, ugyanakkor azoknál lényegesen olcsóbb. A kutatók arra törekedtek, hogy iparjogi szempontból is új, szabadalommal védhető eljárást dolgozzanak ki. A kutatócsoport nem az eddigi gyakorlatnak megfelelő, nagyméretű fázisjelölő csoportokat alkalmazta, hanem a lehető legkisebbeket, mint például a trifluorometil-, illetve a tercier-butil-csoportokat. A kis méret ellenére, e csoportokat a célmolekulába beépítve, jelentősen növelhető a lipofilitás. Megfelelő tervezés után számos katalizátor, illetve reagens lipofil, minimálisan fázisjelölt származékát tudták előállítani olcsó, kereskedelmi forgalomban kapható molekuláris építőelemekből (pl. többek között az olcsó 3,5-bisztrifluorometil-brómbenzolból. Ezzel párhuzamosan megfigyelték, hogy a minimálisan fluorozott vagy tercier-butilezett vegyületek oldhatósága és megoszlási hányadosa sokkal érzékenyebben reagál a víz jelenlétére, mint a „normál”, a gyógyszeripari szintézisekben előállított szerves molekuláké. Gyakorlatilag annyira hidrofóbbá teszik e molekulaelemek a megjelölt molekulákat, hogy azok a közönséges szerves molekulákkal ellentétben már nem tudnak beoldódni a vizsgált vizes-szerves oldószerkegelybe (mint pl. metanol, dimetil-szulfoxid vagy acetonitril). Erre a megfigyelésre alapozva, új extrakciós eljárásokat fejlesztettek ki, amelyek mind laboratóriumi, mind ipari méretekben használhatók. Elsőként vezették be többek között a korundot, a jól ismert csiszolóipari alapanyagot, a szilárdfázisú extrakciós gyakorlatba. Ezáltal lehetővé vált a fázisjelölt komponensek (katalizátor, illetve reagens) szelektív adszorpcióval történő eltávolítása, ha a reakcióelegyet korundon szűrték át. Figyelembe véve az ipar igényeit, arra törekedtek, hogy olyan folyadék-folyadék extrakciós módszereket is kidolgozzanak, amelyek vizes-szerves oldószerkegelyek alkalmazására épülnek. A folyamatokhoz egy új, folyadékmembránnal ellátott, folyamatos üzemű extrakciós berendezést (ld. az ábrát) fejlesztettek ki. E könnyen méretnövelhető berendezés révén, jelentősen csökkenthető az extrakciós folyamatoknál alkalmazott oldószer mennyisége.



Folyamatos üzemű folyadék membrános extrakciós berendezés

A kutatócsoport által kidolgozott fázisjelöléses módszert sikerrel alkalmazták számos laboratóriumi és ipari, elsősorban gyógyszeripari szempontból jelentős kémiai eljárásra. Így például megoldották a katalizátor visszaforgatását a királis szekunder alkoholok szintézisekor (CBS-redukciós eljárás), valamint több fázisjelölt foszfint is előállítottak. E vegyületcsoport széleskörűen alkalmazható reagens, illetve komplexképző ligandum; sikerült megoldaniuk az aromás foszfin(oxid)ok, illetve foszfin-komplexek egyszerű és hatékony elválasztását a reakcióelegyből. A módszer alkalmazható a jól ismert Wittig- és a Mitsunobu-reakcióban is. Megoldották továbbá a keresztkapcsolásos reakciók katalizátorának a visszaforgatását.

Az intézet kutatóinak nem csupán olyan eljárást sikerült kifejleszteniük, amely olcsóbb, szintetikus szempontból egyszerűbb, mint a korábban alkalmazott módszerek, hanem környezetvédelmi szempontok alapján is kifejezetten előnyös. A munka eredményei két nemzetközi szabadalom beadását és egy „spin off” vállalkozás elindítását tették lehetővé.

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

A Nanokémiai és Katalízis Intézet fő kutatási feladata 2008-ban nemzetközi színvonalú tudományos kutatások folytatása volt a nanokémia és a katalíziskutatás területén, különös tekintettel a határfelületekre, az aszimmetrikus katalízisre, a nanodimenziójú részecskékre és szerkezetekre.

A 2008. évi kutatási feladatokon belül nagyobb hangsúlyt kaptak a fém nanorészecske/hordozó határfelületek szerkezetének, adszorpciós tulajdonságainak megismerését célzó kutatások, a felületek fizikai és kémiai módszerekkel végzett funkcionálizálása és spektroszkópiai jellemzése.

Kiemelt figyelmet fordítottak azokra a heterogén katalitikus kutatásokra és fejlesztésekre, melyek az energiaforrások, ezen belül a megújuló energiaforrások hatékonyabb hasznosításának megoldásaira vonatkoznak. Katalitikus vizsgálataikkal hozzá kívántak járulni a környezetvédelmi szempontból alapvető jelentőségű “zöld” kémiai eljárások, valamint a környezetkárosító emissziók ártalmatlanítását célzó eljárások tudományos megalapozásához.

Az intézet feladata, hogy részt vegyen az egyetemi és a posztgraduális képzésben, valamint tanácsadással és gyakorlati kutatási-fejlesztési feladatok elvégzésével segítse a vállalkozásokat szakmai problémáik megoldásában.

Tudományos céljait, gazdálkodását, nemzetközi és vállalati kapcsolatait tekintve egyaránt fontos, hogy az intézet hazai és európai kutatási pályázatokban vegyen részt és a támogatott pályázatokban vállalt feladatait magas színvonalon teljesítse.

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

A nanoméretből (1-100 nm) következő, sajátos anyagi tulajdonságok elsődlegesen határfelületi tulajdonságként nyilvánulnak meg. Az intézeti kutatási eredményeket a rokon területeken, ill. együttműködésben kifejtett tevékenység miatt előnyösen három tematikai főcsoportba gyűjtve lehet bemutatni. Ezek a „*Határfelületi kémia*”, a „*Katalízis és felületkémia*”, mely utóbbi terület a határfelületi jelenségek egy önkényesen elkülönített csoportja, valamint az „*Új tulajdonságú anyagok*” témacsoport. A területek, a számos átfedés mellett, egymást kiegészítve szorosan kapcsolódnak egymáshoz.

A határfelületi kémiai kutatások lényegében új korrózióvédelmi és gyógyászati alkalmazások tudományos megalapozását célozták.

A katalízis területen több energiavonatkozású téma indult vagy folytatódott, így, a bio-motorhajtó-anyagok előállításának kutatása, továbbá a tüzelőanyag cella elektrokatalizátor, a

hidrogénelőállítás és -tisztítás kutatása. Ezek a munkák még kezdeti szakaszban vannak, de a következő években várható a témák felfutása.

A beszámoló foglalkozik a rendezett és egységes mikro és mezopórusos szerkezetű fém-oxidok (szilikátok és metalloszilikátok), valamint a különleges elektromos és mágneses tulajdonságú anyagok kutatása területén elért eredményekkel.

Az egyes témacsoportokba további kutatások is tartoznak, amit az intézet hazai vagy nemzetközi résztvevők konzorciumában, európai uniós vagy hazai támogatású kutatási-fejlesztési projektek keretében végez.

Határfelületi kémia

Korrózióvédelem

Nanorétegeket és nanoszerkezetű anyagokat, kompozitokat állítottak elő, ill. módosítottak. Meghatározták az anyagok szerkezetét és vizsgálták korróziógátló hatékonyságukat. Megállapították, hogy az új, korróziógátló anyagokkal és bevonatképző eljárásokkal környezetbarát, hatékony és gazdaságos korrózióvédelem valósítható meg.

A nanorétegek (Langmuir-Blodgett film, önszerveződött molekuláris rétegek) kutatása és alkalmazása lehetővé tette, hogy egyetlen molekuláris vastagságú felületi réteggel megátolják mind a kémiai, mind a mikrobiológiai korróziót.

Új, amorf szerkezetű, ferromágneses galvánbevonatokat állítottak elő és jellemeztek ^{57}Fe és ^{119}Sn Mössbauer-, röntgendiffraktometriai, elektrokémiai és egyéb mérésekkel. Az Sn-Co-Fe ötvözetbevonatokra összefüggést találtak a korrózióállóság és az előállításnál alkalmazott elektrolit áramoltatás sebessége, valamint a fázisösszetétel között. Az ötvözetek nemcsak korrózióálló bevonatként, hanem akkumulátorok elektródjaiként is gazdaságosan alkalmazhatók lehetnek.

Gyógyászati nanokémia

Aminosavak oldat/szilárd határfelületen lejátszódó adszorpcióját jellemezték összegfrekvencia-keltési spektroszkópiával (SFG) hidrophil TiO_2 , SiO_2 és CaF_2 felületeken. Az eredmények hozzájárulhatnak a titán-dioxid biokompatibilitásának molekuláris szintű értelmezéséhez, ezáltal közvetetten segíthetik az eddigieknél előnyösebb tulajdonságú implantátumanyagok kifejlesztését.

Daganatellenes hatóanyag csomagolására és irányított célbajuttatására liposzómás rendszereket állítottak elő és minősítettek. A liposzómák méreteloszlását fényszórással, termikus sajátságait nagyérzékenységű kalorimetriával mérték. Megállapították, hogy a kiindulási foszfolipid-víz liposzómák (teljesen hidratált dipalmitoil-lecitin/víz rendszer) multilamellás formája a végső állapotban, azaz a szükséges, biológiailag aktív komponenseket tartalmazva, zömében unilamellás rendszerré alakul.

Gyógyszeripari tablettákon pozitronannihilációs spektroszkópiai mérésekkel megállapították, hogy összefüggés van a hordozó szabadterefogatának változása és a tablettá hatóanyag-kibocsátási tulajdonságai között. Pontos szabadterefogat-eloszlásokat határoztak meg különböző hordozókra.

Kutatói ráfordítás: 15 fő, ebből intézeti állományban: 13 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 69 MFt, ebből pályázati forrás: 60 MFt.

Katalízis és felületkémia

Hidrogénelőállítás, -tisztítás, tüzelőanyag-cella

Új, aktív, hordozós platinakatalizátorokat állítottak elő a platina nano-környezetének szabályozásával. Az irányított felületi reakciók módszerét – melynek kidolgozása korábbi intézeti eredmény – alkalmazták alumínium-oxid és szilícium-dioxid hordozós ón-platina, kétfémes katalizátorok előállítására. Bizonyították, hogy a katalizátorokban, még magas óntartalom mellett is, az ón szelektíven, a platina nanorészecskéken képez ón-multiréteget. A módszert sikerült kiterjeszteni germánium módosítóra, valamint aktív-szén-hordozós platina-katalizátorokra is. Sikerült olyan szénhordozós ón/platina elektrokatalizátort előállítani, melynek alkalmazása a Polimer Elektrolit Membrán (PEM) típusú tüzelőanyag-cellában bizonyult ígéretesnek. Új eredmény a felületi fémorganikus kémia sikeres alkalmazása aktív-szén hordozón.

Többkomponensű katalizátorokat terveztek az etanol vízgőzös reformálásán alapuló hidrogéntermelésre a kombinatorikus módszer alkalmazásával. A kifejlesztett katalizátorokon 50 %-os hidrogénhozamot értek el.

A szén-monoxid alacsony hőmérsékletű, szelektív, preferenciális oxidációjának nagy a jelentősége a nagytisztaságú hidrogén előállításában, ami a PEM-típusú tüzelőanyag-cella működéséhez szükséges. Az utóbbi időben megkülönböztetett figyelem irányul a reakcióban aktív arany nanokatalizátorokra.

A kombinatorikus módszer alkalmazásával a CO oxigénes oxidációjához V, Sm és Pb tartalmú, hordozós aranykatalizátort fejlesztettek. XPS-vizsgálatokkal bizonyították, hogy a Pb ötvözetet képez az arannyal, míg a többi komponens oxid formában módosítja az arany nanokörnyezetét. A katalizátoron jó szelektivitással szén-monoxidtól mentes hidrogént állítottak elő.

Új módszer dolgoztak ki arany nanorészecskék stabilizálására és a részecske méretének szabályozására szilikagél- és alumínium-oxid hordozón. *In situ* Mössbauer-spektroszkópiával vizsgálták az Au/SnO_x-Al₂O₃ katalizátorok szerkezetét. Kimutatták, hogy a szén-monoxid alacsony hőmérsékletű oxidációs reakciójában az ón promoveálja a hordozós aranykatalizátort.

Aranyhordozón vas-oxid réteget alakítottak ki. Ezt az úgynevezett „inverz” modellkatalizátort XPS és SFG mérések együttes, *in situ* alkalmazásával vizsgálták az arany/átmenetifém-oxid CO oxidációs katalizátorok működési mechanizmusának jobb megértéséhez. Megállapították, hogy a CO a vékony (2 nm-es) vas-oxid rétegen, kemisorbeálódik, de a vastagabb (8-10 nm-es) rétegen már nincs kimutatható CO adszorpció.

Vizsgálatokat végeztek az aktív arany nanokatalizátorok szerkezeti stabilitásának növelésére. Elektron- foton- és ion spektroszkópiával (AES, XPS, LEIS, RAIRS), valamint STM-mel tanulmányozták az arany nanoszerkezetek képződését és sajátságait egykristály titán-dioxid felületen. Az arany mellé Mo-t vagy Rh-t adszorbeáltattak. A Mo adatom elősegítette az arany nanoklaszterek disztrpcióját és hőstabilitását. A Rh adatom, amellet, hogy az arany szemcséket nanoméretben stabilizálta, megnövelte az egyes nanoklaszterek térfogatát.

Figyelemre méltóak a Mo₂C katalitikus és felületi sajátságainak vizsgálatában elért újabb eredmények. A szénhordozó felületén létrehozott Mo₂C nanorészecskék a nemesfémeknél katalitikusan aktívabb és stabilisabb felületi fázisnak bizonyultak hidrogénelőállításban etanolból, metanolból, illetve dimetil-éterből. Elektron-spektroszkópiai módszerekkel

feltárták a $\text{Mo}_2\text{C}/\text{Mo}(100)$ felületen lejátszódó reakciók primér lépéseit és a felületen képződő gyökök átalakulásának irányát.

Nitrogen-oxidok szelektív katalitikus redukálása

A nitrogen-oxid szelektív katalitikus redukálásának mechanizmusát tanulmányozták metánnal, nagy oxigéntartalmú gázelegyenben nitrogénné, indiumot, illetve indiumot és palládiumot tartalmazó zeolitkatalizátorokon. Pontosították a zeolitok és az In_2O_3 között lejátszódó ún. redukzív, szilárd fázisú ioncsere-folyamat mechanizmusát. Megállapították, hogy az a szelektívebb In-zeolit katalizátor, melynek In redoxi-centrumai lényegesen könnyebben oxidálhatók nitrogén-monoxiddal mint oxigénnel.

Fotokatalitikus oxidáció

Titántartalmú MCM-41 típusú mezopórusos szilícium-dioxid anyagokat állítottak elő hidrotermális és szol-gél típusú szintézissel, valamint MCM-41 szintézissel és impregnálással. Az anyagokat katalizátorként használták víz 2,4,6-triklór-fenol szennyezőjének fotokatalitikus oxidatív lebontásában. Valószínűsítették, hogy a katalizátorok aktivitásban megnyilvánuló különbözősége a titán diszperzitás különbözőségéből következik és az elektron-elektron lyuk rekombináció sebességével lehet kapcsolatban.

Aszimmetrikus katalízis

A királis indukció, illetve a szubsztrátum-specifikusság eredetének leírására korábban kidolgozták az úgynevezett "árnyékoló hatás modellt" ("Shielding Effect Model"). A modell lényege a reakcióba lépő prokirális molekula és a királis módosító között a folyadékfázisban végbemenő *komplekképződés*. A cinkonidin - $\text{Pt}/\text{Al}_2\text{O}_3$ heterogén katalitikus rendszereket nem csak a magas optikai (> 90%) hozam, hanem a királis templát hatására fellépő sebességnövekedés is jellemzi. A sebességnövekedés eredetét magyarázó újabb elképzelésekben a cinkona alkaloid szerepe mindössze a katalitikusan aktív fém mérgeződésének megakadályozása. Bizonyították, hogy a jelenség ennél összetettebb, kialakulásához a szubsztrátum-módosító kölcsönhatások is hozzájárulnak. Az optikai hozam és reakciósebesség növekedéséről kimutatták, hogy az a cinkonidin dimer-monomer egyensúly eltolódásával hozható összefüggésbe.

Kutatói ráfordítás: 17 fő, ebből intézeti állományban: 15 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 76 MFt, ebből pályázati ráfordítás: 5,2 MFt.

Új tulajdonságú anyagok

Rámutattak, hogy a számítástechnikában alkalmazható, kolosszális mágneses ellenállású $\text{La}_{0,8}\text{Sr}_{0,2}\text{Co}_{1-x}\text{Fe}_x\text{O}_3$ ($x = 0 - 0,3$) perovszkitok fajlagos elektromos ellenállásának és mágneses ellenállásának hőmérsékletfüggése azt az elképzelést támasztja alá, hogy ezen anyagok olyan granuláris szerkezettel bírnak, amelyben a nanoméretű fémes, és egyben ferromágneses, tartományokat szigetelő tartományok választják el egymástól.

Elsőként sikerült kimutatniuk az α -vas részleges amorfizációját kisenergiájú nehézion besugárzás (ionimplantáció) hatására. Vasfelületre 14 nm vastagságú ^{57}Fe -réteget párologtattak. Konverziós elektron Mössbauer-mérések eredményeivel bizonyították, hogy 80 keV energiájú Ar-ionokkal történő bombázás hatására az ^{57}Fe -rétegben 15%-ban amorf vas keletkezik.

A Fe(III)-ion szerkezetét vizsgálták erősen bázikus ($\text{pH} > 13$), túltelített NaOH vizes oldatában Mössbauer-spektroszkópia, EXAFS, XANES és UV-spektroszkópia segítségével. Az oldatban megjelenő mikrokristályok új, eddig még nem azonosított fázist képeztek. Megállapították, hogy a Fe(III) a komplex sóban oktaéderez, míg az oldatban tetraéderez koordinációban van.

Vas-ftalocianinok pirolízisével szén nanocsöveket állítottak elő. Kimutatták, hogy a szénrétegek között olyan oxigén-képződmény keletkezhet, melyre hőmérsékletfüggő spinátmenet jellemző.

Kimutatták, hogy a K^+ -ionok a réteges szerkezetű szilikátásvány glaukonitok rétegei közé a glaukonitosodás folyamatában épülnek be. A beépülést az teszi lehetővé, hogy a rács oktaéderez Al^{3+} -ionjai részben Fe^{2+} -(és kisebb mértékben Fe^{3+})-ionokra cserélődnek.

Szilícium vázatomok izomorf helyettesítésével bőrtartalmú zeolitanalóg MFI-szerkezetű anyagokat és membránt szintetizáltak.

Egységes méretű mikro- és mezopórusok rendezett hierarchikus rendszerét tartalmazó MCM-22/MCM-41 kompozit anyagot szintetizáltak. Kimutatták, hogy az új anyag előnyös adszorbens és katalizátor, mivel anyagtranszport tulajdonsága kedvezőbb, mint az MCM-22 zeolité.

Kutatói ráfordítás: 5 fő, ebből intézeti állományban: 4 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 24 M Ft, ebből pályázati ráfordítás: 4 M Ft.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Hazai kapcsolatok

Az intézet eredményes együttműködést folytat a hazai egyetemekkel, más akadémiai intézetekkel, valamint iparvállalatokkal.

Az egyetemekkel való együttműködés kiterjed a közös kutatásokra, valamint az Intézet kutatóinak részvételére az egyetemi oktatásban, doktori iskolákban, a PhD hallgatók témavezetésére és a minősítési eljárásokra. Az együttműködés különösen aktív az Eötvös Loránd Tudományegyetemmel (ELTE), a Szegedi Tudományegyetemmel (SzTE), a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudomány Egyetemmel (BME), a Pannon Egyetemmel és a Semmelweis Egyetemmel.

Az egyetemi kutatókkal összesen 27 közös publikációt jelentettek meg 2008-ban.

A kiterjedt egyetemi kapcsolatok egy része abból ered, hogy az intézet Nukleáris Kémiai Laboratóriuma és Reakciókinetikai Laboratóriuma az ELTE-n, illetve a SzTE-en, az egyetemmel szoros kapcsolatot tartva végzi munkáját. A laboratóriumok a spektroszkópiái, ill. nukleáris kémiai szerkezetvizsgáló módszerek elméletét és gyakorlatát nagy óraszámban oktatják.

A Nukleáris Kémiai Laboratórium a Mössbauer-spektroszkópiát és a pozitron annihilációs spektroszkópiát az ELTE Kémiai-, Fizikai-, Földrajz és Földtudományi-, továbbá a Biológiai Intézetével együttműködve használja. A laboratórium a Kémiai Intézettel közösen a biológiai és környezetvédelmi szempontból érdekes vas- és ón komplexek reakciót vizsgálja, valamint elektrokémiai előállított ötvözetbevonatokat tanulmányoz. A Fizikai Intézettel közösen a nagyenergiájú nehézion besugárzás hatásának mérésével foglalkoznak, a Földrajz- és

Földtudományi Intézettel együtt glaukonitokat és egyéb agyagásványokat vizsgálnak, a Biológiai Intézettel pedig növényélettani kutatásokat folytatnak. Az együttműködés eredményességét számos, egyetemi társszerzőséggel született közlemény igazolja. A Semmelweis Egyetem kutatásait a gyógyszer-tabletták porozitása és hatóanyag-leadása közötti összefüggés vizsgálatával segítik. Az SzTE Kémiai Intézetével együttműködve a vas szerkezetváltozásával foglalkoznak extrémén lúgos vizes oldatokban. A Pannon Egyetem Kémiai Intézetével kooperálva, a Paksi Atomerőmű Zrt. megbízását teljesítve, atomerőművi gőzfejlesztők korróziós jelenségeit tanulmányozzák. A vizsgálatok eredményei meghatározóak lehetnek az erőmű élettartam-hosszabbítási tervei szempontjából.

Az intézet a BME-vel együttműködve új, a levegő oxigén- és nitrogéntartalmának adszorpciós szétválasztására alkalmas, oxigénadszorpcióra szelektív szén adszorbensek előállítását és tulajdonságait tanulmányozta fa alapanyag termokémiai aktiválásával.

A Pannon Egyetem oktatási feladataiban való részvétel mellett az intézet az egyetem Kémiai Intézetével motorhajtó anyagok előállítása és finomítása katalitikus eljárásokkal témakörben dolgozik együtt.

Az intézet együttműködése hagyományosan jó az MTA Izotópkutató Intézetével (MTA IKI). Kooperációban Mössbauer spektroszkópia segítségével réteges szerkezetű Me^{4+} -foszfátokat vizsgálnak, továbbá az ön állapotát hordozós Sn, Sn-Pt és Sn-Au katalizátorokban. OTKA-támogatású közös kutatási projektek keretében inverz oxid/fém katalizátor modell-rendszereket tanulmányoznak, illetve vassal izomorf módon szubsztituált, hierarchikus porusrendszerű, MFI szerkezetű zeolitanalóg anyagokat szintetizálnak és jellemeznek.

Háromoldalú, nemzetközi és magyar vállalati (Bogdánypetrol Kft.) együttműködésben kétfémes katalizátorokat optimalizáltak olajok egy lépésben történő aromás- és kénmentesítésére.

A JOSAB Hungary Kft. megbízására szelektív adszorbenst fejlesztettek ki víz arzénmentesítésére.

Az intézet túlnyomórészt K+F-pályázati projektjei konzorciális ipari partnereivel áll kapcsolatban. Jelentősebb partnerei: MOL Rt., Paksi Atomerőmű Zrt., MAL Rt., KEMIKAL Rt., Festékipari Kutató Kft., SZIKKTI Kft., BAYATI, Bay Zoltán Anyagtudományi és Technológiai Intézet, TKI-Ferit Kft., Megapharma Kft., TMP Titanium Metal Processing Kereskedelmi és Szolgáltató Kft., Egrokorr Rt., Poli-Farbe Vegyipari Kft., Elastico Kft., Nanochem Kft., Metal-Art Nemesfém Ipari Rt., S-Metalltech 98 Anyagtechnológiai Kutató Fejlesztő és Szolgáltató Kft.

Nemzetközi kapcsolatok

Az intézet hagyományosan számos eredményes nemzetközi tudományos együttműködést folytat. A kapcsolatoknak Tét-együttműködési, ill. kétoldalú, akadémiák közötti szerződések adnak keretet. Az intézet kutatói közül összesen 106-an vettek részt külföldi tanulmányúton, ill. konferencián, ebből öten MTA-egyezményes témában. Nemzetközi konferenciákon 66 előadást tartottak.

A Tét Alapítvány támogatásával, a CNRS Le Mans-i Szilárdtestfizikai Kutatólaboratóriummal (Franciaország) együttműködve "Mágneses ellenállást mutató

perovszkitok és biológiailag fontos vegyületek vizsgálata Mössbauer-spektroszkópiával” témában folyik kutatás. A kolosszális mágneses ellenállást mutató mintasorozatokon részletes Mössbauer-mérések történtek 78 K és 300 K között, valamint alacsony hőmérsékleten és nagy külső mágneses térben. A kutatás eredményeiből 3 közlemény született.

A Tét Alapítvány támogatásával, az Olomücsi Egyetemmel (Csehország) együttműködve “Biológiai és környezetvédelmi szempontból jelentős vas- és ón komplexek reakcióinak Mössbauer-spektroszkópiai vizsgálata” című témán dolgoznak. A 2008-ban indult együttműködés a hasonló című OTKA-projekthez kapcsolódik. A közös eredményeket nemzetközi konferencia előadásban mutatták be.

A Tét Alapítvány támogatásával, a Buenos Aires-i Egyetemmel “Karbid katalizátorok vizsgálata” témában működnek együtt. A közös munka eredményeiből egy publikáció született.

A Tét Alapítvány támogatja, a “Hordozós Pd katalizátorok vizsgálata in situ módszerekkel” című témában, együttműködés kialakítását a Bécsi Műszaki Egyetemmel. Az együttműködő partnerek közösen ERA Chemistry pályázatot nyújtottak be.

Az MTA és a Bolgár Tudományos Akadémia (BTA) kétoldalú egyezmény alapján támogatja a “Mikro- és mezopórusos szilikátok szerkezeti és savas tulajdonságainak módosítása és alkalmazásuk katalizátor és adszorbens anyagként” című kutatást. Az intézet együttműködő partnere a BTA Szerves Kémiai Intézete (Szófia). A közös munka eredményeként 4 közlemény született.

Az MTA és a Román Tudományos Akadémia (RTA) kétoldalú egyezmény alapján támogatja az “Aktív fém-oxid katalizátorok vizsgálata különböző reakciókörülmények között in situ módszerekkel” című kutatási témát. Az együttműködő partner az „I. G. Margulescu” Fizikai-kémiai Intézet (Bukarest). A közös munka eredménye egy konferencia-előadás.

Az MTA és az Egyiptomi Tudományos Akadémia (ETA) kétoldalú egyezmény alapján támogatja a “Olajfinomítói szennyvizek szennyezőinek fotokatalitikus lebontása” című kutatási témát. Az együttműködő partner az Egyiptomi Petróleum Kutató Intézet (EPRI, Kairó). A közös munka eredményeiből konferencia és szemináriumi előadások hangzottak el, és közlemény is készült.

Az MTA és a spanyol CSIC kétoldalú egyezmény alapján támogatja a „Nagyátersztő és kombinatorikus módszerek alkalmazása a heterogén katalízisben” című kutatási együttműködést. A partnerintézmény a Műszaki Kémiai Intézet (UPV-CSIC, Valencia). Többkomponensű, Au/Al₂O₃ alapú katalizátorokat terveznek CO preferenciális oxidációjára. Az egyezmény alapján támogatást kap a “Hordozós aranykatalizátorok előállítása és felhasználása oxidációs reakciókban” című kutatás. Az együttműködő partner a Katalízis és Petrolkémiai Intézet (Madrid). A kutatás eredményeiből 2008-ban konferencián előadást tartottak és 2 közleményt jelentettek meg.

Az MTA és az Orosz Tudományos Akadémia (OTA) kétoldalú egyezmény alapján támogatja a “Immobilizált heteropolisavak (HPA) és fémorganikus vegyületek alkalmazása szerves szintézisekben” című kutatási együttműködést. Az együttműködő partner a Borekov Katalízis Intézet (Novoszibirszk). Az egyezmény alapján támogatást kap a “Növényi és bakteriális metabolitok fémekkel való kölcsönhatásának vizsgálata”. Az együttműködő partner a Biokémiai és Növényélettani Kutatóintézet (Szaratov). Megvizsgálták és leírták a vas(III)-komplex képződésének és redukciójának mechanizmusát az indol-3-karbonsavat,

ecetsavat, propionsavat, illetve butánsavat tartalmazó vizes oldatokban. A glutamin-szintetáz enzim ^{57}Co emissziós Mössbauer-vizsgálatával megállapították, hogy a két kation-kötőhely nem azonos affinitással köti meg a Co^{2+} ionokat. A kutatási eredményekről két közleményt jelentettek meg.

Az MTA-OTKA-NSF mobilitási támogatásával a Floridai Technológiai Intézettel (Melbourne, FL) együttműködve "A Fe-EDTE és rokon komplexek hidrogén-peroxidos oxidációja mechanizmusának a vizsgálata" című témán dolgoztak. Közösen 3 publikációt jelentettek meg.

Külön támogatásban nem részesülő, kutatói kezdeményezésű együttműködések folytak a Glasgow-i Caledonia Egyetemen, japán egyetemekkel (Tokió-, Kinki- és Ube), a Kolozsvári BB Egyetemen, a Philadelphiai Drexel, a Brazíliai (Brasília), a Sao Paulo-i Műszaki és a Szófia Egyetemen, valamint a Dubnai EAI Magreakciók Laboratóriumával. Ezekben az együttműködésekben 13 közlemény született.

Az intézet több külföldi cég kutatási-fejlesztési megbízásain is dolgozott. A Líbiai Petróleum Intézet (Tripoli) megbízására új, homogén katalitikus rendszert fejlesztett ki dízelolajok enyhe körülmények közötti oxidatív deszulfurálására. A Procter & Gamble Co. megbízására krómmentes, promoteált rézalapú katalizátorokat fejlesztettek ki zsírsav észterek alkohollá történő hidrogenolíziséhez.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

Határfelületi kémia

Korrózióvédelem

NANOLAKK – Többfunkciós nanokompozitok festékipari alkalmazásokra. (JEDLIK projekt; száma: OM-00061/2007) A szol-gél technológiával előállított, alumínium-oxiddal kombinált titán-dioxid kompozitok előállítása lehetővé teszi a TiO_2 pigmenthez hasonló fedőképességű, korróziógátló hatású termék előállítását.

Gyógyászati nanokémia

EXCELL - Exploring Cellular Dynamics at Nanoscale (Sejtdinamika kutatás a nanotartományban, EU kiválósági hálózat (NoE) száma: FP7, CP-FP 214706-2) A projekt célja annak megértése, hogy nanoszerkezetek sejtekbe való beillesztése vagy sejtek/szövetek nanoszerkezetekkel való kontaktusa miképpen befolyásolja a sejtfunkciót és a molekuláris gépezetet (pl. gén és fehérje expresszió, metabolizmus, fiziológiai válaszok stb.).

MAGNESOM - Mágneses nanorészecskéket tartalmazó liposzómák fejlesztése, vizsgálata biomedicinális, elsősorban lokalizált hipotermiás alkalmazásokra. (JEDLIK projekt; száma: OM-00076/2005). Nanorészecskékhöz kötött, molekulárisan célzott, daganatellenes jelátviteli gyógyszerhatóanyag és kapcsolódó diagnosztika integrált fejlesztése (lásd még a II. fejezetben).

Katalízis és felületkémia

ÚJBIOGO – Újgenerációs biohajtóanyagok (elsősorban biogázolaj) kifejlesztése. (JEDLIK projekt; száma: NKFP-A2-2006-0034) Eljárást fejlesztettek dízelolaj típusú, nagy cetánszámú, környezetbarát (kénmentes), cseppfolyós bio-motorhajtó-anyag előállítására növényolaj katalitikus hidrokonzverziójával.

Új tulajdonságú anyagok

POLYCOND - Creating competitive edge for the European POLYmer processing industry driving new added-value products with CONDucting polymers. (EU integrált projekt; száma: FP6 NMP2-CT-2005-515835) Az európai polimerfeldolgozó ipar versenyképes ágazatának megteremtése új, nagy hozzáadott értékkel jellemezhető vezetőképességű polimer termékek kifejlesztésével. A projekt célja az európai polimerfeldolgozó ipar nagy értékű, vezetőképességű polimer termékek előállítását, versenyképes ágazatának megteremtését. A polimer/nanocső kompozitokból elkészítették néhány kereskedelmi termék prototípusát.

N2P - Flexible production technologies and equipment based on atmospheric pressure plasma processing for 3D nano structured surfaces (Atmoszférikus plazmakémiai leválasztáson alapuló rugalmas gyártástechnológia és berendezések 3D nanoszerkezetű felületek előállítására. (Nagyléptékű EU integrált projekt; száma: FP7, CP-IP 214134-2, N2P). A projekt célja Európa pozíciójának jelentős javítása a felületek háromdimenziós (3D) nanostrukturálása terén; tudományos, alkalmazott és ipari területen egyaránt. Az új, nagy áteresztőképességű, technológiai láncba illeszthető, atmoszférikus nyomáson működő plazmaleválasztásos technológiák kifejlesztése a napenergiára alapozott energiatermelés és az energiátároló eszközök fejlesztése területén jelenthet áttörést: elsősorban 3D-ben rendezett szén nanocsövek felhasználásával.

ALMAACID - L-almasav alapú biopolimerek előállítása és azok felhasználási lehetőségei a gyógyászatban és élelmiszeriparban. (JEDLIK projekt; száma: OM-00162/2007) A természetes alapú, almasavból kiinduló polimer előállítása azért fontos, mert alkalmazási lehetőségei igen széleskörűek (pl. felszívódó sebkötözés). A homo- és kopolimer előállításához sikerült egy nem-mérgező katalizátort kidolgozniuk.

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

1. Alagta A, Felhősi I, Bertóti I, Kálmán E: Corrosion protection properties of hydroxamic acid self-assembled monolayer on carbon steel, CORROSION SCIENCE 50(6): 1644-1649 (2008)
2. Somodi F, Borbáth I, Hegedűs M, Tompos A, Sajó IE, Szegedi Á, Rojs S, Fierro JLG, Margitfalvi JL: Modified preparation method for highly active Au/SiO(2) catalysts used in CO oxidation, APPLIED CATALYSIS A-GENERAL 347(2): 216-222 (2008)
3. Pászti Z, Keszthelyi T, Hakkel O, Guzzi L: Adsorption of amino acids on hydrophilic surfaces, JOURNAL OF PHYSICS-CONDENSED MATTER 20(22): 224014 (2008)

4. Solt H, Lónyi F, Mihályi RM, Valyon J, Gutierrez LB, Miro EE: A mechanistic study of the solid-state reactions of H-mordenite with indium(0) and indium(III)oxide, JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C 112(49): 19423-19430 (2008)
5. Kuzmann E, Stichleutner S, Homonnay Z, Vértes A, Paszternák A, Nagy F, Felhósi I, Pető G, Telegdi J, Kálmán E: Amorphous iron formation due to low energy heavy ion implantation in evaporated Fe-57 thin films, JOURNAL OF RADIOANALYTICAL AND NUCLEAR CHEMISTRY 277(3): 699-702 (2008)
6. Óvári L, Bugyi L, Majzik Zs, Berkó A, Kiss J: Surface structure and composition of Au-Rh bimetallic nanoclusters on TiO₂(1 1 0): a LEIS and STM study, JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C 112, 18011-18016 (2008)
7. Románszki L, Telegdi J, Kálmán E: Comparative study of Langmuir- and Langmuir-Blodgett layers of amphiphilic carboxylic- and hydroxamic acids, COLLOIDS AND SURFACES A-PHYSICOCHEMICAL AND ENGINEERING ASPECTS 321(1-3): 20-28 (2008)
8. Farkas AP, Koós Á, Bugyi L, Solymosi F: Adsorption and reaction of methyl and ethyl iodide on potassium-promoted Mo₂C/Mo(1 0 0) surface, JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C, 112: 18502-18509 (2008)

VI. A kutatóhely 2008. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

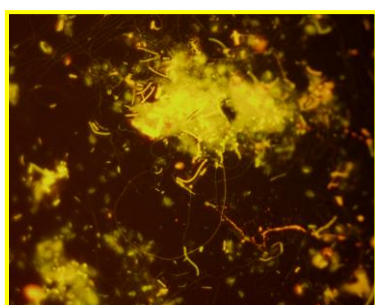
Az intézet neve: MTA Kémiai Kutatóközpont, Nanokémiai és Katalízis Intézet

| | | |
|---|--|-----------------|
| Átlagléltszám ¹ : 93 | Ebből kutató ² : 60 | |
| PhD, kandidátus: 26 | MTA doktora: 6 | levelező tag: - |
| rendes tag: - | | |
| 35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma: | | |
| Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma ³ : 78 | | |
| Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ⁴ : 77 | | |
| Ebből impakt faktoros publikáció magyarul: - | idegen nyelven: 50 | |
| nemzetközi együttműködés keretében: 26 | SCI által regisztrált folyóiratban: 50 | |
| összesített impakt faktor ⁵ : 77,242 | összes hivatkozás száma ⁶ : 539 | |
| összes hivatkozás száma önidézetek nélkül: 412 | | |
| Magyarul könyv/monográfia ⁷ : - | könyvfejezet: 1 | jegyzet: - |
| Idegen nyelven könyv: - | könyvfejezet: 12 | jegyzet: - |
| Tud. fokozat megszerzése ⁸ : PhD: 6 | MTA doktora: - | levelező tag: - |
| rendes tag: - | | |
| Elfogadott találmányok, szabadalmak száma ⁹ : 1 | ebből külföldön: - | |
| Értékesített szabadalmak száma: - | | |
| Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos | | |
| szóbeli előadások száma ¹⁰ : 39 | posztterek száma: 27 | |
| Tanácsadói tevékenységek száma ¹¹ : - | | |
| Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 11 | Nemzetközi folyóirat szerk. tagság: 19 | |
| Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹² : 10 | | |
| Ebből doktori iskolákban oktatók száma: 3 | Doktori iskolát vezetőik száma: - | |
| Elméleti kurzusok száma ¹³ : 11 | Gyakorlati kurzusok száma: 5 | |
| TDK munkát készítő hallgatók száma: 1 | Diplomamunkát: - | PhD-t: 16 |
| Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma ¹⁴ : 415 | | |
| Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ : | 481,0 | MFt |
| Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁶ : 4 | Teljes saját bevétel: | 400,0 MFt |
| Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel ¹⁷ : | 12,8 | MFt |
| Az év folyamán művelt OTKA témák száma: 11 | | |
| A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: | | 33,3 MFt |
| Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma ¹⁸ : 11 | | |
| NKFP: 11 | A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: 164,6 MFt | |
| Egyéb: - | A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: - MFt | |
| NFT témák száma ¹⁹ : - | A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: - MFt | |
| Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma ²⁰ : 8 | | |
| EU forrásból: 7 | A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: 108,8 MFt | |
| Egyéb: 1 | A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: 2,4 MFt | |
| Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma: 52 | | |
| A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: | | 80,0 MFt |
| Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány ²¹ : - MFt | | |

**Az MTA KK Nanokémiai és Katalízis Intézetének
kiemelten sikeres kutatási területei 2008-ban**

Korróziógátló molekuláris bevonatok

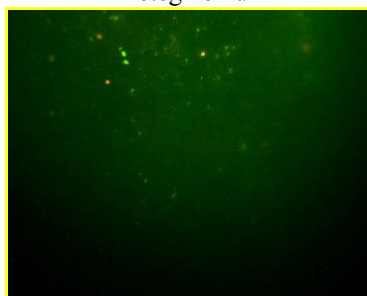
A korrózió a gazdaság minden területén folyamatosan komoly károkat okoz. A Kémiai Kutatóközpont Nanokémiai és Katalízis Intézete kutatásainak egyik fontos területe a korrózió valamennyi formájának minél kevesebb anyag felhasználásával és minél hatékonyabban történő gátlása. Előnyös hatást sikerült elérniük amfifil, azaz hidrofil- és lipofil-részt egyaránt tartalmazó molekulákból fémfelületeken kialakított molekuláris nanorétegekkel. A korróziógátlás alkalmas kémiai és fizikai paramétereinek megválasztását a Langmuir-Blodgett (LB) rétegek kutatásával, a nagykiterjedésű nanorétegek kialakítását pedig a molekuláris önszerveződés vizsgálata révén elért eredmények tették lehetővé. Megállapították, hogy a vas és a réz felszínén az amfifil foszfonsavból vagy hidroxámsavból $[RP(O)(OH)_2]$, illetve $R-CO-NH-OH$, ahol R jelentése szerves molekularész, például szénhidrogén-csoport] kialakított nanofilm mind a kémiai, mind az elektrokémiai korróziót hatékonyan gátolja, ugyanakkor a mikrobiológiai korrózió gátlására elsősorban az amfifil hidroxámsavból kialakított nanoréteg bizonyult alkalmasnak (lásd az ábrát).



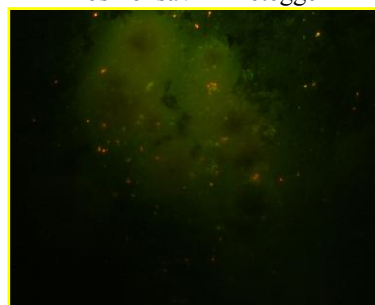
Réteg nélkül



Foszfonsav LB réteggel



Önszerveződött
hidroxámsav réteggel



Hidroxámsav LB réteggel

Az amfifil molekuláris bevonatok hatása a mikrobiális korróziót okozó mikroorganizmusokra. Epifluoreszcens mikroszkópos felvételek hűtővízzel hosszú időn át érintkezett vas felszínéről. A mikroorganizmusokat a képen sárga foltok jelenítik meg.

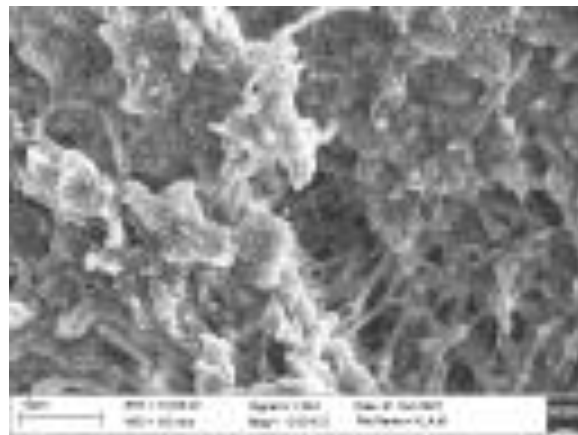
Módosított szén nanocsövekkel adalékolt vezető polimerek

Különleges tulajdonságaik révén a szén nanocsövek új kompozit anyagok kedvező tulajdonságokat biztosító komponensei lehetnek. A Kémiai Kutatóközpont Nanokémiai és Katalízis Intézetében folytatott kutatások célja olyan eljárás kidolgozása volt, amely elősegíti a szén nanocsövek diszpergálhatóságát különféle készítményekben, elsősorban polimerekben, a szén felületének egyszerű módosításával.

A szén nanocsövek erősen apoláris jellegű anyagok, mivel felületük nem hordoz funkciós csoportokat. Ahhoz, hogy megfelelő kölcsönhatást értsünk el a szén nanocső és a kompozit fő tömegét adó anyag között, a nanocsövek felületén funkciós csoportokat kell kialakítani. A kompozit homogenitása elsősorban a módosító funkciós csoportokon múlik. Apoláris közegben a hidrofób csoportokkal módosított szén nanocsövet lehet jól eloszlatni, poláris szerkezeti anyagba pedig a hidrofíllé tett szén nanocsövet célszerű bekeverni.

Polimeradalékként a szén nanocsövek, amellet hogy javíthatják a polimer mechanikai tulajdonságait, elektromos vezetővé is tehetik a polimert.

A kísérleteket egy az EU-által támogatott konzorcium tagjaként végezték. A módosított nanocsöveket szerkezeti polimerbe dolgozták be (1. ábra). A fejlesztés eredményeként termékmintákat állítottak elő (2. ábra).



1. ábra

Szén nanocsővel adalékolt poliuretán pásztázó elektron mikroszkópos felvétele



2. ábra
Szén nanocsővel adalékolt vezető polimer termékek

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

Az intézet alapvető feladata: nemzetközi színvonalú tudományos kutatások végzése a molekulák és a szupramolekuláris szerkezetek, valamint anyagtudományi és biológiai vonatkozású összetett rendszerek sajátosságainak különböző spektroszkópiai 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 hozzájárulás más kutatóhelyek kutatási-fejlesztési feladatainak elvégzéséhez. 2008-ban az intézet össztevékenységében jelentős hányadot képviselt a más hazai, egyetemi és kutatóintézeti témákhoz kapcsolódó, kémiai szerkezetkutatási feladatokban való részvétel is. A kutatóhely számos témában folytat meghatározó jelentőségű tudományos együttműködéseket a Kutatóközpont Biomolekuláris Kémiai, valamint Nanokémiai és Katalízis Intézetével.

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

ESR-spektroszkópiai kutatások

Paramágneses fullerénvázas vegyületek és egyéb nano-struktúrák mágneses tulajdonságainak vizsgálata során, sikeresen kapszuláztak mágneses fulleréneket egyfalú nanocsövekben. Megállapították, hogy a nanocsövekben a N@C₆₀ stabilabb mint kristályos C₆₀ mátrixban, azaz az atomi nitrogén magasabb hőmérsékleten tud kiszabadulni. A N@C₆₀ nanocsőbe ágyazott formája esetén, a nanocső vezetési elektronjaival való kölcsönhatás miatt, lényegesen rövidebb T₁ relaxációs idő észlelhető.

Kutatói ráfordítás: 4 fő, ebből intézeti állományban: 2 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 6 M Ft, ebből pályázati forrás: 2 MFt.

Lézerspektroszkópiai kutatások

Új, szupramolekuláris komplexet állítottak elő egy gyógyászati szempontból fontos izokinolinvázas alkaloid, a berberin és a kukurbit[7]uril merev makrociklusos vegyület önszerveződésével. Kimutatták, hogy a szupramolekula képződése szokatlanul nagy mértékű, kb. 500-szoros fluoreszcenciaintenzitás növekedést okoz, ami jól hasznosítható analitikai eljárások kifejlesztésére. A berberin–kukurbit[7]uril komplex stabilitási állandójának jelentős csökkenését tapasztalták nátriumionok és alkilimidazolium típusú ionfolyadékok hatására.

Kutatói ráfordítás: 3 fő, ebből intézeti állományban: 3 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 4 MFt, ebből pályázati forrás: 2,3 MFt.

Meghatározták új, optikai szenzorokban alkalmazható, királis, szupramolekuláris receptorok komplexképzési reakcióinak jellemzőit (egyensúlyi állandók, enantioszelektivitás, reakciósebesség). Felderítették új királis vegyületek (foszfolének) abszolút konfigurációját CD-spektroszkópiai kísérletekkel és elméleti kémiai számításokkal.

Tanulmányozták a molekulák sztérikus sajátságának a fémkomplexek önszerveződési reakciójában történő megnyilvánulását. Kimutatták, hogy egy új, terminális piridilcsoportokat, valamint láncközi iminonitrogéneket tartalmazó ligandum primer koordinációs helye, az iminonitrogéneknél fellépő keláteffektus ellenére is, a sztérikusan kevésbé gátolt piridilcsoport. Megállapították azt is, hogy két különböző térigényű komplex jelenlétében ezek méret szerinti szelektív koordinációja valósul meg.

Kutatói ráfordítás: 5 fő, ebből intézeti állományban: 5 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 6 MFt, ebből pályázati forrás: 2 MFt.

Az eddig szintetizált mintegy 180 zeolitváz közül csupán három szerkezet mutatott királis tulajdonságokat. Két új, porózus, tetraéderes vázú (SU-32 és SU-15 fantázianevű; SU-32: $[H_3NCH(CH_3)_2][Ge_{5.28}Si_{14.72}O_{20}]$, ill. SU-15: $[H_3NCH(CH_3)_2][Ge_{5.90}Si_{14.10}O_{20}]$ összetételű) szilícium-germanátot szintetizáltak, és megállapították, hogy az SU-32 A-polimorf módosulatának belső királis szerkezete van. A szerkezetet szabályozó ágens, a diizopropilamin termikus eltávolítását egy-egy 80-100 μm -es átmérőjű egykristály FTIR-mikroszkópiás vizsgálatával követték a hőmérséklet függvényében. Megállapították, hogy az SU-15 mintából 300 °C-nál, míg a SU-32 zeolitból 400°C-on teljesen távozott a diizopropilamin, ill. annak különböző bomlástermékei, ugyanakkor a zeolitszerkezet sértetlen maradt.

Továbbfejlesztették az infravörös spektrumok sávpolarizációs irányainak meghatározására az előző években kifejlesztett kísérleti/elméleti kombinált módszert, amely anizotróp (nematikus folyadékkristályos) oldatok polarizált IR-spektrumainak mérésén és a molekularezgések elméleti számításán alapul. Az oldatban uniaxiálisan orientált molekulák irányfüggő spektrális sajátságait a szabad molekulára, illetve a közeghatást is figyelembe vevő (szolvatációs) modellekre vonatkozó számításokkal közelítették. Aszimmetrikus naftalin-izotopológok vizsgálatával kimutatták, hogy az elméleti predikciók már közepes szintű DFT-számítások esetén is nagyon jó eredményt adnak. A szokásos izotróp szolvatációs modellek (pl. az IEF-PCM) nem javítottak az rezgési átmenetmomentum-irányok leírásának pontosságán; előrelépés az anizotróp IEF-PCM modelltől várható.

Kutatói ráfordítás: 5 fő, ebből intézeti állományban: 3 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 3 MFt, ebből pályázati forrás: -.

NMR-spektroszkópiai kutatások

Meghatározták az endogén kalpain inhibitor, a kalpasztatin evolúciósan konzervált A és C szubdoménjéből származtatott peptid (SGKSGMDAALDDLIDTLGG és SKPIGPDDAIDALSSDFTS) szerkezetét vizes pufferban, CD_3OH/H_2O 1:1 elegyben és két ekvivalens Ca^{2+} jelenlétében. A peptid NMR-vizsgálata alátámasztja a hipotézist, amely szerint az eredendően rendezetlen kalpasztatin fehérje *apo* állapotában megvan a hajlam ugyanazoknak a másodlagos szerkezeti elemeknek a kialakulására, mint amelyeket a *holo* formában a partnerfehérjéhez történő kötődés indukál. Az NMR-vizsgálatok rámutattak arra is, hogy mindkét peptid kalciumionokat köt, ami a hélixek destabilizálódásához vezet a metanolos oldatban.

Enantioszelektív, tiokarbamid módosított 9-*epi*-cinchona alapú organokatalizátorok oldat-térszerkezetét határozták meg nagyfelbontású NMR-módszerekkel, bonyolult intra- és intermolekuláris cserefolyamatok együttesében. Felismerték, hogy a vizsgált katalizátorok oldatban dimer asszociátumokat alkotnak, ami összefüggésben áll a molekulák bifunkcionalitásával és konformációs szabadsági fokával. A felfedezett dimer asszociátumok térszerkezetét pontos ^1H - ^1H atomi távolságok mérésével és kiértékelésével végezték alacsony hőmérsékletű (-80°C) NOESY mérések segítségével. A kapott szerkezetek értékes modelljei a szerves kémiai reakciók mechanizmusát és kinetikáját vizsgáló kutatásoknak a hatékonyabb katalizátorok tervezésében.

Kutatói ráfordítás: 6 fő, ebből intézeti állományban: 6 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 18 MFt, ebből pályázati forrás: 2 MFt.

Röntgendiffrakciós kutatások

2008. év folyamán új mérési és számítási technikákat vezettek be és alkalmaztak. Képlemez-térdekortot használtak egykristályok, porok és folyadékok röntgenszórásának vizsgálatára. Szilárdfázisú reakciókat végeztek komplexekben. Meghonosították a krisztallográfiai fázisprobléma megoldásának új módszerét, fejlesztették a korlátozott felbontású szórással bíró anyagok szerkezetvizsgálatát. Szupramolekuláris átalakulások rendszerezésére alkalmazták a morfortrópia - izostrukturalitás antinómia módszerét. Új típusú ionos - molekuláris rendszerek, komplexek kialakítását kezdték meg, egyes esetekben nemes-, átmeneti-, ill. alkáli-fém komplexek létrehozásával együtt.

Folytatták egyes önszerveződő szupramolekuláris rendszerek szerkezetének meghatározását, a kialakuló szupramolekuláris formák geometriai jellemzését.

Kutatói ráfordítás: 4 fő, ebből intézeti állományban: 4 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 25 MFt, ebből pályázati forrás: 2,5 MFt.

Tömegspektrometriai kutatások

Az alfa-1-savas glikoprotein tumormarker genetikai variánsainak vizsgálata során megállapították, hogy a rákos betegek és a kontrollcsoport genetikai variánsainak (ORM1/ORM2) arányában statisztikailag szignifikáns eltérés mutatható ki. Ezen kutatások mind a tudomány, mind az orvosi gyakorlat számára rendkívül fontosak. Kutatásaik a rákos folyamatok biokémiájának megértését segítik, aminek eredményeképpen lehetőség nyílik a daganatos megbetegedések kezelésére szolgáló gyógyszerek tervezésére. Másrészt pedig, a kidolgozott módszer a mindennapi orvosi gyakorlatban alkalmazható gyors, pontos diagnosztikai eljárásként.

A glikopeptidek energiafüggő, tandem tömegspektrometriás vizsgálata révén, módszert dolgoztak ki a glikopeptidek glikozilációs mintázatának torzítatlan meghatározására. Ez a módszer lehetőséget nyújt a diagnosztikai értékű glikoproteinek ún. helyspecifikus glikozilációs mintázatának vizsgálatára.

Kutatói ráfordítás: 8 fő, ebből intézeti állományban: 7 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 32 MFt, ebből pályázati forrás: 22 MFt.

Elméleti kémiai kutatások

Kvantumkémiai számítások alapján javaslatot tettek a nagy térkitöltésű Lewis sav–bázis-párok („frusztrált Lewis párok”) hidrogénnel és olefinekkel történő reakciójának mechanizmusára. Megállapították, hogy a folyamatban kulcsszerepet játszik a sav és a bázis nemkovalens asszociátuma, ami lehetővé teszi a Lewis-centrumok kooperativitását. A reakciók mechanizmusának értelmezése sikeresen felhasználható új és feltételezhetően gazdaságos katalitikus eljárások kidolgozásában, ugyanis a legújabb kísérletek szerint a frusztrált Lewis-párok hatékony katalizátorként alkalmazhatók telítetlen vegyületek hidrogénezésében.

Pirazinil-keeton arilhidrazonok gyűrűzáródási reakciójában elméleti számításokkal igazolták savak vagy bázisok katalitikus hatását, valamint kimutatták, hogy a reakció a közeg milyenségétől függően periciklusos vagy pszeudopericiklusos mechanizmus szerint egyaránt végbemehet.

Az acetaldehid etilén és víz reakciójával történő előállítására a Wacker cég fejlesztett ki egy ipari eljárást. A katalitikus folyamat mechanizmusának Car-Parrinello molekuláris dinamikai szimulációs módszerrel történő vizsgálatával megállapították, hogy a külső-szférás sebességmeghatározó lépés sokkal valószínűbb, mint a belső-szférás mechanizmus.

Pt(II)-kation hidrátszférájának szerkezetét és rezgési sajátosságait határozták meg számítással és méréssel. Megállapították, hogy – ellentétben a legfrissebb EXAFS-mérésekkel – a szimuláció tetragonális, és nem oktaéderes hidrátszférát jósol, ami viszont összhangban van a rezgési spektrummal. Kimutatták, hogy a hidrátburokban lévő vízmolekulák savassága jelentősen megnő, és protoncserében vesznek részt a második hidrátszféra vízmolekuláival.

Kvantumkémiai számítások segítségével – a kísérleti vizsgálatokkal párhuzamosan – azonosították azokat az alapvető reakciólépéseket, amelyekben a természetes vizeket szennyező naftil- és benzolszulfonsav-származékok titándioxid és fény alkalmazásával szerzetlen vegyületekké (H₂O, CO₂, SO₂) bonthatók.

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

A szénhidrogének égési folyamataiban jelentős elemi reakciók elméleti reakciódinamikai vizsgálata során megállapították, hogy a szénhidrogének oxidációjában mindig előforduló ³O és etilén reakciójában olyan jelentős mértékben (kb. 50 %) történik triplett–szingulett átmenet, hogy az alapvetően befolyásolja az oxidációs termékek összetételét.

Meghatározták a molekulaorientáció és a lézerpolarizáció hatását a CH₂BrCl-molekula disszociációjának koherens szabályozására, és ezek figyelembevételével optimalizálták a szabályozási eljárást. Feltárták a halometán-molekulákon (CH₂I₂, CH₂BrI) időfelbontásos mérések során észlelt dinamikus rezonanciák eredetét, és értelmezték főbb jellemzőit.

Az “atomi egységfelbontás” segítségével matematikailag újrafogalmazták az effektív atompályák problémakörét, ami lehetővé tette az “effektív minimál bázis” definiálását a “fuzzy atomok” esetére is.

Általánosították a “redukált rezolvens” formalizmust az intermolekuláris kölcsönhatások vizsgálatánál fellépő nem-ortogonális bázisban alkalmazandó biortogonális perturbációs elmélet esetére.

Kutatói ráfordítás: 7 fő, ebből intézeti állományban: 7 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 17 M Ft, ebből pályázati forrás: 8,5 M Ft.

Folyadékdiffrakciós kutatások

Önszerveződő szupramolekuláris rendszereket (platinakomplexek, aranykomplexek, palládiumkomplexek) vizsgáltak, és meghatározták a komplexek szolvátburkának szerkezetét. Az aranykomplexek mérési eredményeivel sikerült nemlineáris optikai tulajdonságaikra egy lehetséges magyarázatot adni.

A tömény nátriumhidroxid vizes oldatok szerkezetének ismeretét az alumíniumgyártás során történő alkalmazás teszi indokolttá. Megmutatták, hogy a koncentráció változásával hogyan változik a nátriumion hidrátzféréja és az ionpárok mennyisége. Kimutatták, hogy a hiperkoordinált hidroxidion közepes és alacsony koncentrációkban kielégítően leírja a hidratált hidroxidion szerkezetét. Ennek ismeretében tömény lúgos oldatok, mint például a gallátoldatok is tanulmányozhatók. Víz-metanol, valamint víz-formamid elegyeket röntgendiffrakcióval és molekuláris dinamikai szimulációval tanulmányoztak. Vizsgálták a hidrogénkötéses hálók kialakulását az irodalomban már bevált módszerekkel. Egy új statisztikai módszer segítségével az eddig ismerteknél részletesebb szerkezeti leírást adtak. A hidrogénkötéses rendszerek ismerete biológiai alkalmazásokban jelentős.

Kutatói ráfordítás: 5 fő, ebből intézeti állományban: 5 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 6 MFT, ebből pályázati forrás: 3 MFT.

Szupramolekuláris kémiai kutatások

Változatos tagszámú és alakzatú, potenciálisan számos gyakorlati célra alkalmazható arany(I) szupramolekulákat állítottak elő. Megfigyelték az arany(I) szupramolekulák esetében nagyon ritka, spontán rezolválódást. Egykristály röntgendiffrakciós szerkezetvizsgálatokkal bizonyították, hogy a spontán rezolválódás folyamatát a szupramolekula anionja és az alkalmazott oldószer milyensége nagymértékben befolyásolja.

Megállapították, hogy a triorganoón(IV)-vegyületek csoportvándorlással járó kristály-olvadék-kristály átalakulását a metil-szubsztituensek és oxigén-donorok molekulán belüli együttes jelenléte teszi lehetővé.

Kutatói ráfordítás: 2 fő, ebből intézeti állományban: 2 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 2,5 MFT, ebből pályázati forrás: 1,5 MFT.

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 2008-ban egyetemi kutatókkal közösen megjelent 25 tudományos publikáció is mutatja. Tevékeny részt vállalnak az egyetemi oktatásban. Az intézet 13 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-vel és a Szegedi Egyetemmel közösen öt folyóiratcikket jelentettek meg 2008-ban különböző spektroszkópai kutatási témákban.

A Semmelweis Egyetem kutatóival együttműködésben a sejtek közötti kommunikáció feltérképezéséhez tömegspektrometriai módszereket alkalmaztak. Kidolgozták a mikrovezikulumok proteomikai és metabolomikai vizsgálatához szükséges mintaelőkészítési módszereket.

A Pannon Egyetem, Szerves Kémia Tanszékével és a MÜKKI-vel együttműködésben spektroszkópiai vizsgálatok témakörében két közös publikációt közöltek.

Az „Átmenetifém-komplexek alap- és gerjesztett állapotai szerkezetének és fotokémiai tulajdonságainak vizsgálata” c. témában (együttműködő partner: Pannon Egyetem, Veszprém) több Hg(II)-porfirin komplexet állítottak elő, megállapították fotofizikai és fotokémiai tulajdonságaikat, és azokat kvantumkémiai számítások segítségével értelmezték. A „Naftilszulfonsav származékokkal szennyezett természetes vizek fotokémiai tisztítása” c. témában két közös publikáció született.

A Richter Gedeon Nyrt. részére speciális – nagy szaktudást igénylő – tömegspektrometriás méréseket végeztek.

Nemzetközi kapcsolatok

Az intézet nemzetközi kapcsolatai rendkívül sokrétűek és eredményesek. A kutatólaboratóriumok a megfelelő szakterületek minden jelesebb kutatóhelyével kapcsolatban állnak. Számos meghívás és 25 közös publikáció mutatja az együttműködések eredményességét. 2008-ban összesen 88 külföldi tanulmányutat tettek, ebből MTA-egyezményes utazás 17 témában volt. Az intézet kutatói 44 előadást és 34 poszter-előadást tartottak nemzetközi konferenciákon.

Több külföldi egyetemi kutatóhellyel együttműködésben (Université de Provence, Marseille; The Ohio State University; Medical College of Wisconsin, Milwaukee, USA; Eindhoven University of Technology, Hollandia; University of Rosario, Argentína) „Reaktív oxigén specieszek és biológiai fontosságú komplexek ESR-vizsgálata” c. témában két folyóiratcikket jelentettek meg.

MTA-kétoldalú, egyezményes együttműködés keretében, a „Spinzondák és spinjelölések alkalmazása” c. témában (együttműködő partner: Department of Physics, Indian Institute of Science Bangalore, India) spinzondák ESR-spektrumaiból szimuláció segítségével meghatározták a rotációs korrelációs időket. Az így meghatározott korrelációs idők alkalmasnak bizonyultak szilárd polimer-elektrolitok fázisátmeneteinek követésére.

Az „Alkaloidok fény hatására végbemenő folyamatai biológiai fontosságú rendszerekben” c. témában (együttműködő partner: Max-Planck Institute for Bioinorganic Chemistry, Németország) MTA – DFG együttműködés keretében kimutatták, hogy a koralin nevű benzo[c]fenantridin típusú alkaloid dimerizációját elősegíti az erős kötődés negatív töltésű poliszacharidokhoz. Az ízületi problémák megelőzésére és kezelésére használt kondroitin-szulfát esetén pH-függő kölcsönhatást találtak. Megállapították, hogy a B2-vitamin bomlásterméke, a lumikróm stabil beékelődési komplexet alkot kukurbit[7]uril makrociklusos

vegyülettel, és ez a folyamat a lumikróm részleges tautomerizálódására vezet. Az eredményekről nemzetközi konferencián számoltak be. Két publikáció közlés alatt van.

MTA-BTA kétoldalú egyezmény keretében orientált molekulákat tanulmányoztak infravörös lineáris dikroizmus alapján, elméleti számítások segítségével. Az együttműködő partnerrel (Institute of Organic Chemistry, BAS, Szófia) előadást tartottak a XXIX EUCMOS, Opatija 2008 konferencián.

Román-magyar Tét-együttműködés keretében (együttműködő partner: National Institute for Research and Development of Isotopic and Molecular Technologies, Kolozsvár, Románia) biológiai minták nagyméretű (kb. 1GB) HPLC-MS felvételeinek értékelését segítő programot dolgoztak ki.

Ukrán-magyar MTA-kétoldalú megállapodás részeként (együttműködő partner: B.Verkin Institute for Low Temperature Physics and Engineering of the National Academy of Sciences of Ukraine, Harkov, Ukrajna) a biológiai rendszerekben fontos szerepet betöltő molekulák gázfázisú ionkémiai tulajdonságait vizsgálták tömegspektrometriai és elméleti kémiai módszerekkel.

Az „Új tulajdonságú anyagok a szupramolekuláris és szilárd fázisú kémiában” c. magyar – dél-afrikai Tét-együttműködés keretében (együttműködő partner: University of Cape Town, Dél-Afrika) folytatott kutatási téma eredményeként, egy alfa-(4-piridil)benzohidrol származék sósavas sójának szublimációját vizsgálva tapasztalt orientált kristálytranszformáció jelenségét a parciális izostrukturalitás felismerésével megmagyarázták. Elkezdték ciklodextrin gyógyszerhatóanyagokkal képzett zárványainak és polimorfjainak előállítását, szerkezet- és izostrukturalitás vizsgálatát. Az eredményeket egy dolgozatban és három előadásban foglalták össze.

Magyar-dél-afrikai Tét-egyezmény keretében az „Alkánok katalitikus aktiválása” c. témában (együttműködő partner: Department of Chemistry, University of Cape Town) CpM(CO)₂Me típusú vegyületeket szintetizáltak (M=Fe, Ru), majd ezekből kiindulva foszfinok alkalmazásával sikerült acilezési reakciókat megvalósítani, vagyis előállítani a CpM(CO)(PPh₃)(COMe) intermediereket. Ezeket a vegyületeket protonálási reakciókban alakították tovább CpM(CO)(PPh₃)(C(OH)Me)⁺ típusú kationos komplexekké.

MTA-DFG-egyezmény keretében a „Halometánok: kvantumkémiai és kvantumdinamikai számítások a fotodisszociáció lézeres szabályzására” c. témában (együttműködő partner: Institute of Physical Chemistry, Friedrich-Schiller-University Jena, Németország) két-dimenziós kvantumdinamikai számításokkal feltárták a nem-adiabatikus átmenetek szerepét a CH₂BrCl-molekula UV-fotodisszociációjában és két-impulzusos koherens szabályzási eljárást dolgoztak ki a fotodisszociáció szelektív tételére. A molekula-orientáció és a lézer-polarizáció figyelembevételével a disszociáció szelektivitását egy nagyságrenddel sikerült növelni. Két közös publikációt jelentettek meg.

MTA-CNRS együttműködés eredményeként (partner: CEA-Saclay, LLB, Franciaország) 2008-ban egy közös publikációt jelentettek meg.

MTA-DFG együttműködés (partner: University of Regensburg, Department of Theoretical Chemistry) során 2008-ban egy közös publikációt közöltek.

Az MTA-DFG-egyezménybe foglalt „Poliatomos oxoanionokat tartalmazó vizes és nemvizes oldatok szerkezeti jellemzése elméleti és kísérleti módszerekkel” c. téma tanulmányozása során különböző koncentrációjú NaNO_3 -oldatok röntgendiffrakciós és neutrondiffrakciós mérését, valamint Car-Parrinello molekuláris dinamikai szimulációját végezték el. A klasszikus molekuláris dinamikai szimulációt a német partner végezte. Az elméleti és a kísérleti adatok összehasonlításáról közös publikációban számoltak be.

MTA-CNRS-együttműködés keretében cink-klorid oldatok szerkezetét tanulmányozták vizes oldatokban neutrondiffrakciós módszerekkel.

Magyar-osztrák TÉT-együttműködésben az „Arany szolvatációjának tanulmányozása poláros és nempoláros oldószerekben” c. témában elvégezték arany(I)-klorid, valamint kálium-diciano-aurát(III) nemvizes (metanol, nitrometán) oldatainak röntgendiffrakciós mérését. Az arany(I)-, valamint arany(III)-ionok molekuláris dinamikai szimulációjához szükséges klasszikus potenciálok illesztésére, ab initio számítások eredményeire építve, az osztrák partnerrel együttműködésben került sor. Az eredményekről közös publikációban számoltak be.

A University of New Mexico, Albuquerque, NM, USA partnerrel együttműködésben klasszikus- és kvantummechanikai, reakciódinamikai számításokkal megállapították, hogy az égések kémiájában alapvető ($\text{H} + \text{O}_2$)-reakcióban az oxigénmolekula forgási gerjesztettsége olyan mértékben növeli a reakciósebességet, hogy azt a modellszámításokban figyelembe kell venni. Két közös publikációt közöltek.

A Department of Chemistry, Northwestern University, Evanston, IL, USA kutatóival elméleti, reakciódinamikai vizsgálatokat végeztek. Az eredményeket közös publikációban foglalták össze.

Meghatározták, hogy a $\text{Fe}_2(\text{CO})_9$ és a $\text{Co}_2(\text{CO})_8$ -komplexekben a Ponc-féle átlagolt Fermi-lyuk analízis alapján milyen a fém-terminális ligandum, a fém-hídligandum és az esetleges fém-fém kötés természete. (Együttműködő partner: Institute for Chemical Process Fundamentals, Czech Academy of Sciences, Prága). Az eredményekről egy közös publikációban számoltak be.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

Hazai pályázatok

A „Bioligandumok fémkoordinációjának termodinamikai vizsgálata ESR-spektroszkópiával” és a „Koordinációs viszonyok és konformációs egyensúlyok vizsgálata aliciklusos beta-aminosav származékok réz(II) komplexeinél kétdimenziós ESR-spektroszkópiai módszerrel” c. OTKA témákban elért eredményekről két dolgozatot állítottak össze.

OTKA-pályázati téma („Fény hatására végbemenő folyamatok önszerveződő rendszerekben”) kutatásainak során feltárták, hogy a szupramolekuláris komplexek szerkezete miként befolyásolja a fényelnyelést követő folyamatok sebességét.

Királis szupramolekuláris rendszerek optikai jellemzőit határozták meg a „High-accuracy models in theoretical chemistry and their applications to spectroscopy” c. OTKA-téma keretében.

A Szegedi Tudományegyetem Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszékének kutatóival folytatott együttműködés eredményeként két publikációt közöltek 2008-ban.

Jedlik Ányos pályázat keretében a „Molekuláris célpontok és biomarkerek azonosítása kóros elhízás mechanizmusában és gyógyításában” c. témában (együttműködő partner: Richter Gedeon Nyrt.) a kóros elhízásban szenvedő betegek vérplazma proteomjának és zsírsavprofiljának vizsgálatához szükséges analitikai vizsgálati módszereket dolgoztak ki. Az eredményekről közös publikációban számoltak be.

A „Biomolekulák szerkezetének és kölcsönhatásainak vizsgálata informatikai és tömegspektrometriai módszerek együttes alkalmazásával” c. OTKA pályázat kutatásai során továbbfejlesztették a peptidfragmentáció elméleti leírására alkalmas programot. A módosítás eredményeként a program más típusú tömegspektrométerek (pl. ioncsapda) esetén is alkalmazható. A glikopeptidek tömegspektrumának értékelésére egy új, számítógépes programot dolgoztak ki, amit sikeresen alkalmaztak az AGP enegiafüggő glikopeptidjeinek vizsgálatára.

A „Cinkiont tartalmazó oldatok és felületek szerkezetkutatása” c. OTKA-pályázati téma kutatásainak során megállapították, hogy Pd és PdZn(111) felületeken a szénmonoxid kötési energiája a felületi ötvözetképződés esetén jelentősen csökken. Kimutatták, hogy metanol-víz elegyekben lokális mikroheterogenitások léteznek. Tanulmányozták a H-kötés topológiáját az oldószerrelegyekben többféle módszerrel. Az eredményeket három közleményben publikálták.

Az „Arany-makrociklusok, arany-arany és arany-fém klaszterek előállítása és jellemzése különböző módszerekkel: Röntgendiffrakció, NMR, STM” c. OTKA-pályázat keretében előállított arany makrociklusos vegyület szolvátburkát, valamint az oldószer (nitrometán) szerkezetét elemezték a szupramolekuláris komplexek közötti térrészben. Az elemzés kimutatta, hogy a nitrometán-molekulák a komplex felszínén, a dipólusmomentummal párhuzamosan orientálódnak, majd a második szférától kezdődően fokozatosan a tiszta oldószerre jellemző szerkezeti vonásokat mutatnak. Az ellenionok a dipólusmomentum pozitív irányában dúsulnak. Az eredményeket egy folyóiratcikkben foglalták össze.

Nemzetközi pályázatok

COST P15 projekt keretében (téma címe: „Advanced paramagnetic resonance methods in molecular biophysics”) Cu(II)-komplexek impulzus ESR-vizsgálatait végezték el.

A „H-hidas komplexek fotofizikája” c. témában (együttműködő partner: Max F. Perutz Laboratories Department of Chemistry University of Vienna), egy osztrák-magyar TÉT-szerződés keretében elért eredményekre alapozva, közös ERA-NET Chemistry pályázatot nyújtottak be.

A „Polimer characterisation using electron capture dissociation and collision-induced dissociation multistage mass spectrometry” c. témában (együtműködő partner: Akzo Nobel Ag.), EU FP6-Marie Curie pályázat keretében a polimerek tömegspektrumának elméleti érékeléséhez szükséges módszereket dolgoztak ki, és azokat az ipari megrendelő számára fontos mintákon sikeresen alkalmazták.

A NAP VENEUS pályázat keretében lehetővé vált az önszerveződő aranykomplexek, tömény, vizes nátrium-hidroxid oldatok, valamint a víz-metanol és a víz-formamid elegyek mérése. Az eredményeket két cikkben publikálták.

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

1. Szabó-Plánka T, Gyurcsik B, Nagy NV, Rockenbauer A, Sípos R, Sima J, Melník M: Complexation of 5-fluorosalicylic acid with copper(II): A pH-potentiometric, UV-vis spectroscopic, and electron spin resonance study by the two-dimensional simulation of spectra, JOURNAL OF INORGANIC BIOCHEMISTRY 102(1): 101-109 (2008)
2. Tang L, Shi L, Bonneau C, Sun J, Yue H, Ojuva A, Lee BL, Kritikos M, Bell RG, Bacsik Z, Mink J, Zou X: A zeolite family with chiral and achiral structures built from the same building layer, NATURE MATERIALS 7(5): 381-385 (2008)
3. Costero AM, Colera M, Gavina P, Gil S, Kubinyi M, Pál K, Kállay M: Chiral cyclohexane based fluorescent chemosensors for enantiomeric discrimination of aspartate, TETRAHEDRON 64(14): 3217-3224 (2008)
4. Tárkányi G, Király P, Varga Sz, Vakulya B, Soós T: Edge-to-face CH/pi aromatic interaction and molecular self-recognition in epi-cinchona-based bifunctional thiourea organocatalysis, CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL 14(20): 6078-6086 (2008)
5. Ujj V, Schindler J, Novák T, Czugler M, Fogassy E, Keglevich Gy: Coordinative resolution of 1-phenyl- and 1-naphthyl-3-methyl-3-phospholene 1-oxides with calcium hydrogen O,O '-dibenzoyl-(2R,3R)-tartrate or calcium hydrogen O,O '-di-p-toluyyl-(2R,3R)-tartrate, TETRAHEDRON-ASYMMETRY 19(16): 1973-1977 (2008)
6. Ozohanics O, Krenyácz J, Ludányi K, Pollreisz F, Vékey K, Drahos L: GlycoMiner: a new software tool to elucidate glycopeptide composition, RAPID COMMUNICATIONS IN MASS SPECTROMETRY 22: 3245-3254 (2008)
7. Rokob TA, Hamza A, Stirling A, Soós T, Pápai I: Turning frustration into bond activation: A theoretical mechanistic study on heterolytic hydrogen splitting by frustrated Lewis pairs, ANGEWANDTE CHEMIE-INTERNATIONAL EDITION 47(13): 2435-2438 (2008)

8. Megyes T, Bálint Sz, Bakó I, Grósz T, Kótai L, Pálinkás G: Complete structural characterization of metallacyclic complexes in solution-phase using simultaneously X-ray diffraction and molecular dynamics simulation, JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY 130(29): 9206-9207 (2008)
9. Tunyogi T, Deák A, Tárkányi G, Király P, Pálinkás G: Solvent-assisted spontaneous resolution of a 16-membered ring containing gold(I) showing short Au . . . Au aurophilic interaction and a figure-eight conformation, INORGANIC CHEMISTRY 47(6): 2049-2055 (2008)

VI. A kutatóhely 2008. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA Kémiai Kutatóközpont, Szerkezeti Kémiai Intézet

| | | |
|---|---|-----------------|
| Átlagléttség ¹ : 87 | Ebből kutató ² : 65 | |
| PhD, kandidátus: 20 | MTA doktora: 15 | levelező tag: 1 |
| rendes tag: 1 | | |
| 35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma: 20 | | |
| Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma ³ : 71 | | |
| Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ⁴ : 71 | | |
| Ebből impakt faktoros publikáció magyarul: 1 | idegen nyelven: 61 | |
| nemzetközi együttműködés keretében: 33 | SCI által regisztrált folyóiratban: 62 | |
| összesített impakt faktor ⁵ : 194,907 | összes hivatkozás száma ⁶ : 1892 | |
| összes hivatkozás száma önidézetek nélkül: 1474 | | |
| Magyarul könyv/monográfia ⁷ : - | könyvfejezet: 1 | jegyzet: - |
| Idegen nyelven könyv: - | könyvfejezet: 2 | jegyzet: - |
| Tud. fokozat megszerzése ⁸ : PhD: 4 | MTA doktora: 1 | levelező tag: - |
| rendes tag: - | | |
| Elfogadott találmányok, szabadalmak száma ⁹ : - | ebből külföldön: - | |
| Értékesített szabadalmak száma: - | | |
| Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos | | |
| szóbeli előadások száma ¹⁰ : 44 | posztterek száma: 34 | |
| Tanácsadói tevékenységek száma ¹¹ : - | | |
| Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 6 | Nemzetközi folyóirat szerk. tagság: 8 | |
| Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹² : 13 | | |
| Ebből doktori iskolákban oktatók száma: 4 | Doktori iskolát vezetőik száma: - | |
| Elméleti kurzusok száma ¹³ : 10 | Gyakorlati kurzusok száma: 10 | |
| TDK munkát készítő hallgatók száma: 2 | Diplomamunkát: 3 | PhD-t: 17 |
| Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma ¹⁴ : 607 | | |
| Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ : | 383,8 | MFt |
| Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁶ : 6 | Teljes saját bevétel: 100,0 | MFt |
| Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel ¹⁷ : - MFt | | |
| Az év folyamán művelt OTKA témák száma: 15 | | |
| A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: | | 23,8 MFt |
| Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma ¹⁸ : 2 | | |
| NKFP: 2 | A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: | 65,9 MFt |
| Egyéb: - | A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: | - MFt |
| NFT témák száma ¹⁹ : - | A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: | - MFt |
| Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma ²⁰ : 1 | | |
| EU forrásból: 1 | A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: | 5,6 MFt |
| Egyéb: - | A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: | - MFt |
| Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma: 20 | | |
| A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: | | 22,6 MFt |
| Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány ²¹ : - MFt | | |

VI/a. Az MTA KK Szerkezeti Kémiai Intézet 2008. évi tevékenységének egyéb bemutatható jellemzői

- Bejelentett szabadalmak, és egyéb szabadalmi jellegű alkotások száma:
 - a Magyarországon bejelentettek
 - a nem Magyarországon bejelentettek
- A kutató nők száma: 16
 - vezető beosztásokban: 2
 - nem vezető beosztásokban: 14
- A mobilitással kapcsolatban az intézetből az állásukat megtartott, munkaviszonyban levő diplomások közül hat hónapnál hosszabb időre távollevők száma: 2
 - Magyarországon:
 - egyetemen, kutatóintézetekben: 1
 - gazdasági társaságnál
 - Nem Magyarországon:
 - egyetemen, kutatóintézetekben: 1
 - gazdasági társaságnál
- az adott intézethez érkező kutatók száma: 1
 - 1-6 hónap időtartamra
 - Magyarországról
 - nem Magyarországról: 1
 - 6 hónapnál hosszabb időre
 - Magyarországról
 - nem Magyarországról
- Vállalati kapcsolatok
 - jelentősebb ipari partnereik felsorolása és a kapcsolat típusa: pl. közös K+F, vagy kutatási megbízás, stb. teljesítése:
K+F kutatási megbízás:
Richter Gyógyszergyár Nyrt., TEVA Gyógyszergyár Zrt.
 - az intézet holdudvarába tartozó kisvállalkozások száma: 10
K+F kutatási megbízás: Cyclolab Kft., ELMŰ-ÉMÁSZ Kft., Ercom Kft., Glycom A/S Kft., Glycom Hungary Kft., Izotóp Kft., Infarmatik Bt., LuminoChem Kft., Ubichem Kft., Waters Kft.
- A társadalmi párbeszéd eredményei:
 - Az általános tudománynépszerűsítő közlemények száma: 4
 - Az intézet tevékenységét népszerűsítő rendezvények száma: 1

Az MTA KK Szerkezeti Kémiai Intézetének kiemelten sikeres kutatási területe 2008-ban

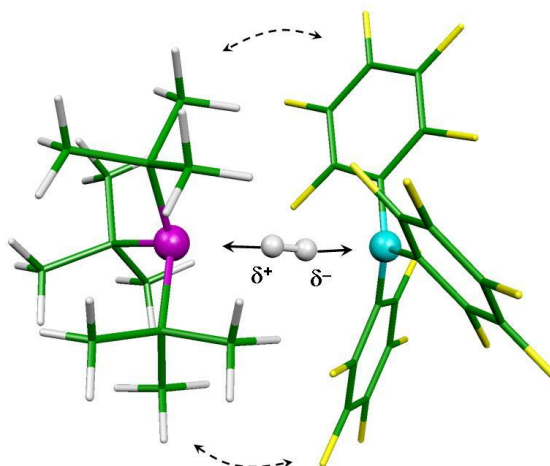
Reakciómechanizmusok elméleti tanulmányozása

Az MTA KK Szerkezeti Kémiai Intézetében kiemelten fontosnak ítélik azokat az elméleti kutatásokat, amelyek gyakorlati jelentőségű kémiai reakciók mechanizmusának feltárására irányulnak. Ezeknek a tanulmányoknak az alapvető céljai a következők: a reakciók fontosabb elemi lépéseinek molekuláris szintű jellemzése, a reakciók kimenetelét befolyásoló tényezők feltárása. Mindehhez a modern kvantumkémiai módszerek és a korszerű számítógépes eszközök közös alkalmazása kínál lehetőséget. Ésszerű modellek megválasztásával és a kapcsolódó számítások elvégzésével/értékelésével olyan ismeretekhez juthatunk, melyek felhasználhatók meglévő szintetikus módszerek továbbfejlesztésében, illetve új eljárások kidolgozásában. Az Elméleti Kémiai Osztály kutatói az elmúlt években számos hazai és nemzetközi együttműködés keretében végeztek sikeres kutatásokat különböző felületkémiai, légkörkémiai és organokatalitikus reakciók, illetve a széndioxid kémiai átalakítását célzó katalitikus folyamatok mechanizmusának leírására.

A vizsgált reakciók közül az elmúlt évben egy újonnan felfedezett, különleges reaktivitást mutató rendszer került előtérbe. Egy kanadai kutatócsoport nemrégiben arról számolt be, hogy nagy térkitöltésű szubsztituensekkel ellátott foszfin-borán párok enyhe körülmények között (szobahőmérsékleten, atmoszférikus nyomáson) képesek a molekuláris hidrogén heterolitikus bontására és újraegyesítésére. A vegyületekről az is bebizonyosodott, hogy hidrogénezési reakciókban, pl. iminek aminokká történő átalakításában, katalizátorként használhatók. Ezek az eredmények azért meglepőek, mert eddigi ismereteink szerint hatékony hidrogénaktiválási folyamatok csak átmenetifém-centrumok jelenlétében valósíthatók meg. A rendszer sajátos reakciókészsége a reaktánsok méretével hozható összefüggésbe. Míg a klasszikus Lewis sav-bázis párok erős datív kötés létrejöttével stabilizálódnak, addig az említett foszfin-borán párok esetében ez a folyamat sztérikusan gátolt, vagyis az oldatban reaktív sav/bázis centrumok ("frusztrált Lewis-párok") találhatóak. Tekintve, hogy a katalitikus hidrogénezés gyakori eljárás mind a vegyiparban, mind pedig a szintetikus laboratóriumokban, a felfedezés komoly gyakorlati jelentőséggel bír, ugyanis gazdaságosabb és környezetkímélőbb módszerek kidolgozását teszi elérhetővé.

A heterolitikus hidrogénbontás mechanizmusának tisztázásához az intézet kutatói kvantumkémiai számításokat végeztek. Azt találták, hogy az eredeti elképzelés, miszerint a hidrogénmolekulát első lépésben a borán aktiválja, nem állja meg a helyét. A számítási eredmények alapján egy olyan új modellt javasoltak, mely összhangban van a kísérleti tapasztalatokkal, és nagymértékben kiegészíti a "frusztrált Lewis-párok" eredeti koncepcióját. A modell szerint a terjedelmes sav/bázis molekulák a reakcióelegyben gyengén kötött adduktumot képeznek, ami lehetővé teszi az aktív centrumoknak a hidrogénmolekulával történő kölcsönhatását (lásd az ábrát). Az egyidejű hozzáférést a komplex laza szerkezete biztosítja, ami a másodlagos intermolekuláris kötőerőknek köszönhető. A szinergikus kölcsönhatás következtében a (H-H)-kötés fellazul és heterolitikus módon felhasad. A modell további lényeges eleme, hogy a frusztrált Lewis-pár energetikailag feszült rendszernek tekinthető, aminek következtében a hidrogénbontás kinetikailag és termodinamikailag is kedvezővé válik. Az említett eredményeket az *Angewandte Chemistry International Edition* c.

folyóiratban VIP (very important paper) cikknek minősítették. A publikáció jelentőségét a Chemical and Engineering News c. folyóirat külön ismertetésben méltatta.



A kutatások következő fázisában a modell alkalmazhatóságát kiterjesztették más, újonnan előállított, frusztrált Lewis-párok reaktivitásának értelmezésére is. Megmutatták, hogy a sav-bázis párok olefinekre történő addíciója hasonló mechanizmus alapján megy végbe, és a kísérletileg észlelt regioszelektivitás is könnyen értelmezhetővé válik. Kiderült továbbá, hogy az iminek katalitikus hidrogénezése során nemcsak az imin-borán pár alkot a hidrogénbontás szempontjából reaktív rendszert, hanem a termék amin is részt vehet a hidrogén heterolitikus aktiválásában, tehát autokatalitikus folyamatról van szó.

A frusztrált Lewis-párok reaktivitásának kísérleti és elméleti tanulmányozása az elmúlt egy-két évben rendkívül aktív kutatási területté vált. Több csoportnak is sikerült olyan új rendszereket tervezni és szintetizálni, melyek reverzibilis módon aktiválják a hidrogént. További intenzív vizsgálatok szükségesek azonban ahhoz, hogy más telítetlen vegyületek (alkének, aldehidek, ketonok) fémmentes körülmények között történő hidrogénezése is lehetővé váljon. Az intézetben mind szintetikus, mind pedig elméleti téren folynak ilyen irányú kutatások.

I. Az intézet fő feladatai a beszámolási évben

Az intézetben 2008-ban is olyan komplex kutatási témákat műveltek, amelyekben az anyagtudományi és anyagtechnológiai, valamint a környezetkémiai 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 a közöttük levő kapcsolatok részleteit. 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

Poli-etilén-tereftalát felületét kezelték nitrogénionokkal, plazmaimmerziós ionimplantációs módszerrel. Megállapították, hogy a kezelés hatására a minta felülete jelentősen átalakult: a nitrogén beépülését, az O/C arány csökkenését és a C 1s csúcs tömbi plazmonvesztési energiájának növekedését észlelték. A felületi érdesség és keménység megnőtt, a rugalmas modulus pedig csökkent. Olyan kezelési paraméter-együttest találtak, amelynél a kopásállóság kb. négyszeresére nőtt.

Poli-tetrafluor-etilén felületét gyorsatomsugaras módszerrel módosítva a felületi fluortartalom nagymértékben lecsökkent. Raman vizsgálatokkal bizonyították, hogy amorf szénszerű szerkezet alakult ki. Csökkent a nedvesedési peremszög, megnőtt a felületi energia és megnőtt a felület kopásállósága.

Továbbfejlesztették a röntgenfotoelektron-spektrumok kvantitatív kiértékelésére szolgáló XPS MultiQuant programot, így lehetővé vált a gyakorlatban előforduló durva felületű anyagokon (mikrokristályos, szemcsés anyagok, rovátkolt felületek) előforduló rétegek vastagságának pontosabb kiértékelése. Strukturált szilícium és alumínium mintákon tesztelték a modell és a program alkalmazhatóságát.

Kutatói ráfordítás: 2 fő, ebből intézeti állományban: 2 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 12 M Ft, ebből pályázati forrás: 4 M Ft.

Egyszerű és kompozit kerámia-bevonatok kialakítása

Egy-, illetve kétkomponensű oxidokból (Al_2O_3 , $\text{Al}_2\text{O}_3+\text{TiO}_2$, mullit) álló, valamint oxidmátrixba ágyazott SiC és Si_3N_4 szemcsékből álló nanokompozit bevonatokat hoztak létre

plazmaszórással fém és nemfém felületeken. Vizsgálták a bevonatok kémiai és fázisösszetételét, szerkezetét, adhézióját és egyéb fizikai tulajdonságait. További, a kompozitréteg mátrixába beágyazni kívánt, speciális adalék anyagokat így félvezető tulajdonságú SiC szemcséket, és magas Curie ponttal rendelkező ferriteket állítottak elő RF termikus plazmareaktorban. A kutatások anyagi fedezetét döntő részben NKTH pályázat biztosította.

Kutatói ráfordítás: 10 fő, ebből intézeti állományban: 7 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 40 M Ft, ebből pályázati forrás: 35 M Ft.

Fém-poligalakturonát komplexek szintézise és vizsgálata

A fémhiányos állapot kezelésére alkalmas, poligalakturonsav hordozóhoz kötött esszenciális fémek komplexeinek szerkezetét, az egyes mikrokozonyezetek előfordulásának alakulását Mössbauer spektroszkópiával tanulmányozták. E vizsgálatok is alátámasztották a vashiányos anémia kezelésére kifejlesztett Ferrocomp tablettá hatásosságát, melyet a Kémiai Kutatóközpont licence alapján az In Vitro Kft gyárt és forgalmaz.

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

Funkcionális szemcsés anyagok előállítása, formálása és jellemzése

A BioPowders elnevezésű nemzetközi projekt keretében vizsgálták, hogy a katalizátorhordozóként előállított nanoszerkezetű kitozán mikrogömbök milyen mértékben alkalmazhatóak enzim rögzítésére, és miképpen befolyásolják az előállított hordozós biokatalizátor aktivitását. Bizonyították, hogy az így kifejlesztett nanoszerkezetű biokatalizátor hordozók biotechnológiai célra alkalmasak.

Ipari szempontból fontos eredményeket értek el az elektronikai alkatrészek köpenyében alkalmazható funkcionális szemcsés anyagok előállításában, illetve tulajdonságaik javításában: megfelelő morfológiájú és mágneses tulajdonságú ferritporokat állítottak elő. Fluidizációs granulálással javították a kerámiai alapanyagok reológiai tulajdonságait. Vizsgálták a talajszennyezők transzportfolyamatait, és elemezték a talajok tulajdonságait alapvetően meghatározó részecskeméret eloszlást. A lézeres szemcseméret analízis szabványosításához elővizsgálatokat végeztek. Inert töltetes gejzir szárítóban fehérje típusú hatóanyaggal kompozitokat készítettek kitozán hordozó alkalmazásával.

Kutatói ráfordítás: 3 fő, ebből intézeti állományban: 2 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 9,6 M Ft, ebből pályázati forrás: 5,3 M Ft.

Nanoszerkezetű amfifil polimer kotérhálók és alkalmazásuk

Az amfifil kotérhálók és hidrogélekkel kapcsolatos kutatásaik egyik vonulata a gyógyszerhatóanyag felvételére és leadására, valamint élesztő sejtek immobilizálására alkalmas gélekre irányult. Különböző fémionok megkötésének tanulmányozása céljából vizes rendszerekből állítottak elő komplexképző poli(N-vinil-imidazol)t tartalmazó amfifil kotérhálókat. AFM vizsgálatokkal felderítették ezek különleges nanofázisú szerkezetét, valamint meghatározták fémion felvételüket.

Poli(metakrilsav)-l-poliizobutilén kotérhálók duzzadását vizsgálták Ca²⁺, Cu²⁺ és La³⁺ tartalmú vizes oldatokban. Azt találták, hogy szemben a hagyományos homopolimer polielektrolit gélekkel, ezekben a rendszerekben a gél ne esik össze. Etoxietyl-akrilát és

etoxietil-metakrilát monomerekkel új szintézismódszert dolgoztak ki amfifil kotérhálók előállítására. Elvégezték a kotérhálók termikus analízisét, valamint IR spektroszkópiával tanulmányozták azok hidrolízisét, termolízisét és duzzadási tulajdonságait.

Poli(N,N-dimetil-akrilamid)-l-poliizobutilén amfifil kotérhálókkal sikeresen állítottak elő nanoméretű fémezüstöt tartalmazó nanohibrid anyagokat. UV-VIS spektrofotometriás vizsgálatokkal egyértelműen igazolták az ezüst nanorészecskék képződését.

Kísérleteket tettek újfajta, hőre érzékeny, „intelligens” amfifil kotérhálók szintézisére poli(N,N-dietil-akrilamid) mint hidrofil és poli(dimetil-sziloxán), illetve poliizobutilén, mint hidrofób komponensek felhasználásával. Az ilyen anyagok széles körben alkalmazhatók a gyógyászatól, a biotechnológián át a szenzorokig bezárólag.

Kutatói ráfordítás: 5 fő, ebből intézeti állományban: 5 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 25 M Ft, ebből pályázati forrás: 4 M Ft.

Jól definiált szerkezetű polimerek szintézise gyökös polimerizációval és anyagszerkezeti vizsgálatuk

A kilencvenes évek közepén kidolgozott kvázielő gyökös polimerizációs eljárásokkal olyan komplex szerkezetű polimerek gazdaságos és környezetileg előnyös előállítására nyílt lehetőség, amelyek felülmúlják számos eddig használt polimer fizikai és kémiai tulajdonságait. Különböző tulajdonságú monomerek kvázielő gyökös polimerizációját kísérelték meg egy környezetbarátnak tartott, halogénmentes oldószerben. Eredményeik nagyon biztatóak; az adott módszerrel csökkenthető a polimerek előállításakor okozott környezetterhelést.

Új szintézis módszert dolgoztak ki hiperelágazásos polimerek előállítására. Ennek alapján kereskedelmi forgalomban kapható monomerek (sztírol és akrilátok) felhasználásával is, egy lépésben előállíthatók nagyszámú funkciós csoporttal rendelkező hiperelágazásos polimerek. Az itt szerzett tudást fogászati alkalmazásokban és ipari együttműködésekben is megpróbálják kamatoztatni: egy külföldi vegyipari céggel több éve folytatnak kutatási együttműködést az adott témakörben.

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

Az előállított polimereket minden esetben modern analitikai módszerekkel, például lézer fényszóródás detektorral felszerelt gélpermeációs kromatográfiával és NMR spektroszkópiával vizsgálták.

Kutatói ráfordítás: 3 fő, ebből intézeti állományban: 2 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 15 M Ft, ebből pályázati forrás: 3 M Ft.

Karbokationos polimerizációs kutatások

Kvázielő karbokationos polimerizációs kutatásaik a polimerizáció mechanizmusának, a kapott polimerek módosítási reakcióinak, szerkezetének és tulajdonságainak a vizsgálatára irányultak. Vizsgálták egyes különleges adalékanyagok hatását az izobutilén polimerizációjára. Megállapították, hogy e vegyületek jelenlétében, karbokationos körülmények között, a poliizobutilén láncokon nagymértékben alakulnak ki láncvégi kettőskötések.

A láncvégi kettőskötést tartalmazó poliizobutiléneket sikeresen funkcionalizálták tovább, „tiol-én” reakcióval. A módszer számos funkciós csoport bevitelét teszi lehetővé egy addíciós lépésben.

A környezetileg előnyös, „zöld” polimer kémiát megcélzó kutatásaikat is tovább folytatták. A reakciók kivitelezésekor szobahőfokon, klórozott oldószerek használata nélkül állítottak elő különböző szerkezetű polisztirolokat, és meghatározták az adalékanyagok szükséges minimális koncentrációját is.

Egy korábban nemkívánatos mellékreakció kihasználásával sikeresen állítottak elő hiperelágazásos polisztirolt. Felderítették és igazolták, hogy az elágazó szerkezetet a láncvégi karbokation és a láncmenti fenil csoportok között lejátszódó intermolekuláris Friedel-Crafts alkilezés eredményezi. Optimalizálták a reakciókörülményeket, és felderítették, hogy miként szabályozhatók a hiperelágazásos polimerek szerkezete és tulajdonságai.

Kutatói ráfordítás: 4 fő, ebből intézeti állományban: 2 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 10 M Ft, ebből pályázati forrás: -.

Poliolefinok degradációja és stabilizálása

Tanulmányozták a különböző katalizátorokkal gyártott polietilén és polipropilén degradációját és a stabilizálást befolyásoló tényezőket, feldolgozási és alkalmazási körülmények között. Vizsgálták, hogy a katalizátor típusa és a gyártási paraméterek miként befolyásolják a polietilén és a polipropilén jellemzőit. Összefüggést állapítottak meg a polimer por jellemzői és a feldolgozás során végbemenő kémiai folyamatok között. Megállapították, hogy a polietilén feldolgozása során lejátszódó reakciókat elsősorban a foszfortartalmú antioxidánsok típusa határozza meg. Modellkísérletek segítségével feltárták az egyes foszfortartalmú antioxidánsok hatékonysága közötti különbségek okát. Megállapították, hogy a hatékonyságot a stabilizátor molekula reakcióképessége és saját termikus stabilitása egyaránt befolyásolja. Elemezték a savmegkötő hatású adalékok szerepét a stabilizátorok hatékonyságában és fogyásában a polietilén feldolgozása során. Megállapították, hogy a teljes adalékcsomag összetételével változik a hatás. A TVK-val, mint poliolefin gyártóval együttműködésben vizsgáltak polietilén csövekben az antioxidánsok hidrolitikus stabilitását. A kutatás eredményei közvetlenül hasznosíthatók a különböző poliolefinok adalékrendszerének kidolgozásában, javítva ezzel a termékek versenyképességét.

Kutatói ráfordítás: 4 fő, ebből intézeti állományban: 3 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 12 M Ft, ebből pályázati forrás: -.

Természetes és szintetikus polimerek és társított rendszereik

Különböző polimerek és társított rendszereik szerkezet-tulajdonság összefüggéseit és a terhelés hatására végbemenő deformációs folyamatokat tanulmányozták. Ennek keretében vizsgálták a különböző szemcseméretű töltőanyagot tartalmazó PP/faliszt kompozitok deformációs és tönkremeneteli mechanizmusát. Megállapították, hogy a kompozitok merevsége növekszik a töltőanyag-tartalommal, a kapcsolóanyagként alkalmazott funkcionalizált polimer típusa és mennyisége azonban nem befolyásolja különösebben a modulus értékeket. Az egyéb mechanikai jellemzők azonban nagymértékben függenek az alkalmazott kapcsolóanyag (maleinsav-anhidriddel módosított polipropilén) típusától és mennyiségétől. A nagyobb molekulatömegű és kisebb funkcionalizálású kapcsolóanyag használata előnyösebb a szilárdság és a törési ellenállás szempontjából egyaránt.

További vizsgálatokat végeztek és jelentős haladást értek el a delaminációval előállított rétegszilikát nanokompozitok tanulmányozásában. Reológiai jellemzők vizsgálatával tanulmányozták a kompozitok szerkezetét. Megállapították, hogy a rétegszilikát nanokompozitokban az exfoliáció hatására kialakuló hálószerkezet a relaxációs idő növekedését okozza, amely igen érzékenyen nyomon követhető reológiai vizsgálatokkal. Modellszámításokkal sikerült olyan paramétereket meghatározniuk, amelyek alkalmasak a szerkezetváltozás kvantitatív jellemzésére. A természetes polimerek kutatása során a cellulóz-acetát és más hasonló szerkezetű természetes alapú polimerek DMTA spektrumán meghatározták a jelentkező α , β , γ -átmenetekhez rendelhető csoportokat, illetve molekularészeket.

Kutatói ráfordítás: 7 fő, ebből intézeti állományban: 4 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 19 M Ft, ebből pályázati forrás: 5,1 M Ft.

Környezeti kémiai kutatások

Műanyagok újrahasznosítását megalapozó kutatások

Y típusú zeolitok alkalmazhatóságát vizsgálták poliamid 6,6 és akrilnitril-butadién-sztirol kopolimer pirolízises újrahasznosítására. Megállapították, hogy e polimerek környezetvédelmi szempontból aggályos, nitrogéntartalmú vegyületekre vezető hőbomlását a zeolitok nem befolyásolják számottevő mértékben. Ugyanakkor a zeolitok hatékonyan alakították át a hőbomlás termékeit. Azt tapasztalták, hogy a protonos Y zeolitok a pirolízis termék nitrogénmentesítésére használhatók, a nátriumtartalmú zeolitok pedig a pirolizátumot szennyező halogéntartalmú vegyületek eltávolítására alkalmasak. Utóbbiak aktivitása függ a halogén-szén kötés típusától.

Továbbfolytatták a PVC célzott degradatív átalakításának tanulmányozását újabb, környezetileg előnyös újrafelhasználási lehetőségek kutatása céljából. A hőstabilizátorként használt cink-sztearát adalékanyag hatásának vizsgálata során megállapították, hogy ez nagymértékben gyorsítja a lebomlást, és egyidejűleg poliének kialakulását a polimer láncban. Ez lehetővé teszi a PVC hulladékok olyan átalakítását, amelynél a reaktív kettős kötések tartalmazó PVC másodlagos, újrahasznosított termékek kiindulási anyaga lehet.

Kutatói ráfordítás: 4 fő, ebből intézeti állományban: 4 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 32 M Ft, ebből pályázati forrás: 2,4 M Ft.

Biomassza anyagok hasznosítását megalapozó kutatások

Új környezetkímélő eljárással (lakkáz enzimmel és violursav adalékkal) fehérített rostpépeket tanulmányoztak. Módszert dolgoztak ki a rostpépek maradék lignintartalmának meghatározására, "in-situ" pirolízis-gázkromatográfia-tömegspektrometria alkalmazásával. Kimutatták, hogy a lignin monomerek mennyiségi arányai jelentősen megváltoznak a rostpép és a maradék lignin minták pirogramjaiban. Megállapították, hogy az enzimes biofehérítés során hasonló változások történnek a lignin funkciós csoportjaiban, mint a cellulózgyártás Kraft eljárása során.

Energetikai célokra alkalmazható biomasszák (szalmák, kukoricaszár, cirok, rizshéj, abesszin mustár) hőbomlási tulajdonságait vizsgálták. Mint ismeretes, a hőbomlás az égés egyik fő reakciója, amellet számos ipari folyamatban is fontos szerepet játszik. Egy olyan reakciókinetikai modellt alkalmaztak, amely viszonylag kevés ismeretlen paraméterrel megbízhatóan írja le e bonyolult anyagok viselkedését. Annak ellenére, hogy a vizsgált mintasor főbb

biomassza alkotóiban, valamint az ásványi-anyag tartalmában jelentős különbségek voltak, sok közös vonást találtak a kinetikai viselkedésükben.

Kutatói ráfordítás: 3 fő, ebből intézeti állományban: 2 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 23 M Ft, ebből pályázati forrás: 2,6 M Ft.

Légkörkémi kutatások

Meghatározták az acetyl-fluorid OH-gyökkel végbemenő gázfázisú elemi reakciójának sebességi együtthatóját és fotobomlási kvantumhatásfokát. Megállapították, hogy a fluor-szubsztitúció erős negatív induktív hatást gyakorol a reaktivásra, megadták a hatás mértékére jellemző csoportadditivitási együttható értékét. A fotobomlás kvantumhatásfoka lényegesen kisebb egynél, ami a fotofizikai kioltási folyamatok jelentőségét mutatja. Az acetyl-fluorid a HFC-152a (CH_3CHF_2) freonhelyettesítő anyag légköri lebomlása során keletkezik. Eredményeik alapján arra a következtetésre jutottak, hogy az acetyl-fluorid légköri élettartama viszonylag rövid és így üvegházhatása nem jelentős.

Élettartammérésekkel meghatározták, hogy légköri körülmények között a szingulett gerjesztett acetont milyen sebességgel oltja ki az oxigén. A folyamat sebességi állandója viszonylag kicsi, ami arra utal, hogy a reakció spin-tiltott, hőmérsékletfüggése pedig azt jelzi, hogy a folyamatnak negatív aktiválási állandója van.

Egyszerűen kivitelezhető eljárást dolgoztak ki a 3,3',5,5'-tetra-(trifluorometil)-benzofenon előállítására. Ennek a molekulának rendkívül érdekes fotokémiai-kinetikai tulajdonságai vannak, amelyek miatt a környezeti fotokémiában is valószínűleg alkalmazásokra is.

Kutatói ráfordítás: 4 fő, ebből intézeti állományban: 4 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 38 MFt, ebből pályázati forrás: 7MFt.

Környezeti elektrokémia

A környezetben felhalmozódó platina koncentrációjának mérésére szolgáló nagyérzékenységű elektroanalitikai módszer fejlesztettek ki. Megállapították, hogy aranyra híg oldatokból elektromos polarizáció nélkül is leválik kis mennyiségű platina az egyensúlyi fémleválás potenciáljánál pozitívabb potenciálon.

Az anionok adszorpciójának, az elektrokémiai kettősréteg szerkezetének jellemzése végett elektrokémiai alpméréseket végeztek a platinacsoport egykristályain, biner elektrolit-oldatokban. Kimutatták, hogy az impedanciaspektrumokkal jellemezhető az oldat anionjainak mozgási sebessége a külső és belső Helmholtz sík között.

Korábban eljárást dolgoztak ki femtoamper nagyságrendű áramok gyors mérésére. A mérőkészüléket továbbfejlesztették és az alkalmassá vált a különösen nagy érzékenységű, ultramikro-elektrodokon végzett mérésekre is.

Kutatói ráfordítás: 4 fő, ebből intézeti állományban: 4 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 40 M Ft, ebből pályázati forrás: 4.5 MFt

Olajszennyezések monitorozása geoelektromos módszerrel, meglévő olajszennyezések kárenyhítése

Előkísérleteket folytattak lokális olajszennyezések felkutatására a talajellenállás feltérképezésén alapuló geoelektromos módszerrel. Ezzel párhuzamosan kidolgozták a meglévő olajszennyezések helyszíni kárenyhítését szolgáló technológiát a majdani hasznosító MOL NyRt. megbízásából. Ennek keretében részletes olajvizsgálatokat (GC/MS, HPLC, UV/VIS) végeztek a hazánkban előforduló olajtípusok körében, részben a technológia kidolgozása, részben az ennek során felmerülő analitikai feladatok megoldásának optimalizálása érdekében. Vizsgálták az olajtípusok talajról történő laboratóriumi extrakciójának lehetőségeit, és előkészítették a talajanalitikai vizsgálatokat.

Kutatói ráfordítás: 2 fő, ebből intézeti állományban: 2 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 12 M Ft, ebből pályázati forrás: -.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Az AKI kutatói 2008-ban is számos hazai kutatóhellyel dolgoztak együtt sokféle kutatási témában. Különösen intenzívek voltak kutatási együttműködések az MTA intézeteivel, így a Kémiai Kutatóközpont másik három intézetével, valamint nanotechnológiai témában a Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Kutatóintézetrel.

Az intézet munkatársai a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyész- és Biomérnöki Karán és az Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Karán tartottak graduális és posztgraduális előadásokat, vezettek szemináriumokat és laborgyakorlatokat. Az oktatáson kívül sokrétű kutatási kapcsolatot is ápolnak velük: a BME-vel cellulóz alapú bioetanol gyártás, az ELTE-vel polimertartalmú felületi nanostruktúrák szerkezetvizsgálata, PP és PA nanokompozitok szerkezet/tulajdonság összefüggéseinek megállapítása területén. A Semmelweis Egyetemmel humánbiológiai témákban, a Pécsi Egyetem Általános Orvostudományi Karával orvosi célú PU fejlesztésében működtek együtt.

Az intézet a Pannon Egyetem Műszaki Informatikai Karának Műszaki Kémiai Intézetével közös professzori laboratóriumot működtet, és funkcionális nanorészecskék témában folytat kilenc publikációban megmutatkozó gyümölcsöző együttműködést. Az Alkalmazott Polimer Fizikai Kémiai Osztály egy szakmai egységet alkot a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszékével. Ugyancsak a két egyetem kutatóival közösen tanulmányozzák a biomasza hasznosítás kémiai alapfolyamatait.

Külföldi partnerekkel formális kétoldalú kutatási együttműködések keretében az alábbi témákban dolgoztak együtt:

Plazmakémiai folyamatokat modelleztek, és termodinamikai számítások készültek a Si/C/N/O/B/H anyagrendszerre, Magyar - orosz MTA kétoldalú megállapodás keretében a moszkvai Általános és Szerzetlen Kémiai Intézetrel közösen.

Tetraammincink(II)-diperanganátot szintetizáltak, és meghatározták szerkezetét XRD és vibrációs spektroszkópiás módszerrel, MTA-INSA Akadémiai Együttműködési szerződés keretében az indiai Jodhpur Egyetemmel.

Energetikai célokra alkalmazható biomasza anyagok hőbomlási tulajdonságait határozták meg egy Magyar - kínai Tét projekt keretében a Dongying városban működő China University of Petroleummal együttműködve.

Légkörkémiail témában ARCUS / PhyCAFoR egyezmény keretében a Lille-i Egyetemmel közös PhD témát vezettek. Kinetikai és fotokémiai kísérletekkel meghatározták a 2-butanon fotobomlási kvantumhatásfokának hőmérséklet- és nyomásfüggését, Magyar - francia TÉT együttműködésben az orleans-i Égési és Reaktív Rendszerek Laboratóriummal.

A klímaváltozás és a légkör kémiája kapcsolatával foglalkozó Magyar - lengyel TÉT együttműködésben javaslatot tettek az acetone légköri fotobomlásának molekuláris mechanizmusára. Elemi reakciók kinetikáját és mechanizmusát vizsgálva meghatározták a brómatom és néhány szerves molekula elemi reakciójának sebességi együtthatóját és potenciálfelületét. A munkát Magyar - lengyel Akadémiai Együttműködés keretében a Wrocław-i Egyetemmel közösen végezték.

Több különböző rendszeren mutatták meg, hogy az elektrokémiai kettősréteg elektromos szempontból nem ideálisan kapacitív. A jelenség okait MTA - DFG együttműködés keretében a német Ulmi Egyetemmel vizsgálták.

IV. A fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

Hazai pályázatok

Az intézet kutatói 2008-ban a következő OTKA illetve OTKA-NKTH pályázatokon dolgoztak, és az alábbi figyelemre méltó eredményeket érték el:

- Biomassza anyagok erőművekben történő jobb hasznosítását elősegítő alapismereteket nyertek (K-72710).
- Nitrogén- és halogéntartalmú polimerek pirolízisének zeolit katalizátorokon módosított termékeit elemezték, és értelmezték a bekövetkezett kémiai átalakulásokat (K-68752).
- Meghatározták a CH₃CO- és CH₃C(O)CH₂-gyökök oxigénmolekulával végbemenő elemi reakciójának kinetikai paramétereit (K-68486).
- Poli-tejsav alapú minták felületi összetételét és szerkezetét jellemezték XPS módszerrel (K-68120).
- Polipropilén (PP) és keményítő alapú nanokompozitokban vizsgálták a határfelületi kölcsönhatások szerepét a kompozitok szerkezetének alakulásában. Megállapították, hogy a legkedvezőbb tulajdonságú kompozit előállításához a töltőanyag/glicerin/víz arányt pontosan kell meghatározni (K-67936).
- Kimutatták, hogy elektrokémiai úton előállítható platina monoréteggel borított aranyfelület. Jellemezték az adszorpció kinetikáját olyan esetben, amikor egy biner elektrolit mindkét ionja adszorbeálódik (K-67874).
- Műszaki műanyagok, mint polietilén-tereftalát és poli-tetrafluor-etilén felületét módosították plazmaimmerziós ionimplantációs és gyorsatomsugaras módszerrel, és meghatározták a felületi kémiai, nanomechanikai és tribológiai változásokat (K-67741).
- Környezetkímélő eljárással fehérített rostpépek maradék lignintartalmát, valamint a lignin összetételében biofehérítéskor bekövetkező változásokat határozták meg (K61504).
- A specifikus adszorpció során az adszorbeált molekulák között lejátszódó töltésátlépési folyamatokról tettek megállapításokat (T-45888).
- Hiperelágazásos polimerek szerkezete és a kiindulási lineáris polimer karok molekulatömege közötti összefüggést állapították meg, valamint új módszert dolgoztak ki ilyen polimerek előállítására (T-48409).

- PP/faliszt kompozitok vizsgálata alapján megállapítottuk, hogy a kompozitok merevsége növekszik a töltőanyag tartalommal. A kapcsolóanyagként alkalmazott funkcionizált polimer típusa és mennyisége azonban nem befolyásolja különösebben a merevséget (F-68579).
- Szabályosan váltakozó szerkezetű amfifil polimer kotérhálók és multifunkciós inimerék alkalmazásával új hiperelágazásos és csillag polimerek szintézisét dolgozták ki (F-61299).

Az intézet kutatói egyéb hazai kutatási pályázatokban a következő eredményeket érték el 2008-ban:

- Felszerelték és hidegüzemben kipróbálták a festőüzemekben levegőtisztításra használt aktív szén adszorbensek helyszíni regenerálására kifejlesztett technológia mérő és folyamatszabályozó rendszerét (GVOP-3.1.1./2004-05-0153/3.0).
- Nanoméretű, oxid- és nemoxid típusú kerámia-bevonatok kialakítását vizsgálták atmoszférikus plazmaszórással. Előállítottak szilícium-karbid nanoszálakat és nanocsöveket (OMFB-00252/2007).
- Vizsgálták különböző fémek alkalmazhatóságát ipari hulladékok feldolgozhatóságára (JÁP_TSZ_P0400808).
- Előre meghatározott tulajdonságú poli(etilén-imin) állítottak elő (DermaVi_HIKC05 Asbóth program).
- Megállapították, hogy az antioxidáns- és elempótlás nélkülözhetetlen az egészséges élethez, de a koncentrációtartomány tág, és függ az egyed genetikai adottságaitól. A bioaktív vegyületek hosszas, kontrollálatlan fogyasztása azonban kontraindikált (ETT 012/2006).
- Meghatározták a prosztatatarakos és jóindulatú prosztatata-megnagyobbodásban szenvedő férfiakban a szérum és a plazma immun- és redox-paramétereit, Zn-protoporfirin/protoporfirin koncentrációit, dimedonnal reakcióba lépő kötött HCHO-koncentrációját, össz-scavenger-kapacitását, fémiontartalmát és szelénkoncentrációját (ETT 354/2006).

Nemzetközi pályázatok

Az intézet kutatói az alábbi EU pályázatok kidolgozásában vettek részt 2008-ban:

- Alifás ketonok és sav-haloidok légköri lebomlására állapítottak meg kinetikai és fotokémiai paramétereiket (GOCE-CT-2004-505390-SCOUTO3).
- Enzimek rögzítésére alkalmas, makro-, mikro- és nanoszemcsés kitozán hordozó részecskék előállítására dolgoztak ki módszereket (MRTN-CT-2004-512247).

Egyéb nemzetközi vagy külföldi forrásból 2008-ban művelt témák:

- Új típusú multifunkciós polimerek kutatásán dolgoztak a DuPont (USA) Research Award támogatásával.
- Mágneses nanorészecskéket tartalmazó szénhagymákat készítettek RF plazmában, a Varsói Egyetem Kémia Tanszék munkatársaival együttműködésben.
- Különleges nanoporokat állítottak elő RF termikus plazmában, a BASF céggel (Németország) együttműködve.
- Széles nemzetközi együttműködésben a PP és PA nanokompozitok szerkezet/tulajdonság összefüggéseiről tettek megállapításokat, a Twente Egyetem (Hollandia), az Inha Egyetem (Korea) és a Szlovák Tudományos Akadémia Polimer Intézete kutatóival közösen. Polimerek stabilizálásán a francia Clariant Huningue S.A. céggel dolgoztak együtt.

- A Volkswagen Alap támogatásával fotofizikai témán dolgoztak a göttingeni Max-Planck-Intézet kutatóival. Megállapításokat tettek a dimetilamino-adenin fotofizikai sajátságairól.
- Biomassza anyagok hasznosítását, faszén széndioxiddal történő elgázosítását tanulmányozták a trondheimi Norvég Tudományos és Technológiai Egyetemen közösen.
- Dohány hőbomlását vizsgálták a British American Tobacco R&D Centre kutatóival abból a célból, hogy az eredmények hozzájáruljanak a dohányzás ártalmainak csökkentéséhez.
- Új környezetkímélő eljárással (lakkáz enzimmel és violursav adalékkal) fehéřített rostpépeket tanulmányoztak portugál együttmőködés keretében a Beira Interior Egyetemen.

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

1. Czégény Zs, Blazsó M: Effect of phosphorous flame retardants on the thermal decomposition of vinyl polymers and copolymers, *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*, 81, 218-224 (2008)
2. Demeter A, Zachariasse K A: Triplet state dipole moments of aminobenzonitriles, *Journal of Physical Chemistry A*, 112(7), 1359-1362 (2008)
3. Feczkó T, Muskotál A, Gál L, Szépvolgyi J, Sebestyén A, Vonderviszt F: Synthesis of Ni-Zn ferrite nanoparticles in radiofrequency thermal plasma reactor and their use for purification of histidine-tagged proteins, *Journal of Nanoparticle Research*, 10, 227-232 (2008)
4. Iván B, Erdődi G, Hellner Á, Groh P W, Kali G, Kasza Gy, Szanka I, Szesztay M, Soltész A: New ways for the synthesis of hyperbranched polymers, *Macromol. Rapid. Comm.*, 29, F16-18 (2008)
5. Jewrajka S K, Erdődi G, Kennedy J P, Ely D, Dunphy G, Boehme S, Popescu F: Novel biostable and biocompatible amphiphilic membranes, *J. Biomed. Mater. Res, Part A*, 87A, 69-77 (2008)
6. Keresztúri K, Szabó A, Tóth A, Marosi G, Szépvolgyi J: Surface modification of poly-(tetra-fluoro-ethylene) by saddle field atom beam source. *Surf. Coat. Technol.* 202, 6034-6037 (2008)
7. Kriston I, Földes E, Staniek P, Pukánszky B: Dominating reactions in the degradation of HDPE during long term ageing in water, *Polymer Degradation and Stability*, 93, 1715-1722 (2008)
8. Pajkossy T, Kolb D M: Anion-adsorption related frequency-dependent double layer capacitance of the platinum group metals in the double layer region, *Electrochimica Acta* 53, 7403-7409 (2008)
9. Pukánszky B Jr, Bagdi K, Tóvolgyi Zs, Varga J, Botz L, Hudak S, Dóczy T, Pukánszky B: Nanophase separation in segmented polyurethane elastomers: Effect of specific interactions on structure and properties, *European Polymer Journal*, 44, 2431-2438 (2008)
10. Szépvolgyi J, Mohai I, Károly Z, Gál L: Synthesis of nanosized ceramic powders in a radiofrequency thermal plasma reactor, *Journal of European Ceramic Society*, 28, 895-899 (2008)

VI. A kutatóhely 2008. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

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

| | | | |
|---|--|---|---------------|
| Átlagléttség ¹ : 100 | Ebből kutató ² : 57 | | |
| PhD, kandidátus: 20 | MTA doktora: 12 | levelező tag: - | rendes tag: - |
| 35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma: 20 | | | |
| Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma ³ : 94 | | | |
| Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ⁴ : 91 | | | |
| <i>Ebből</i> impakt faktoros publikáció magyarul: - | | idegen nyelven: 50 | |
| nemzetközi együttműködés keretében: 15 | | SCI által regisztrált folyóiratban: 50 | |
| összesített impakt faktor ⁵ : 86,448 | | összes hivatkozás száma ⁶ : 1190 | |
| összes hivatkozás száma önidézetek nélkül: 986 | | | |
| <i>Magyarul</i> könyv/monográfia ⁷ : - | könyvfejezet: 1 | jegyzet: - | |
| <i>Idegen</i> nyelven könyv: 1 | könyvfejezet: 3 | jegyzet: - | |
| Tud. fokozat megszerzése ⁸ : PhD: 4 | MTA doktora: - | levelező tag: - | rendes tag: - |
| Elfogadott találmányok, szabadalmak száma ⁹ : 1 | | <i>ebből</i> külföldön: - | |
| Értékesített szabadalmak száma: - | | | |
| Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma ¹⁰ : 34 | | poszterek száma: 40 | |
| Tanácsadói tevékenységek száma ¹¹ : - | | | |
| Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 12 | | Nemzetközi folyóirat szerk. tagság: 16 | |
| Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹² : 16 | | | |
| Ebből doktori iskolákban oktatók száma: 4 | | Doktori iskolát vezetőik száma: - | |
| Elméleti kurzusok száma ¹³ : 27 | | Gyakorlati kurzusok száma: 32 | |
| TDK munkát készítő hallgatók száma: 9 | | Diplomamunkát: 17 | PhD-t: 23 |
| Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma ¹⁴ : 1907 | | | |
| Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ : | | 564,7 | MFt |
| Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁶ : 5 | | Teljes saját bevétel: | 306,2 MFt |
| Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel ¹⁷ : | | 1,7 | MFt |
| Az év folyamán művelt OTKA témák száma: 16 | | | |
| A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: | | 28,6 | MFt |
| Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma ¹⁸ : 9 | | | |
| NKFP: 9 | A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: | | 129,3 MFt |
| Egyéb: - | A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: | | MFt |
| NFT témák száma ¹⁹ : - | A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: | | MFt |
| Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma ²⁰ : 1 | | | |
| EU forrásból: 1 | A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: | | 3,3 MFt |
| Egyéb: - | A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: | | - MFt |
| Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma: 327 | | | |
| A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: | | 248,5 | MFt |
| Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány ²¹ : | | - | MFt |

VI/a. Az MTA Kémiai Kutatóközpont Anyag- és Környezetkémiai Intézet 2008. évi tevékenységének egyéb bemutatható jellemzői

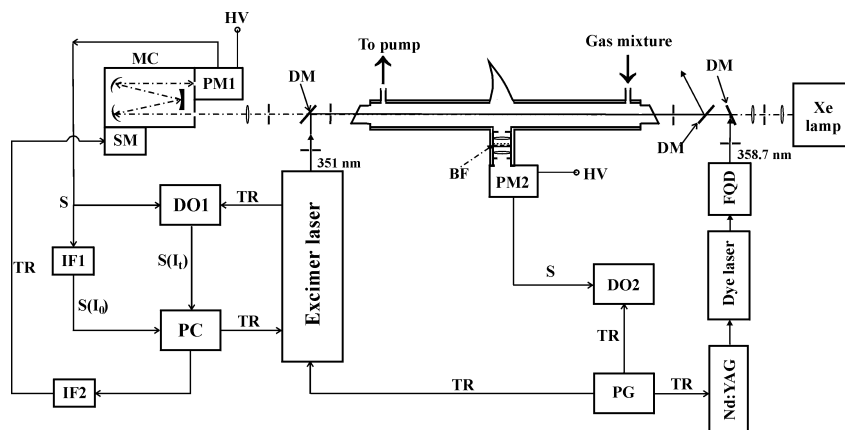
- Bejelentett szabadalmak, és egyéb szabadalmi jellegű alkotások száma:
 - a Magyarországon bejelentettek: 2
 - a nem Magyarországon bejelentettek: 2
- A kutató nők száma:
 - vezető beosztásokban: 1
 - nem vezető beosztásokban: 23
- A mobilitással kapcsolatban az intézetből az állásukat megtartott, munkaviszonyban levő diplomások közül hat hónapnál hosszabb időre távollevők száma: 2
 - Magyarország
 - egyetemen, kutatóintézetekben: -
 - gazdasági társaságnál: -
 - Nem Magyarországon
 - egyetemen, kutatóintézetekben: 2
 - gazdasági társaságnál: -
- az adott intézethez érkező kutatók száma: 4
 - 1-6 hónap időtartamra
 - Magyarországról: -
 - nem Magyarországról: 4
 - 6 hónapnál hosszabb időre
 - Magyarországról: -
 - nem Magyarországról: -
- Vállalati kapcsolatok
 - jelentősebb ipari partnereik felsorolása és a kapcsolat típusa:
 - BASF AG (Németország), K+F megbízás különleges nanoporok előállítására
 - In Vitro Kft.: a FERROCOMP márkanevű tableta gyártása és forgalmazása
 - Easton Ltd., részvétel K+F problémák megoldásában
 - GE Hungary Ltd., részvétel K+F problémák megoldásában
 - Innovatext Textilipari Műszaki Fejlesztő és Vizsgáló Intézet Zrt., K+F részvétel
 - Momentive Performace Materials GmbH, részvétel K+F problémák megoldásában
 - DuPont (USA) K+F speciális polimerek terén
 - TVK, poliolefinok stabilizálása, nanokompozitok kifejlesztése, K+F tevékenység
 - Dunastyr, gyártmányfejlesztés, K+F tevékenység
 - AIRSEC SAS, előnyös tulajdonságú csomagolóanyag fejlesztése, K+F tevékenység
 - NOLATO Magyarország Kft, új termékek kidolgozása, jellemzése
 - PolyOne Magyarország Kft, éghetőség csökkentés
 - British American Tobacco, kutatási megbízás
 - MTA Atomenergia Kutatóintézet, műszerfejlesztés
 - Knorr-Bremse Vasúti Fékrendszerek Hungária Kft., bevonatrendszerek K+F fejlesztés
 - Állami Autópályakezelő ZRt. autópályaszakaszok padkájának talajvizsgálata
 - az intézet holdudvarába tartozó kisvállalkozások száma: 14
- A társadalmi párbeszéd eredményei:
 - Az általános tudománypromóciós közlemények száma: 3
 - Az intézet tevékenységét népszerűsítő rendezvények száma: 3

Az MTA KK Anyag- és Környezetkémiai Intézetének kiemelten sikeres kutatási területe 2008-ban

Az acetone légkörkémiája

Az MTA KK AKI Légkörkémiái Csoportja kiemelten sikeres eredményeket ért el az acetone légkörkémiájának kutatásában. Az acetone, a metán és metanol után, a harmadik leggyakoribb szerves molekula a szabad troposzférában, légköri szerepe különösen a troposféra felső rétegeiben jelentős, ahol döntő hatása van az O_3 és NO_x reakcióciklusok alakulására. A troposzférában lévő ózon erős üvegházhatású gáz, egészségkárosító, toxikus hatása van, az egyik fő komponense a városi szmognak. Így a kutatások információval szolgálnak az éghajlatváltozás és a légkör kémiájának kapcsolatáról és a levegő minőségének várható alakulásáról is.

A vizsgálatokat az úgynevezett direkt kísérleti módszerek alkalmazásával végzik, amelyekben az atomokat, szabadgyököket ill. elektrongerjesztett molekulákat impulzus-lézer fotolízissel, vagy gyors gázáramban állítják elő. Sebességi együtthatókat, fotobomlási kvantumhatásfokokat, és a reaktivitásra jellemző egyéb paramétereket határoznak meg reakciókinetikai és fotokémiai kísérletekkel.



1. ábra Impulzuslézerekkel működtetett reakciókinetikai berendezés a légkör kémiai folyamatainak laboratóriumi vizsgálatára

Az acetone légköri lebomlása az OH-gyökkel végbemenő reakcióval és fotolízis útján megy végbe. Részletes reakciókinetikai vizsgálatokkal megállapították, hogy az OH-reakció hőmérsékletfüggése szokatlan, nagymértékben eltér az Arrhenius törvénytől: a sebességi együttható értéke erősen nő szobahőmérséklet felett, alatta azonban alig változik. Ez azt jelenti, hogy az OH + acetone reakció légköri jelentősége nagyobb a korábban feltételezettnél. A legutóbbi időkig azt tartották, hogy az acetone fotobomlási sebessége légköri körülmények között nem függ a hőmérséklettől. Ezzel szemben, az intézet kutatói, az általuk kidolgozott új kísérleti módszerrel arra a megállapításra jutottak, hogy a kvantumhatásfok jelentősen csökken a hőmérséklet csökkenésével és a nyomás növelésével. Ez a fotolízis kisebb szerepét jelenti, ahhoz képest, amit korábban a légköri modellszámításokban feltételeztek.

Az intézetben meghatározott reakciókinetikai és fotokémiai paramétereket felhasználták néhány világléptékű légkörkémiail modellben is. Ilyen modelleket használnak például a levegővédelmi intézkedések tudományos megalapozása céljából. A Légkörkémiail Csoport az acetón témával szerepel a SCOUT-O3 elnevezésű nagy európai légkörkémiail kutatási projektben. A projekt 2008. évi jelentésében a magyar kutatók megállapításai a kiemelt eredmények között szerepelnek.



2. ábra Saját műszerfejlesztéssel készült UV-VIS spektrométer gázminták abszorpciós spektrumának meghatározására

Elektrokémiai vizsgálatok a platinacsoport fémjein

Módszert dolgoztak ki atomi rétegvastagságú platina elektrokémiai leválasztására, és kifejlesztettek egy nagyérzékenységű bipotencioszátot. Tanulmányozták a platina-folyadék határfelületen kialakuló rétegek töltésszerkezetét. Ez egy olyan, alapvetően új szemléletű kettősréteg-elmélettel értelmezhető, mely abból indul ki, hogy a kettősréteg szerkezetét elsősorban az oldat ionjai, a víz, és a fémfelület atomjai közötti kémiai kölcsönhatások alakítják ki, az elektrosztatikus hatások szerepe pedig másodlagos.

Számos elektrokémiai iparág létezik, melyek termékei - elemek, akkumulátorok, alumínium, stb. - nélkül mai életünk elképzelhetetlen lenne. Elektrokémiai folyamatok várhatóan a jövő környezetbarát technológiáiban is kulcsszerepet játszanak – mindenekelőtt a ma világszerte fejlesztés alatt álló tüzelőanyagcellákban. Ezek csendes, tiszta, nagy hatásfokú áramforrásoknak ígérkeznek – amennyiben sikerül megoldani, hogy az elektródfelületek katalitikus aktivitása hosszú távon is megmaradjon. A felmerülő elektrokémiai problémák megoldásához pontosan ismerni kell a fém-oldat határfelületeken kialakult atomi-molekuláris, illetve elektromos töltésszerkezeteket. A nagy katalitikus aktivitású fémcsoport, a platinacsoport tagjainak (Pt, Pd, Rh, Ir) elektrokémiája kapcsán két fontos kérdéskört tanulmányoztak.

Kidolgoztak egy olyan elektrokémiai leválasztási eljárást, aminek alkalmazása esetén egy aranyelektród felületén majdnem teljes atomi réteg platina válik ki, ennek megfelelően az elektród közel úgy viselkedik, mintha platina lenne. Jelenleg az eljárást olcsóbb hordozófémekre is próbálják alkalmazni. Az eljárás gyakorlati következményei még

felbecsülhetetlenek, de két haszna már nyilvánvalóan látszik. Egyrészt a kevés platina felhasználása miatt lényegesen olcsóbb elektrokatalitikus tulajdonságú elektródok készíthetők, másrészt a platina-leválasztási eljárás birtokában kifejleszhető lesz egy nagyérzékenységű platina-analitikai módszer. Ilyen módszerre a környezet fokozódó platina-terhelése miatt egyre inkább szükség van.

A fenti gyakorlati kérdések megoldásához tartozik az elméleti vonatkozások tisztázása, ugyanis a platina, illetve a platinacsoport egyéb tagjainak felületi elektromos töltésszerkezete nagymértékben befolyásolja a végbemenő folyamatok sebességét. Nagyszámú voltammetriás és impedanciaspektroszkópai mérést végeztek pontosan meghatározott tulajdonságú elektrokémiai rendszereken, a platinacsoport egykristályain. E mérésekkel jellemezték, hogy melyik anion milyen potenciáltartományban, milyen mértékben adszorbeálódik a határfelületen. Egyes esetekben az adszorpció sebességét is meg tudták határozni.

A ma klasszikusnak tekintett elektrokémiai elméletek szerint egy fém-elektrolitoldat határfelületen kialakuló elektromos kettősréteg kétféle eredetű: egyrészt a felületre elektrosztatikusan kötődnek ionok, másrészt kémiai kötéssel adszorbeálódhatnak ionok és dipólusmolekulák. Az elektrosztatikus és adszorpciós eredetű kettősréteg mindegyik elmélet szerint egymástól független, és a lezajló elektród folyamatok sebességét egymástól függetlenül befolyásolják. Ez a kép a huszadik század közepe óta higanyon és néhány nemesfém elvégzett mérési eredménnyel van összhangban – viszont a platinacsoport fémjein általunk mérteknek ellentmond. Az intézetben végzett mérések alapján egy alapvetően új szemléletű kettősréteg-elmélet kidolgozására van szükség. Ez azon feltételezésen alapszik, hogy a kettősréteg szerkezetét elsősorban az oldat ionjai, a víz, és a fémfelület atomjai közötti kémiai kölcsönhatások határozzák meg, s csak kevéssé az elektrosztatikus hatások. Az elmélet kidolgozásához várhatóan értékes információk nyerhetők kvantumkémiai számítások segítségével.



3. ábra Iridium egykristány előkészítése méréshez: 2000 Co-os hevítés argonáramban

A kutatócsoport mindig nagy hangsúlyt fektetett saját fejlesztésű kísérleti elektrokémiai módszerek és eszközpark kialakítására, illetve fenntartására. Az utóbbi évek eredménye a svájci együttműködés keretében kifejlesztett, különösen nagy érzékenységű és sebességű

bipotenciosztát, amelynek kulcselemeit már szabadalom védi. A műszer lehetővé teszi, hogy megnöveljék a pásztázó elektrokémiai mikroszkópok felbontását, amelyekkel – többek között – az inhomogéen katalitikus tulajdonságú felületeket lehet leképezni.