

Központi Kémiai Kutatóintézet



Magyar Tudományos Akadémia

1954-2004

A KÖZPONTI KÉMIAI KUTATÓINTÉZETTŐL A KÉMIAI KUTATÓKÖZPONTIG



1954-2004

Tartalom

Előszó	2
1. A Központi Kémiai Kutatóintézet megalapításának céljai	4
2. A Kutatóintézet megalapításának körülményei és szervezetének változásai	5
3. A KKKI kutatási területeinek változásai	12
4. A tudományos kutatások feladatai és eredményei a KKKI-ban szakterületenként és témánként	21
Szerves kémiai és bioorganikus kémiai kutatások	21
Fizikai kémiai kutatások	36
Makromolekuláris kémiai kutatások	56
Elméleti kémiai és szerkezeti kémiai kutatások	59
Kémiai analitikai és környezetanalitikai kutatások	72
5. A kutatásokat segítő részlegek	74
6. Az Intézet részvétele a kutatók továbbképzésében és a felsőoktatásban	78
7. Az Intézet nemzetközi kapcsolatai	79
8. A tudományos kutatások finanszírozása és a kutatási eredmények ipari alkalmazása	84
9. Az Intézet kutatási tevékenységének értékelése	87
10. Publikációk jegyzéke (1954-2004)	91

Előszó

A Magyar Tudományos Akadémia 50 éve alapította meg a Központi Kémiai Kutatóintézetet. Alapításkor feladatként az intézmény elé a tudományos kutatások magas szintű művelésén túl, az ország kémiai kultúrájához és a vegyipar, valamint a gyógyszeripar fejlődéséhez való hozzájárulást állították. Nemzetközi színvonalú tudományos kutatás nélkül nincs gazdasági és szellemi fejlődés. A kémia tudománya a XIX. század közepétől kezdve egyre nagyobb mértékben a különböző természettudományi területek integráló tényezőjévé vált. Kémiai ismeretek és ezek alkalmazása nélkül az ember nem boldogulhat az élet egyetlen területén sem. Hiszen kémiai ismeretek nélkül nem lehetséges gyógyszerek, humán protézisek, diagnosztikai eljárások, növényvédő szerek, petrolkémiai és alternatív motorhajtó anyagok, környezetvédelmi eljárások, illetve analitikai mérések, különleges szerkezeti anyagok, számítógép-memóriák, speciális tulajdonságú, adott célra megtervezett anyagok kifejlesztése.

Annak érdekében, hogy a kutatások minél eredményesebbek legyenek, az Intézet vezetői mindig is a tematikának a nemzetközi irányzatokhoz való illesztésére, a műszerezettségnek és általában a kutatási infrastruktúrának a korszerűsítésére, továbbá a szellemi potenciálnak a megújítására törekedtek. Az Intézet kutatói több fontos kutatási terület művelését indították el Magyarországon, és alapvető szerkezetkutatási módszereket honosítottak meg.

1954 óta nagy utat járt be a kutatóhely. Ennek az útnak számos akadályja volt, amelyeket azonban az Intézet mindenkor sikeresen leküzdött. A 70-es és a 80-as években például a hazai iparvállalatok fejlesztési feladataiból egyre nagyobb hányadot vállalva, jelentős bevételekkel tudta segíteni saját kutatásait. Sikeresen vett részt országos kutatási programok koordinálásában. A 90-es évek nehéz gazdasági körülményei között a külföldi pályázatokon való igen aktív és eredményes tevékenység segítette a talpon maradást.

1998-tól a Központi Kémiai Kutatóintézet Kémiai Kutatóközponttá vált. Megújult a Központ szervezete, öt kutatóintézetbe koncentrálták a hasonló tematikájú csoportokat.

A kutatások súlyponti területeit a Központ Nemzetközi Tudományos Tanácsadó Testülete a következőkben jelölte meg:

- biotudományok kémiája,
- nanotudományi kutatások,
- anyagtudományi és környezettudományi kutatások.

A Központ kutatóinak célja, hogy a felsorolt területeken olyan témákat válasszanak, amelyeken az elért eredmények révén a világ kutatásainak élvonalába kerülhetünk.

Az utóbbi öt évben több új, ígéretes kutatási területen indult meg a munka, számos korszerű nagyberendezést állítottak a kutatások szolgálatába, igen sok tehetséges fiatal kezdte el kutatói pályáját.

A 2000-es évektől a hazai nagy kutatási-fejlesztési pályázatokon (Széchenyi-pályázat, a gazdaság versenyképességét fokozó pályázatok, Koordinációs Kutatóközpont pályázat) a Központ eredményesen szerepel. Sikeres európai pályázataink révén pedig új lehetőségek nyíltak előttünk. A Központ az európai kutatási térség aktív résztvevőjeként kiválósági címet nyert el a biomolekuláris tudományok és a nanotudományok területén.

A XXI. század elején sem könnyűek a tudományos kutatások feltételei Magyarországon. Reméljük azonban, hogy ez a nehéz időszak csak átmeneti, mind a magyar tudomány, mind az MTA Kémiai Kutatóközpont túljut rajta, s rövidesen energiánk nagyobb részét alapvető tudományos kutatások végzésére fordíthatjuk.

A Központ kutatói számos jelentős tudományos eredményt mutathatnak fel az elmúlt 50 év terméséből. Ugyancsak fontosak a gazdasági hasznot hozó munkák is. Ezekről az eredményekről e kiadvány ad áttekintést.

Budapest, 2004. november 26.

Pálinkás Gábor
főigazgató



Schay Géza alapító igazgató emléktáblája a Kutatóközpont igazgatósági épületének folyosóján

1. Az MTA Központi Kémiai Kutatóintézet megalapításának céljai

A Magyar Tudományos Akadémia nagy, diszciplináris kutatóintézeteit az 1950-es években alapították meg. Az ipartól és a felsőoktatástól szervezetileg független, ám kapcsolatrendszerében azokhoz illeszkedő kutatóintézeti hálózat létrehozatala a tudományos kutatások fejlesztésével a gazdaság, az oktatás és a tudományos kultúra érdekeit egyaránt szolgálta. Ilyen, elsősorban a tudományos kutatásnak szentelt intézeteket mind a kelet-európai, mind pedig a nyugat-európai országokban találhatunk. Így például az akadémiai intézeteket Oroszországban (ill. korábban a Szovjetunióban, Csehszlovákiában, Lengyelországban stb.), a CNRS-intézeteket Franciaországban, a Max Planck-intézet-hálózatot Németországban vagy a CNR-intézeteket Olaszországban.

A Központi Kémiai Kutatóintézet létrehozatalát a 422/1952/II.15 sz. minisztertanácsi határozat rendelte el. Az alapító okirat megállapítja:

„Hazánkban nincs olyan kémiai kutatóintézet, amely a nagyobb felszerelést igénylő kutatások elvégzését is lehetővé tenné. Halaszthatatlanul szükséges tehát, népgazdaságunk fejlesztése érdekében, az MTA elnöke javaslatának megfelelően, központi kémiai kutatóintézet létesítése, amelynek először a fizikai-kémiai és szerves kémiai osztálya kerül felállításra.”

Bár az MTA KKKI alapító oklevele 1952. évi keltezésű, a kutatóhely működését ténylegesen első igazgatójának – néhai Schay Géza akadémikusnak (1900-1991) – 1954 őszén történt kinevezésétől számíthatjuk. Az Intézetnek önálló telephelye akkor még nem volt, a munka a Budapesti Műszaki Egyetem laboratóriumaiban indult meg. Abban az időben Oláh György, aki jelenleg az MTA tiszteleti tagja és 1996-ban kémiai Nobel-díjat kapott, igazgatóhelyettesként irányította a szerves kémiai kutatásokat.

A Központi Kémiai Kutatóintézet tevékenységének fő célja a *kémiai szerkezet és a reakcióképesség közötti összefüggések felderítése* volt. Az Intézet több tudományterületen úttörő munkát végzett az országban. Ezek a területek a következők voltak: radioaktív izotópokkal jelzett szerves vegyületek előállítása és reakciók mechanizmusának felderítésében történő alkalmazása; a frontális gázkromatográfia elmélete, az adszorpció termodinamikája és alkalmazásai, irreverzibilis termodinamika, szénhidrogének izomerizációs és krakkreakcióinak vizsgálata, gáz- és folyadékfázisú kontakt katalitikus és elektródreakciók tanulmányozása, fotokémiai kutatások; az anyagszerkezetkutatás területén: az infravöröspektroszkópia, a mágneses rezonanciaspektroszkópia, a tömegspektrometria, a röntgendiffrakció, a gáz-elektrondiffrakció, a folyadékok szerkezetének kutatása; a makromolekuláris kémiában: a gyökös polimerizációs folyamatok kutatása és a polimerek degradációjának vizsgálata, valamint a bioorganikus kémia.

2. Az MTA Központi Kémiai Kutatóintézet megalapításának körülményei és szervezetének változásai

1953-ban az MTA Kémiai Tudományok Osztálya Schay Géza akadémikus vezetésével egy szervezőbizottságot hozott létre azzal a céllal, hogy készítse el a létrehozandó kémiai kutatóintézet beruházási tervét. A terv rövidesen el is készült mintegy 80 millió Ft költségelőiránnyal. A beruházási programot később átdolgozták, figyelembe véve egy kísérleti reaktor felépítését is. A magkémiai kutatási feladatokhoz szükséges berendezések és izotóptároló épületek létesítését azonban a Fővárosi Tanács a budai hegyvidék Virányos-rétnek nevezett részén nem engedélyezte.

1955-ben az Országos Tervhivatal határozata alapján az Intézetet ideiglenesen a Szerves Vegyipari és Műanyagipari Kutatóintézet Hungária körüti telephelyén helyezték el.

1957-ben új telket jelöltek ki a Kémiai Kutatóintézet számára a II. kerületben, a Ferenc-hegyen, a Pusztaszeri út – Vend utca – Gomba utca által határolt telken. Ekkor újabb beruházási program készült, ami egy igazgatósági és négy laboratóriumi épület, valamint egy izotóptároló és -elosztó épület létesítését tervezte. Az építkezés 1958-ban indult meg. 1962-ben készült el az igazgatósági, továbbá az I. és a III. laboratóriumi épület, összesen 34 656 légm³-rel, a költségek 72 millió Ft-ot tettek ki. Rövid ideig az MTA Műszaki Fizikai Kutatóintézetét is az új épületekben helyezték el. Később az Országos Atomenergia Bizottság döntése alapján az izotóptároló és -elosztó épület létesítése a KKKI telephelyén végleg elmaradt. 1968-ban adták át a második laboratóriumi épületet, amely lehetővé tette, hogy az optikai spektroszkópiai csoport felköltözzön a Műegyetemről a Pusztaszeri úti telephelyre. Ebben az épületben helyezték el a röntgendiffrakciós és az NMR-csoportokat, továbbá az újonnan alakult oxidációs folyamatok osztályát, valamint a redoxkatalitikus reakciókkal foglalkozó csoportot is.

A IV., a legnagyobb kutatási pavilonba (30000 légm³) 1978-ban kezdődött meg a beköltözés. Az épület eredeti tervét jelentős mértékben át kellett alakítani, mert a rendelkezésre álló pénz – összesen mintegy 200 millió Ft – nem volt elegendő. A létesítmény közepét „kivették”, ezáltal egy négyzet alapú, belső udvarként szolgáló tér keletkezett. Az eredetileg tervezett nagy előadóterem és a könyvtár felére zsugorodott. A korábbi barakk helyén korszerű raktárépületek és műhelyek létesültek (V. épület). Az öt épületet zárt üvegfolysó köti össze.

A KKKI-ban 1954-ben a következő két tudományos szervezeti egység adott keretet a kutatómunkának (zárójelben a vezető kutatók neve): Fizikai kémiai osztály (Halász István, Nagy Ferenc, Szabó Pál), Szerves kémiai és Szerves kémiai műveletek osztály (Hardy Gyula, Kiss István, Oláh György). A katalíziskutatásokat a Halász István és a Nagy Ferenc által vezetett csoportok keretében művelték. A szerves kémiai kutatásokat Oláh György irányította, a szerves mikroanalitikai részleget Messmer András vezette. A polimerizációs reakciókat kutató csoport vezetője Hardy Gyula volt. A magkémiai kutatások elindításához négy izotóplaboratóriumot létesítettek. A mérés technikai kutatások Juhász Endre, a sugárhatáskémiai vizsgálatok Safarik Imre vezetésével kezdődtek el. A jelzett szerves vegyületek szintézisét Schawartz József kezdte el. Az optikai spektroszkópiai kutatások elindítását Varsányi György másodállásban vállalta, hiszen akkor ő a BME Fizikai Kémiai Tanszékének volt egyetemi tanára.

Az 1956-os forradalmat követően sokan úgy gondolták, külföldön nagyobb lehetőséget kaphatnak tehetségük kibontakoztatásához. Ekkor hagyta el az országot Oláh György, Halász István, Schawartz József és még 12 kutató. Sajnos, a későbbi években is jelentős szakmai veszteségeket okozott, hogy számos kutató (így pl. Csanády György, Fülöp

Vilmos, Galambos György, Fülöp Vilmos, Hemela József, Kertész Miklós, Kiss Ákos, Koritsánszky Tibor Kroó Erik, Ladik János, Mohácsi Tivadar, Mohos Béla, Paizs Béla, Pethő Árpád, Sági János, Sándor Péter, Sóti Ferenc, Suhai Sándor, Tóth István, Varjú Mihály, Valkó Klára) külföldre távozott. Az Intézet igyekezett pótolni az eltávozottak okozta veszteségeket.

1957-ben létrejött a Kristálykémiai csoport Náray-Szabó István vezetésével. Az Alkalmazott magkémiai csoportot Ádám László, a Méréstechnikai csoportot Tari László, az Izotópos szintézis csoportot Mester László szervezte meg, aki azonban rövidesen szintén külföldre távozott.

Az MTA Kémiai Tudományok Osztálya 1959-ben azt javasolta, hogy a tíz kutatócsoportot négy osztállyá alakítsák át. Így jött létre az Anyagszerkezeti osztály Varsányi György, az Adszorpciós és katalitikus osztály Fejes Pál, a Polimerizációs és szerves reakciómechanizmus osztály Tüdös Ferenc és a Magkémiai osztály Ötvös László vezetésével.

1957-ben a Hardy Gyula irányította polimerkémiai csoport kivált az Intézetből, s az újra önállóvá vált Műanyagipari Kutatóintézet bázisa lett. Az Országos Atomenergia Bizottság Izotóp Intézetének létrehozatalakor, 1960-ban a magkémiai és izotópkémiai kutatások nagyobb részét a KKKI-ből oda csoportosították. Tétényi Pál, aki az újonnan létrejött intézet igazgatója lett, valamint Márton József és Lengyel Tamás az új kutatóhelyen folytatta munkáját. Az Izotóp Intézetet később az MTA-hoz kapcsolták.

1966-ban az MTA Sztereokémiai Kutatócsoportját (igazgató: Ötvös László), 1972-ben a Kémiai Szerkezeti Kutatólaboratóriumot (igazgató: Lengyel Sándor), továbbá a Szeretlen Kémiai Kutatólaboratóriumot (igazgató: Székely Tamás) is a KKKI-hoz csatolták. A későbbiek folyamán a legutóbbi, valamint a másodikként említett szervezet egyik részlege, a Gázelektronfrakciós Laboratórium (igazgató: Hargittai István) kivált az Intézetből.

1978-ban Szántay Csaba és Medzihradzky Kálmán vezetésével új kutatási osztályok létesültek természetes szerves kémiai és peptidkémiai kutatások elindítása céljából.

Az Intézet vezetőinek és szervezetének változásait a következők mutatják:

Az MTA Központi Kémiai Kutatóintézet, ill. 1998-tól a Kémiai Kutatóközpont tudományos és gazdasági vezetői az alapítás óta

Igazgatók, illetve főigazgatók:

Schay Géza (igazgató)	1954-1969
Nagy Ferenc (igazgató)	1969-1972
Holló János (igazgató)	1972-1980
(tudományos igazgató)	1980-1991
Márta Ferenc (főigazgató)	1980-1998
Pálincás Gábor (főigazgató)	1999-

Igazgatóhelyettesek:

Oláh György	1954-1956
Náray-Szabó István	1956-1957
Nagy Ferenc	1957-1969
Ötvös László	1969-1996
Lengyel Sándor	1972-1985
Pálincás Gábor	1993-1998
Hajós György	1996-2004

Gazdasági vezetők, illetve igazgatók:

Zsilinszky László	1954-1958
Holyinka Mihály	1959-1962
Kerekes Károly	1962-1995
Benussi Silvio Antonio	1996-

Tudományos titkárok:

Szőke Sándor	1960-1970
Telcs Iván	1970-1972
Radics Lajos	1970-1972
Vadász István	1973-1973
Simonyi Miklós	1973-1974
Vinkler Péter	1975-

A KKKI tudományos szervezeti egységei és azok vezetői négy kiválasztott időszakban

1954-1964 között:

Csoport neve

Vezetője

Adszorpciós csoport

Halász István
majd: Fejes Pál

Reakciókinetikai csoport

Nagy Ferenc
majd: Telcs Iván

Polimerizációkinetikai csoport

Hardy Gyula
Szántó István
majd: Tüdős Ferenc

Szerves reakciómechanizmus csoport

Oláh György
majd: Messmer András

Izotópos szintézis csoport

Schawartz József
Mester László
Ádám László
majd: Ötvös László

Sugárhatáskémiai csoport

Safarik Imre

Alkalmazott magkémiai csoport

Tari László
majd: Dobis Ottó

Méréstechnikai csoport

Juhász Endre
Safarik Imre
majd: Mlinkó Sándor

Kristálykémiai csoport

Náray-Szabó István

Spektroszkópiai csoport

Varsányi György

*1984-ben:
Osztály neve*

Bioorganikus kémiai osztály
Szerves szintetikus és
reakciómechanizmus osztály
Természetes szerves anyagok
szintézise osztály
Molekulárfarmakológiai osztály
Növényvédőszer-kutatási osztály
Katalízis osztály
Oxidációs folyamatok osztály
Szénhidrogén katalízis osztály
Reakciókinetikai osztály
Makromolekuláris kémiai osztály
Röntgendiffrakciós osztály
Molekulaszerkezeti osztály

Vezetője

Ötvös László
Messmer András
Szántay Csaba
Medzihradszky Kálmán
Dutka Ferenc
Simándi László
Gál Dezső
Kalló Dénes
Bérces Tibor
Tüdös Ferenc
Kálmán Alajos
Tamás József

*1999-ben:
Osztály, ill. csoport neve*

Bioorganikus kémiai osztály
Heterociklusos kémiai osztály
Természetes szerves
vegyületek szintézise osztály
Molekulárfarmakológiai osztály
Neurokémiai osztály
Farmakobiokémiai osztály
Biokomplex osztály
Biooxidációs csoport
Katalízis osztály
Szerves katalízis osztály
Reakciókinetikai osztály
Polimer fizikai kémiai osztály
Polimer anyagtudományi osztály
Felületkémiai és korróziós osztály
Kémiai fizikai osztály
Környezetkémiai és analitikai osztály
Röntgendiffrakciós osztály
Molekulaszerkezeti osztály

Vezetője

Ötvös László
Hajós György
Szántay Csaba
Simonyi Miklós
Kardos Julianna
Vereczkey László
Vinkler Péter
Jakus Judit
Simándi László
Margitfalvi József
Bérces Tibor
Pukánszky Béla
Iván Béla
Kálmán Erika
Pálinkás Gábor
Forgácsné Tóth Eszter
Kálmán Alajos
Radics Lajos

Mikropórusos és mezopórusos
anyagok osztálya
ESR-spektroszkópiai csoport
Számítástechnikai és informatikai csoport

Beyer Hermann
Rockenbauer Antal
Radnai Tamás

Az *MTA Kémiai Kutatóközpont* létrehozataláról, az Akadémiai Kutatóhelyek Tanácsának javaslatára, az Akadémia 1997. évi májusi rendes közgyűlése hozott határozatot. A Kutatóközpont jogutódja a megszűnt MTA Központi Kémiai Kutatóintézetnek, az MTA Izotópkutató Intézetnek és az MTA Természettudományi Kutatólaboratóriumnak a Szervetlen Kémiai Kutatólaboratórium vonatkozásában. Az alapítást az Akadémia 1997. évi decemberi közgyűlése, az alapító okirat 1997. december 31-én történő hatálybalépésével fogadta el. A Kutatóközpontot azért hozták létre, hogy a korábban önálló kutatóhelyek a tudományos együttműködés, a közös infrastruktúra és műszerállomány lehetőségeinek kihasználása révén eredményesebben és gazdaságosabban dolgozzanak.

A Kutatóközpontba olvadt intézetek a létrehozatal óta tovább korszerűsödtek, új kutatási témák indultak, bővültek a kutatócsoportok közötti tudományos együttműködések. A KKKI a Központon belül, mint annak legnagyobb kutatóhelye *Kémiai Intézet* néven folytatta tovább munkáját. A másik két kutatóhely a korábbi önálló intézmények nevét szintén megváltoztatva, mint Izotóp- és Felületkémiai Intézet, ill. Anyag- és Környezetkémiai Kutatólaboratórium működött tovább.

2004-ben az Akadémiai Kutatóhelyek Tanácsának 2004. január 19-i állásfoglalása alapján, az MTA főtitkárának jóváhagyásával, a Központ szervezeti átalakítása révén, öt új kutatóintézet jött létre. Ezek a következők:

- Biomolekuláris Kémiai Intézet,
- Felületkémiai és Katalízis Intézet,
- Szerkezeti Kémiai Intézet,
- Anyag- és Környezetkémiai Intézet,
- Izotópkutató Intézet.

A KKKI részlegeit magukba foglaló intézetek és a megfelelő szervezeti egységek 2004-ben:

Osztály, ill. csoport neve

Vezetője

Biomolekuláris Kémiai Intézet

Alkalmazott szerves kémiai osztály

 Biológiai kémiai csoport

 Izotópos szintézis csoport

Szintetikus szerves kémiai osztály

Természetes szerves anyagok osztály

Molekulárfarmakológiai osztály

Neurokémiai osztály

Farmakobiokémiai osztály

Szénhidrátkémiai osztály

Jablonkai István

Szammer János

Hajós György

Dörnyei Gábor

Simonyi Miklós

Kardos Julianna

Vereczkey László

Fügedi Péter

Felületkémiai és Katalízis Intézet

Biomimetikus katalízis osztály	Simándi László
Felületmódosítás és nanoszerkezetek osztály	Kálmán Erika
Szerves katalízis osztály	Margitfalvi József
Mikro- és mezopórusos anyagok osztálya	Valyon József
Nanoszerkezetű fémkatalizátorok laboratóriuma	Guczi László

Szerkezeti Kémiai Intézet

Molekulaspektroszkópiai osztály	Mink János
Reakciókinetikai osztály	Dóbbé Sándor
Röntgendiffrakciós osztály	Kálmán Alajos
Tömegspektrometriai osztály	Vékey Károly
Elméleti kémiai osztály	Pápai Imre

Anyag- és Környezetkémiai Intézet*

Polimer kémiai és anyagtudományi osztály	Iván Béla
Alkalmazott polimer fizikai kémiai osztály	Pukánszky Béla
Fémkomplex csoport	Szentmihályi Klára
Környezetvédelmi laboratórium	Horváth Tibor

*csak a korábbi Kémiai Intézethez tartozó tudományos osztályok, ill. csoportok

Az Intézet létszámának, a kutatók számának és a tudományos minősítések számának változását az 1. táblázat mutatja.

1. táblázat

Az MTA Központi Kémiai Kutatóintézet teljes létszáma, a kutatók száma, valamint a tudományos minősítéssel rendelkezők száma néhány kiválasztott évben

Év	Teljes létszám	Kutatók száma	Az MTA rendes és lev. tagjainak száma	Az MTA doktorainak száma	A tudomány kandidátusainak száma	Tudományos fokozattal rendelkezők aránya (%)
1954	22	10	1	-	6	70
1961	155	54	1	3	9	24
1971	300	105	3	5	31	37
1983	508	222	9	13	52	33
1991	458	189	7	24	60	48
1996	384	159	8	33	44	53
2002 ¹	275	170 ²	7	38	65 ³	65

Magyarázatok:

¹: az adatok az MTA Kémiai Kutatóközpont Kémiai Intézetére vonatkoznak

²: az MTA fiatal kutatói ösztöndíjasokkal együtt

³: a PhD fokozatokkal együtt

Az Akadémia tagjai az MTA Központi Kémiai Kutatóintézetében, illetve a Kémiai Kutatóközpontban

A következőkben felsorolt akadémiai *rendes* vagy *levelező* tagok dolgoztak rövidebb-hosszabb ideig a KKKI-ben (zárójelben a levelező, ill. rendes taggá történő választás éve): Antus Sándor (2004), Bérces Tibor (1993, 1998), Blaskó Gábor (2001), Dénes Géza (1973, 1985), Farkas Loránd (1973), Gyarmati István (1982, 1990), Hargittai István (1987, 1993), Hargittai Magdolna (2004), Holló János (1967, 1976), Kálmán Alajos (1995, 2001), Kőmíves Tamás (2004), Márta Ferenc (1970, 1976), Medzihradszky Kálmán (1982, 1990), Nagy Ferenc (1965, 1985), Náray-Szabó István (1945), Pálincás Gábor (1995, 2001), Pukánszky Béla (2004), Schay Géza (1945, 1954), Szántay Csaba (1970, 1982), Tétényi Pál (1970, 1979) és Tüdös Ferenc (1970, 1982).

3. A KKKI kutatási területeinek változásai

Az Intézet kutatási céljait és a tevékenység területeit az alapításkor az ötvenes évek első felének ismeretei határozták meg. 50 év elteltével azonban örömmel állapíthatjuk meg, hogy az akkori, a témaválasztásokat befolyásoló alapvető célkitűzés – *a kémiai szerkezet és a reaktivitás közötti összefüggések vizsgálata* – még mindig időszerű. Hasonlóképpen az egyes kutatási területek – szerves kémiai reakciómechanizmusok kutatása, kinetikai és katalízis vizsgálatok, polimer kémiai, valamint anyagszerkezeti kutatások – ma is meghatározó részei a kémia tudományának.

Az Intézet kutatási eredményeiről tématerületenként olvasható ismertetés a 4. pontban. Az itt következőkben – a teljesség igénye nélkül – csupán néhány olyan fontosabb és eredményesebb, a 60-as és a 70-es években művelt kutatási téma megnevezése, valamint a témát irányító kutatók neve szerepel, amelyek, ill. akik a későbbi részletes ismertetésből kimaradtak:

- Az enzimmatalizálta reakciók sztereokémiája; biopolimereken végbemenő reakciók mechanizmusának és sztereokémiájának vizsgálata (Moravcsik Ernő),
- Alkilezési, acilezési és dezacilezési reakciók sztereokémiája (Tömösközi István),
- Az aszimmetrikus indukció kvalitatív értelmezése, szerves redoxrendszerek sztereokémiája (Gruber Lajos),
- Telített szénhidrogéneken zajló hidrogénizotóp elektrofil cserereakciók; alifás szénhidrogének elektrofil szubsztitúciója (Egyed János),
- Karbonsavak és származékaik átalakulásainak reakciómechanizmusa; karbonsavészterek katalizált szubsztitúciós reakcióinak vizsgálata aprotikus közegben (Dutka Ferenc),
- Szénhidrogének C-C, ill. C-H kötése heterogén katalitikus átalakításainak vizsgálata (Móger Dezső),
- Szerves vegyületek elemi gyökreakciói folyadékfázisban (Dobis Ottó),
- Fémkatalizátorokon végbemenő szerves kémiai redoxreakciók tanulmányozása (Telcs Iván),
- Oldatok radiolízise (Hardy Gyuláné),
- Polimer oldatok fizikai kémiája (Czuppon Alfréd).

A 60-as évektől kezdődően, s fokozottan a 80-as évektől, a kémia ismeretei több, korábban tőle távoli területen is nyertek és nyernek alkalmazást. A tudomány fejlődésével egyre inkább tapasztalható a különböző szakterületek tudásanyagának egymást erősítő hatása. Jelenleg – a kémiát érintően – két fontos irány különböztethető meg. Az egyik a kémia és az *élő rendszereket* tanulmányozó más tudományágak ismereteinek és módszereinek közös alkalmazása az élő szervezet működése megértésének, a fiziológiai történések felderítésének és így gyógyszerek kidolgozásának céljából. A másik irány az *anyag szerkezetének és funkciójának*, az anyagok egymásra hatásának, a lejátszódó reakcióknak az elemi lépések, a molekulák, atomok szintjén történő mind pontosabb megismerését célozza. A kémia, a fizika és a biológia határterületeinek vizsgálata az egyik legizgalmasabb irányvonal.

Az említett fejlődésre való tekintettel indította meg az Intézet a 70-es évek elején bioorganikus kémiai, majd peptidkémiai és a természetes szerves vegyületekkel foglalkozó kutatásait. Az élettudományok előretörése azóta is világszerte folytatódik. Ennek eredményei a gyógyászatban is jelentkeznek, jelentős részben éppen a kémia egyre nagyobb szerepvállalásának köszönhetően.

Az ipar és a mezőgazdaság, továbbá az egészségügy és a társadalom más területei a XXI. században is növekvő várakozással fordulnak a kémia felé. Egyre nagyobb az igény új

gyógyszerekre (antivirális, antimikrobiális, gombaellenes stb. szerekre), polimerekre (kompozitokra, kerámiákra, bioprotézisekre stb.), korróziógátlókra, az alternatív energiaforrások kihasználását lehetővé tevő eljárásokra és vegyületekre (így pl. hidrogéngáz-tárolókra, speciális fűtőelemekre), elektronikai alkatrészekre, petrolkémiai termékekre, hajtóanyagokra, kozmetikumokra, kis mennyiségben is hatékony növényvédő szerekre, funkcionális élelmiszeradalékokra, hulladékkezelő eljárásokra, új, környezetbarát vegyipari technológiákra.

A tudományos kutatásban is óriási változásokat hozott – mintegy az 1970-es évektől – a számítógépek elterjedése. Mára a szerkezetkutatásban és az analitikában használatos műszerek méréseit számítógépek vezérlik, az adatokat, amelyekből többszázret tartalmazó adatbázisokat építenek, számítógépi programok dolgozzák fel. A röntgendiffrakciós kristály- és folyadékszerkezet-meghatározások műszerei, a tömegspektrometriai, a magmágnese rezonanciamérési, az infravörösspektroszkópiái, a gáz- és folyadékromatográfiás műszerek, a felületvizsgáló spektrométerek és mikroszkópok mind számítógépekkel összekötött berendezések. A spektroszkópia műszereit analitikai-elválasztástechnikai műszerekkel kombinálják, ezáltal új lehetőségek nyílnak keverékek egyes komponenseinek, bonyolult, nagy molekulatömegű anyagoknak a szerkezetmeghatározására és igen kis mennyiségű anyagok analizésére.

Az Intézet elérte, hogy műszerezettségének szintje ne lehessen akadály a kiváló minőségű tudományos munkának. Az 1986-os évtől kezdődően az Országos Műszaki Fejlesztési Bizottság támogatásával az ELTE Kémiai Tanszékcsoportjával közösen indította el az OTKA II. sz. Budapesti Kémiai Szerkezetkutató és Elválasztástechnikai Műszerközpontjának tevékenységét. A Központ részt vállalt az egyetemek műszeres szerkezetkutatási feladatainak megoldásában, de számos vállalat részére is végzett méréseket. Az 1980-as évek végén kezdte meg működését a Varian XL 400 típusú, nagyfelbontású, nagyterű NMR-berendezés és a Nicolet cég Fourier-transzformációs infravörösspektrométere, amelyek akkor a legkorszerűbbek voltak az országban. 1990-ben állították üzembe azt a nagyfelbontású tandem tömegspektrométert, amely az országban akkor egyedülálló lehetőséget biztosított a korszerű MS-MS mérésekhez. Ugyancsak a nyolcvanas évek végére épült ki az Intézet belső számítógépes hálózata. A 90-es években egy atomierő-mikroszkópot és egy pásztázó alagútmikroszkópot, amelyek a felületvizsgálatokat, valamint egy optikai rotációsdiszperzió és cirkuláris dikroizmus spektrométert, továbbá egy nagyteljesítményű röntgenkészüléket, amelyek a szerkezetkutatásokat segítik, helyeztek üzembe. Az utóbbi években sikerült néhány olyan korszerű berendezést beszerezni, amelyek lehetővé teszik, hogy lépést tartsanak a nemzetközi kutatásokkal.

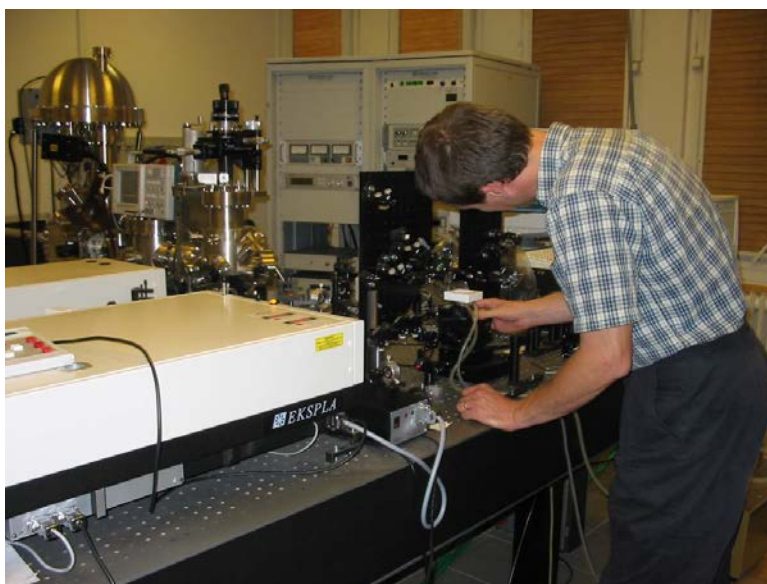


A tömegspektrometriai laboratórium

A kombinált elektrofiziológiai és mikrofluorometriás mérőrendszer kialakításával lehetővé vált a validált célmolekulákon ható gyógyszerek tervezése és vizsgálata a neuronhálózatok szintjén. A számítógépes dokkoláson alapuló, racionális gyógyszertervezéssel nyert molekulák hatásossága így először receptorkötési tesztekben, hagyományos, illetve gyorskinetikai módszerekkel vizsgálható, ezt követően a receptorok válasza élő sejtekben patch-clamp technikával tanulmányozható. A kapott eredmények *in vivo* mikrodialízis mérések segítségével egészíthetők ki. A beruházás megvalósítása egy-egy hatásos vegyület csaknem teljes körű, preklinikai vizsgálatát lehetővé teszi.

A Kémiai Kutatóközpontban egy jelentős, modern kutatási irány – nanorendszerek és határfelületi jelenségek komplex, *in situ* vizsgálata – meghonosításán dolgoznak. Ennek első fontos lépése volt az összegfrekvencia-keltési (Sum Frequency Generation, SFG) spektrométer (EKSPLA Ltd.) beszerzése 2002-ben. A felületvizsgálati módszerek között az összegfrekvencia-keltési spektroszkópia egyedülálló abban a tekintetben, hogy lehetőséget nyújt folyadék/gáz, szilárd/gáz, folyadék/szilárd, valamint folyadék/folyadék határfelületek és az ezeken végbemenő jelenségek felületspecifikus, roncsolásmentes, nagy érzékenységgel történő *in situ* vizsgálatára.

A frekvenciaválasz-módszer [Frequency-response(FR) method] sajátos módszer az adszorpciós anyagtranszport vizsgálatára. A módszer egyensúlyi vagy állandósult állapotok periodikus megzavarásán és a rendszer adott jellemzőjére vonatkozó, periodikus válaszfüggvény analízisén alapul. Az anyagtranszport dinamikájára jellemző a folyamat és a periodikus perturbáció között fellépő rezonancia frekvenciája. Az FR-módszer elnevezés az itt vázolt vizsgálati elvre vonatkozik, és nem korlátozódik valamely perturbált változóhoz (ami lehet nyomás, térfogat, hőmérséklet, koncentráció, stb.) továbbá a perturbációra adott és vizsgálatra kiválasztott válasz jel jellegéhez sem (lehet nyomás, felületi vagy térfogati koncentráció, vezetőképesség, stb.). Tehát a válaszfüggvény rögzítésére használt műszerrel szemben támasztott követelmény, hogy kellő érzékenységgel és sebességgel rögzítse a válaszjel változását. Intézetünkben az adszorpciós egyensúly változtatható frekvenciájú térfogat perturbációjára van lehetőség, valamint a válasz nyomásfüggvény rögzítésére és analizálására.



Összegfrekvencia-keltési (SFG) spektrométer határfelületi jelenségek nagy érzékenységgű, *in situ* vizsgálatára

Az ESR-laboratórium által beszerzett ELEXSYS E500 *elektronspinrezonancia-spektrométer* (Bruker Analytik) nagy érzékenysége lehetőséget nyújt igen kis koncentrációban jelenlévő paramágneses centrumok, így szabad gyökök és átmenetifém-ionok kimutatására és vizsgálatára. Ez a tény kiterjeszti a berendezés biológiai problémák megoldásában való felhasználási lehetőségeit. Ezekben a területeken különösen fontos a kis mennyiségben jelenlévő, de az élettani mechanizmusok szempontjából jelentős szabad gyökök tulajdonságainak ismerete. Az új spektrométer a számítógép-vezérelt goniométer segítségével lehetőséget ad egykristály-vizsgálatok végzésére is, ami elsősorban a különleges elektromos és mágneses tulajdonságokkal rendelkező anyagok, nanoszerkezetek és fullerének esetén szükséges.

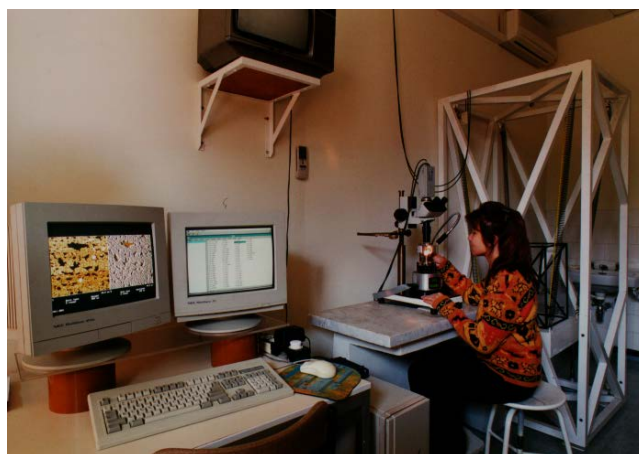


A 2003-ban beszerzett elektronspinrezonancia-spektrométer nanoszerkezetű anyagok vizsgálatára, szabad gyökök, átmenetifém-ionok biológiai szerepének kutatására

A rendezetlen vagy részben rendezett anyagok röntgendiffrakciós laboratóriuma 2000-ben egy Philips X'Pert-MPD rendszer és egy Philips pordiffrakciós-rendszer üzembeállításával folytatta munkáját. A beruházás célja: polikristályos és amorf anyagok, valamint felületi rétegek *röntgendiffrakciós szerkezetvizsgálatának* elvégzése. A 2004-ben beszerzett *Rigaku R-AXIS RAPID diffraktométer* jellegzetessége, hogy sokféle diffrakciós kísérlet elvégzésére alkalmas. Így pl. lehetséges: kis molekulák intenzitásadatainak gyors gyűjtése, az abszolút konfiguráció gyors meghatározása, az elektronsűrűség-eloszlás kísérleti meghatározása, fehérjék térszerkezetének feltárása kb. 150 Å nagyságú elemi cella paraméterig, pordiffrakció mérése. A készülékhez egy alacsony hőmérsékletű berendezés is tartozik, amellyel a kristályminta közvetlen közélről hűthető.



A 2004-ben üzembe állított Rigaku R-AXIS RAPID diffraktométer, amellyel fehérjék térszerkezete is meghatározható



Atomerő és pásztázó alagútmikroszkóp felületek és nanoszerkezetek vizsgálatára

A nanotudományok céljait szolgálja az NT-MDT *Solver-típusú pásztázó tűszondás mikroszkóp*. A berendezés STM (pásztázó alagútmikroszkóp) fejjel, valamint optikai mikroszkóppal, mintaasztallal és AFM-fejjel van felszerelve. A mikroszkópot eddig szilikát nanostruktúrák, katalizátorhordozók és korrodeált vask felületek vizsgálatára használták. A nanokutatásokat szolgálja a Hysitron TriboScope^R *nanoindentáló berendezés* is.

A kombinatorikus katalízist, s ezzel a folyamatokra „szabott” katalizátorok kidolgozását szolgálja a Syncore Reactor és *katalizátorpreparáló robot* berendezés, amely 24 különböző kémiai szintézis egyidejű megvalósítására alkalmas akár folyadék, akár szilárd fázisban. A szintézisek alatt lehetőség van refluxáltatásra inert gázatmoszférában. A "Slurry Phase Reactor" folyadékfázisú reakciók párhuzamos vizsgálatára alkalmas, 16, mágneses keverővel ellátott miniautoklávából (15 ml) álló, teljesen automatizált reaktorrendszer. A *multifunkciós katalizátorvizsgáló berendezés* (RXM-100, Advanced Scientific Designs, Inc., USA) szilárd katalizátorok fizikai kémiai tulajdonságainak a jellemzését és gázfázisú reakciók vizsgálatát teszi lehetővé mind vákuumban, mind atmoszférikus nyomás felett. A berendezésben a következő vizsgálatok végezhetők: különböző gázok kemiszorpciója, BET-felület és pórusméreteloszlás meghatározása, hőmérsékletprogramozott redukció, oxidáció,

deszorpció, kémiai reakciók, kinetikai vizsgálatok stb. A gázfázisú vizsgálati módszereknél a változások hővezetőképességi detektorral és tömegspektrométerrel követhetők.



16-csatornás reaktorrendszer kombinatorikus katalizátortervezéshez, amelyhez egy katalizátor-előállító robot is tartozik

A PVC THERMOMAT 763 készülék a *PVC-degradáció* kinetikájának, valamint *stabilitásának* vizsgálatát végzi. Egy egységben képes a gázáram és a hőmérséklet pontos szabályozására, valamint a degradáció során képződött hidrogénklorid mérésére. A berendezés a funkcionális polimerek kidolgozásához járul hozzá.

A világtendenciáknak megfelelően a 80-as és a 90-es években az Intézet bioorganikus kémiai kutatásaiban egyre inkább előtérbe kerültek a biokémiai, molekuláris farmakológiai, neurokémiai, az élettani folyamatok szabályozásában szerepet játszó vegyületekkel és reakciókkal, azok mechanizmusával kapcsolatos kutatások. Az elemi folyamatok mechanizmusának felderítésében pedig a fotokémiai, fotofizikai és oldatkémiai, oldatfizikai vizsgálatok kapnak egyre nagyobb szerepet. A felületeken lejátszódó folyamatok mechanizmusának megismerésére irányuló kutatások új tulajdonságú anyagok, hatékonyabb katalizátorok kidolgozását teszik lehetővé. Új témaként jelentkeztek a 90-es évek közepétől a *környezetvédelemmel* kapcsolatos kutatások. Ezek közé tartoznak az új, környezetbarát eljárások alkalmazását lehetővé tevő katalizátorok kidolgozásával összefüggő és a hulladékmegsemmisítéssel kapcsolatos, valamint a környezetanalitikai vizsgálatok.

Az Intézet számos területen országos jelentőségű szerepet játszott. A kémiai kutatásokat tekintve a kutatóhelynek az akadémiai-egyetemi szférát az iparral összehangoló, integráló szerepe volt és van jelenleg is.

Az Intézet a "Biológiailag aktív vegyületek kutatása" c. országos és tárcaszintű kutatási főirány koordináló és bázisintézeteként működött 1976-1980 között. A programban számos MTA, egyetemi és más kutatóintézet, vállalati kutatóhely vett részt. A program több, eredeti magyar gyógyszerkészítmény kidolgozásához járult hozzá. 1981-1985 között az Intézet "A kémiai szerkezet és biológiai hatás közötti kapcsolatok törvényszerűségeinek kutatása" c. MTA-KKP/1 jelű, tárcaszinten kiemelt kutatási főirány munkáját hangolta össze. Tevékenységével sikeresen segítette a hazai gyógyszerkutatások teljes vertikumának kiépítését.

A 2004-ben megújult szervezetű Kémiai Kutatóközpont alapvető feladatai a következők:

- a kémia és a vele rokon szaktudományok fontos területein olyan alapvető és nemzetközi színvonalú tudományos kutatások folytatása, amelyek a kutatók összehangolt tevékenységét és korszerű nagyműszerek koordinált alkalmazását igénylik,
- graduális és posztgraduális szakemberképzés,
- szakmai tanácsadás és speciális mérési feladatok ellátása,
- az alaptevékenységgel összefüggő kiegészítő tevékenységek végzése.

A kiegészítő tevékenységek különböző szerződéses K+F-feladatok elvégzésére, mérési szolgáltatásokra terjednek ki.

A korábbi KKKI kutatócsoportjai jelenleg a következőkben felsorolt kutatási irányokban folytatnak tudományos kutatásokat:

- Szerves kémiai és biomolekuláris kémiai kutatások,
- Felületkémiai és heterogén katalízis kutatások,
- Szerkezeti és elméleti kémiai, valamint reakciókinetikai kutatások,
- Anyagtudományi és környezeti kémiai kutatások.

A Kémiai Kutatóközpont kutatásai és a tudomány nemzetközi irányzatai közötti kapcsolatok

A Kémiai Intézet tudományos vezetői már a 90-es évek közepén felismerték, hogy a tudomány nemzetközi mezőnyében a versenyben maradás igénye, a korlátozott anyagi lehetőségek és kutatói létszámok szükségessé teszik a kutatási témák korszerűsítését, az anyagi és a szellemi potenciálnak néhány kiemelt feladatra való koncentrálását.

A természettudományokban megfigyelhető nemzetközi trendek azt mutatják, hogy erősödik a kémia integráló szerepe, s e diszciplína ismeretanyaga egyre inkább nélkülözhetetlenné, módszerei alkalmazandóvá válnak az élettudományok, a nanotudományok, a felületkutatások, az anyagtudományok, az új, funkcionális anyagok létrehozása és a környezettudományok területén. Korunkban a természettudományi kutatási területek egyre erősebben hatnak egymásra, egyre fontosabbak az olyan, projektszemléletű munkák, amelyek több szakterület ismereteinek és módszereinek összehangolását igénylik. Az említettek tükrözik az EU 1998-2002 közötti 5. keretprogramjának különböző K+F projektjei, amelyekhez illeszkedtek a Nemzeti Kutatási Fejlesztési Programban meghirdetett hazai prioritások is. Az előzőek közül az életminőséggel, valamint a versenyképes és fenntartható fejlődéssel kapcsolatos kulcsakciók, ill. generikus akciók tartalmazták azokat a programokat, amelyekhez szellemi és műszeres adottságai, korábbi eredményei révén a Kutatóközpont csatlakozni tudott.

A Kutatóközpont Nemzetközi Tudományos Tanácsadó Testülete 2001-től évente értékelt az Intézet eredményeit. Eddigi jelentései az Intézetben művelt témák túlnyomó részét korszerűnek és nemzetközi szinten is eredményesnek ítélték. A biomolekuláris kémiai, a felületkutatási (nanokémia), valamint az elméleti és szerkezeti kémiai kutatások irányait nemzetközileg is versenyképesnek tartják. Sürgették azonban a témák koncentrálását, a kutatási és műszeres kapacitásoknak alapvetően két, a nemzetközi figyelem előterében álló tématerületre való csoportosítását. Ez a két irány: a *biomolekuláris kémiai kutatások*, valamint a *funkcionális anyagok kutatása*. Ez utóbbi területhez értve a *felületkutatásokat* és a *nanotudományi* kutatásokat is.

A Kutatóközpont szerves kémiai és biomolekuláris kémiai kutatási iránya, a korszerű trendekhez illeszkedve, az élettudományi kutatások integráns részeként tekinthető, különösen,

ha a 2001-2003 közötti időre NKFP-támogatást elnyert MediChem projekt céljait és részfeladatait tekintjük. A Kémiai Intézet által koordinált *MediChem* Konzorcium, *Validált célmolekulákon alapuló gyógyszer és diagnosztikum tervezés* c. projektje a Nemzeti Kutatási Fejlesztési Pályázaton 410 millió forint támogatást nyert el. Az interdiszciplináris kutatási potenciált összefogó konzorcium kutatásainak célja a Magyarországon legfőbb halálókként szereplő szív- és érrendszeri, valamint daganatos megbetegedések és a kapcsolódó idegrendszeri állapotok korai felismerését célzó, nagy kapacitású diagnosztikai eljárások kidolgozása, diagnosztikai reagensek kifejlesztése, valamint a betegségek kezelésére irányuló specifikus gyógyszerek előállítása és terápiás kipróbálása volt.

A MediChem projekt részfeladatai a következők voltak:

- Specifikus diagnosztikai eljárások kidolgozása,
- Új célmolekulák izolálása, szerkezetének meghatározása és validálása,
- Validált, a Protein Adatbankban őrzött vagy az új célmolekulák szerkezetére vonatkozó információk alapján specifikusabb vagy új hatóanyagok tervezése és kémiai szintézise originális gyógyszerek kidolgozása céljából,
- Gyógyszerjelölt molekulák metabolizmusának, célba juttatásának, toxicitásának, továbbá stabilitásának vizsgálata és előrejelzése.

A MediChem program sikerrel teljesítette a tervezett feladatokat. A résztvevők egy szűkebb köre 2004-ben egy újabb három évre szóló pályázatot dolgozott ki, amelyet az Oktatási Minisztérium támogatásra érdemesnek ítélt.

A Kutatóközpont felületkutatással foglalkozó csoportjainak tematikája a legkorszerűbb irányzatokhoz kapcsolódik. A Kémiai Intézet által koordinált, a nanotudományok rendkívül sokrétű és szerteágazó területét felölelő és 2000-2003. évre 110 millió forint támogatást elnyert *Nanoszerkezetű bevonatok fejlesztése* c. projekt (NANOTECH) keretében fémfelületeken olyan komplex, nanostrukturált bevonatrendszereket dolgoztak ki, amelyek ellenállóak a legkülönbözőbb külső hatásokkal (mechanikai, tribológiai, korróziós) szemben, megfelelve a legszélesebb körű gyakorlati igényeknek. Ennek a célnak az elérésére egyrészt új, korszerű felületmódosító eljárásokat alkalmaztak, másrészt a jelenleg használatos felületkezelési technológiákat fejlesztették, illetve megkísérelték helyettesíteni azokat új, környezetbarát eljárásokkal. A kutatás-fejlesztés keretében új, nanoszerkezetű, speciális tulajdonságú, többrétegű bevonatrendszereket alakítottak ki szol-gél technikával, a molekulák önszerveződése alapján, nem-egyensúlyi elektrokémiai eljárásokkal, CVD-, PVD-módszerekkel és lézeres felületmódosítással. Ezeknek a módszereknek a bevezetése azt eredményezheti, hogy világszínvonalú, célszerűen tervezett felületi tulajdonságú termékek lesznek gyárthatók hazánkban.

A NANOTECH projekt kutatási feladatai voltak:

- Vékony bevonati rétegek fejlesztése kémiai úton önszerveződésre képes molekulákkal,
- Nanorétegek kialakítása különböző típusú pigmentek felületén (pigment-kompozitok),
- Nem-egyensúlyi elektrokémiai fémleválasztás,
- Tiszta fém-, ötvözetbevonatok és multirétegek előállítása elektrokémiai eljárással,
- Felületmódosítás fizikai kémiai módszerekkel,
- Bevonat kialakítása lézertechnológiával és CVD-módszerrel.

Az elnyert pályázatoknak jelentős hatása van a kutatások interdiszciplináris jellegének erősítésére, új témák indítására, a korszerű kutatási profil kialakulására, a hazai- és nemzetközi együttműködések erősödésére, továbbá az EU-pályázatokon történő részvételre.

Mind az USA-ban, mind Európában egyre erőteljesebb a tudományos alap kutatásoknak az alkalmazott kutatások és a fejlesztések irányában történő elmozdulása.

Az Intézet tematikája több területen is (pl. nanotudományok, felületkutatások, diagnosztikai kutatások) ebbe az irányba fejlődik. Ez annál inkább szükséges, mert az Európai Unió kutatási programjaihoz való kapcsolódás is ezt igényli.

A kutatási tematika egységesülése a bevezetőben említett első két kutatási irány projektjei révén igen erőteljesen fejlődik. Az elméleti és szerkezetkémiai kutatások mind szorosabban kapcsolódnak a biomolekuláris és a felületkutatási projektekhez.

1997. december 31-étől a korábbi Központi Kémiai Kutatóintézet az MTA Kémiai Kutatóközpont Kémiai Intézetévé alakult át. Az Intézetnek azonban nemcsak a neve változott meg, hanem tematikájában és szerkezetében is megújult.

A Kutatóközpont igazgatósága, a főigazgató javaslatára, 1999-től megkezdte a Központ korszerűsítésére kidolgozott program végrehajtását, amelynek fő elemei a következők:

- témakorszerűsítés,
- a kutatói kapacitás minőségének emelése PhD- és post doc-ösztöndíjasok révén,
- az üzemeltetési infrastruktúra javítása,
- a kutatási infrastruktúra (műszerezettség) korszerűsítése.

A program megvalósítása a szellemi és anyagi erők fokozott mozgósítását igényelte. A témakorszerűsítésben nagy segítséget nyújtott és nyújt jelenleg is a Központ Nemzetközi Tudományos Tanácsadó Testülete. Az anyagi fedezetet jelentős részben pályázatok révén, az MTA támogatásával, illetve saját forrásokból sikerült biztosítani. A tervezett program végrehajtása során minden területen jelentős előrelépést sikerült megvalósítani, bár a K+F támogatások 2003-tól kezdődő jelentős csökkentése erősen fékezi a kedvező folyamatokat.

Az elmúlt évek alatt több korszerű kutatási területen indultak új témák (pl. szupramolekuláris kémia; különleges tulajdonságú, speciális szerkezetű anyagok előállítása; a molekuláris önszerveződés vizsgálata; a biológiai jelátvivő mechanizmusok tanulmányozása; kombinatorikus kémia; határfelületek vizsgálata; glikopeptidek kutatása; szabad gyökök élettani szerepe; nagyműszeres diagnosztikai eljárások, felületspektroszkópiai vizsgálatok). Nagyszámú PhD-hallgató kezdte meg munkáját a Központban, a legtehetségesebb, PhD-fokozatot elnyert fiatalok további munkáját ösztöndíjjal támogatja a Központ, fokozatosan javul az épületek műszaki állapota, s számos új műszert állított üzembe.

4. A tudományos kutatások feladatai és eredményei a KKKI-ban szakterületenként és témánként

Szerves kémiai és bioorganikus kémiai kutatások

Szerves radiokémiai kutatások

Az ötvenes évek kezdetétől a radioaktív szerves vegyületek felhasználása az orvosi, a biokémiai és a kémiai kutatómunkában, valamint az ipari-, elsősorban a gyógyszerkutatás számos területén általános, sokszor nélkülözhetetlen módszerré vált világszerte. Több területen a klinikai gyakorlatban is használtak izotópokkal jelzett szerves vegyületeket. A kérdés fontosságát felismerve a KKKI 1958-ban egy kutatócsoportot hozott létre, amelynek feladatául az izotópokkal jelzett vegyületek szintézismódszereinek kidolgozását és előállítását tűzte ki. A kutatások *Ötvös László* vezetésével indultak el. A csoport vezető kutatói a következők voltak: Bánfi Dezső, Dutka Ferenc, Gruber Lajos, Márton József, Meisel Tiborné, Mlinkó Sándor, Noszkó László, Szarvas Tibor és Teplán István.

Az izotópok megválasztásánál elsődleges szempont volt, hogy a vegyületek minél szélesebb köre legyen radioaktívvá tehető. Ezért a jelzett anyagok előállítására a szén- és a hidrogénatom sugárzó izotópjának a megfelelő pozíciókba történő beépítése volt a feladat. Az említett atomok izotópjai közül elsősorban a hosszú (több mint 5000 év felezési idő) lebomlási idejű, 14-es atomtömegű radioszén (^{14}C) alkalmazására került sor. A radioizotópos szintézisek elvégzéséhez a megfelelő szerves reakciók mechanizmusának pontos ismeretére volt szükség. A kutatások eredményei – amelyek közül csak a legjelentősebbek sorolhatók fel – messze túlnőttek az izotópos szintetikus feladatok teljesítésén. Így pl. tisztázták az egyik legismertebb szerves kémiai reakció, a karbonsav-sókból történő ketonképződés; számos, széndioxid kihatással járó, korábban már ismert átalakulás (pl. Dakin-West reakció, furfurol savas közegben történő oxidatív dekarboxileződése, izocianátok szén-dioxid-vesztéssel végbemenő folyamatai); néhány átrendeződéses folyamat (pl. tetrazén \rightarrow formazán), továbbá néhány csoportcsere-reakció (pl. nitril \leftrightarrow karboxil átalakulás) mechanizmusát.

Az említett – több esetben ma már tankönyvi ismeretanyagul szolgáló – mechanizmusvizsgálaton túlmenően, a csoportcsere-reakciók az izotópok szintetikus felhasználására szolgáltak. Ez azon alapult, hogy egy jól szintetizálható, radioszenet tartalmazó vegyületet azonos funkciót tartalmazó vegyületekkel reagáltatva, a vegyületcsoport egész sorozata állítható elő. Ilyen pl. a karbonsavak karboxilcsoportjainak kicserélődéses átalakulásai vagy az izocianátok cserereakciói. Említést érdemel a radioaktív széndioxidból izotóp szenet tartalmazó káliumcianiddá történő átalakítás kidolgozása igen jó (95 %-on felüli) radiokémiai termeléssel. A K^{14}CN a $\text{Ba}^{14}\text{CO}_3$ mellett az izotópos szintézisek általános kiindulási vegyülete.

A *radioaktív szerves vegyületek kémiájának* megteremtésével az MTA KKKI iskolát hozott létre Magyarországon. Az Intézet munkatársai közül kerültek ki azok a kutatók, akik más intézményekben – Gyógyszerkutató Intézet, Izotóp Intézet, REANAL Finomvegyészgyár, több egyetemi kutatóhely – radiokémiai laboratóriumokat hoztak létre. Bár a szerves radiokémia fénykora a hatvanas évekre datálódik, gyógyszerjelöltek és gyógyszerek izotópos jelzése jelenleg is folyik az érdekelt laboratóriumokban.

Az Intézetben jelenleg is dolgozik egy csoport – Szammer János és Simon Péterné, ill. korábban Tegyei Zsuzsa közreműködésével – amely radioaktív jelzett vegyületek

szintézismódszereinek kidolgozásával segíti, elsősorban a gyógyszerkutatói és -fejlesztési vizsgálatokat.

Heterociklusos és szénhidrátkémiai kutatások

Az Intézetben a megalapítás óta folynak szintetikus szerves kémiai kutatások. A Szerves reakciómechanizmus kutatócsoport első vezetője *Oláh György* volt. Elsősorban szerves fluorvegyületek előállításával és reaktivitásuk vizsgálatával foglalkoztak. Munkájuk kiterjedt az elektrofil aromás szubsztitúciós folyamatok tanulmányozására is. 1957-ben jött létre *Messmer András* irányításával a Szerves reakciómechanizmus és analitikai kutatócsoport, amely 1970-ben Szerves szintetikus és reakciómechanizmus néven osztállyá szerveződött. Ennek tevékenysége a heterociklusos és a szénhidrátkémiai vizsgálatokat fogta össze. A két tématerület 1984-ben szervezetileg különvált: *Pintér István* vezetésével egy Szénhidrátkémiai kutatócsoport (1993-tól osztály) alakult, amely 1998-ig működött, a Heterociklusos kémiai csoport pedig *Hajós György* irányításával osztállyá bővülve végzi jelenleg is kutatómunkáját.

Heterociklusos kémiai kutatások

A kutatómunkában a 70-es évek végéig *Messmer András* és *Hajós György* mellett *Szimán Oszkár*, *Gelléri András*, *Bátori Sándor*, *Riedl Zsuzsanna* és *Timári Géza* vett részt. Az osztály személyi összetétele – hasonlóan az Intézet többi részlegéhez – az évek során jelentősen átalakult: míg a kezdeti években kizárólag állandó státuszt betöltő kutatókból és technikusokból állt, fokozatosan, egyre növekvő mértékben, megjelentek az egyetemi hallgatók, akik vagy ötévesen szakdolgozatukat készítették, vagy doktori munka elkészítésére és a fokozat megszerzésére vállalkoztak. Az elmúlt 4-5 év során ez a változás annyira jellemzővé vált, hogy ma az Osztályon mindössze három állandó státuszú – mindegyikük osztály-, ill. csoportvezető beosztásban lévő – kutató és három technikus dolgozik, emellett 12 nappali tagozatú, ill. doktori iskolába beiratkozott hallgató végez kutatómunkát.

A heterociklusos kémia területéről kiindulva két új szervezeti egység is létrejött az utóbbi három évben. Az egyik a múltat idézi fel, amikor az Intézet munkájának megindulásakor a szerves kémiai analízis és szintézis egy szervezeti egységbe tartozott. A 2000-ben önállósult önkiszolgáló, *szerves analitikai laboratórium* – *Riedl Zsuzsanna* vezetésével – főként a preparatív kémiai munkát, így elsősorban a szintetikus szerves kémiát hivatott szolgálni. A folytonosan fejlesztett műszerpark ma egy Unicam UV-VIS spektrométerből, egy Nicolet FT-infravörös spektrométerből, egy Varian 200 MHz-es NMR-készülékből, egy optikai forgatást mérő készülékből és egy denzitométeres vékonyrétegkiértékelő készülékből áll. A legutóbbi évtől a csoport már klasszikus elemanalitikát is végez, és így a preparatív munkával kapcsolatos minden rutin módszer a kutatók rendelkezésére áll.

A másik szervezeti változás 2001-ben következett be, amikor *Soós Tibor* – aki korábban az Osztályon készítette el doktori dolgozatát – a Kutatóközpont főigazgatója egy új kutatócsoport megalakításával bízta meg. Az így létrejött Fémorganikus csoportban ma már öt PhD-hallgató dolgozik. Kutatási területük korábban részleteikben nem tanulmányozott módszerekre terjed ki: új, organokatalitikus eljárások felismerésére, enantioszelektív reakciók kidolgozására és a fluoros kémia felhasználására szelektív eljárásoknál.

Az Osztály kutatói aktívan részt vállaltak és vállalnak ma is a tudományos közéletben. Így pl. az MTA Elméleti Szerves Kémiai Munkabizottságot 1960 óta *Messmer András* vezette 2004-ig.

Kitűnő szakmai kapcsolatokat alakítottak ki néhány külföldi, főként európai kutatóhellyel. Így pl. a francia Giff-sur-Yvettei CNRS intézettel, a német Bochumi és Duisburgi Egyetemmel, a svéd Lundi Egyetemmel, a belga Antwerpeni Egyetemmel és az osztrák Grazi Egyetemmel. Mindezen intézményeknél az Osztály kutatói hosszabb időt töltöttek vendégkutatóként, és számos közös közlemény született. Jelentős nemzetközi kapcsolatrendszer alakítottak ki a 2000 óta működő COST B16 „Reversal of antibiotic resistance” programon belül, ahol Hajós György a Management Committee tagja. E program kapcsán jelentősen felgyorsultak az Osztály által szintetizált heterociklusos vegyületekkel végzett biológiai hatásvizsgálatok. Jelenleg Bécs, Pozsony, Lizsaban, Manchester és Szeged különböző egyetemi tanszékei tesztelik az átadott származékokat.

A hazai és a nemzetközi kooperációkat két jelenleg is futó projekt jelentős mértékben segíti. Az egyetemeket és ipari vállalkozásokat is magába foglaló MediChem konzorcium új, hazai kapcsolatok kiépítéséhez segíti az Osztályt, nemzetközi viszonylatban pedig az Európai Uniónál 2003-ban elnyert „Center of Excellence” program nyújt hatékony támogatást.

1993-ban Hajós György elvállalta a kezdetben regionálisnak induló Blue Danube Symposium on Heterocyclic Chemistry szervezőbizottsági tagságát, és irányításával két ízben Magyarországon is (1993: Sopron, 1998: Eger) megrendezésre került ez az esemény. Ez az osztrák–szlovák indíttatású szimpóziumsorozat – Magyarország bekapcsolódásával – elsősorban azt tűzte ki célul, hogy a résztvevő országok kutatói szorosabb szakmai kapcsolatot építhessenek ki egymással. Ma már a kezdeti hármas összefogáshoz Szlovénia és Csehország is csatlakozott.

A heterociklusos kémia Európában legnagyobb jelentőségű konferenciáját – European Conference on Heterocyclic Chemistry – 2004 szeptemberében Sopronban az Osztály közreműködésével sikeresen rendezték meg.

A Novartis-céggel fennálló kitűnő szakmai kapcsolatok eredményeként 1992 óta a cég finanszírozásában az Intézetben évente egy vagy két alkalommal meghívott előadók tartanak előadásokat (Novartis Lectures). Az előadók a szakma kiválóságai. Közöttük üdvözölhettük pl. a Nobel-díjas Jean Marie Lehn-t is.

Az Osztály ipari megbízásos munkákban való részvétele a 60-as évek végén kezdődött. Kezdetül a mai napig a legfontosabb hazai ipari partner az EGIS (korábban EGYT) Gyógyszergyár, de számos más vállalattal is (pl. Chinoín, Biogal, Mikrolin Szövetkezet) végeztek közös kutatásokat. A külföldi megbízások lehetősége a 90-es években vetődött fel. E munkák mértéke ma már meghaladja a hazai megrendelésű kutatásokét. A legfontosabb partnervállalatok a következők: Sigma-Aldrich, Lancaster, Maybridge, Altana Pharma, Grünenthal, Solvay, LAB GmbH.

Néhány fontosabb kutatási eredmény:

Kondenzált azóliumsók közvetlen szintézise és reakciói nukleofilekkel

A címben jelzett témakörű kutatások az Intézet alapítása óta folynak, és még ma is egyre változatosabb szerkezetű heterociklusok előállításához vezetnek. A kezdeti években a vizsgálatokat a számos új gyűrűváz szintézisére koncentrálták, majd újabb kutatási szakaszt jelentett a regiospecifikus gyűrűfelnyílási reakciók megfigyelése és felhasználása azolildiének- és triének előállítására. Szintén ebből az érdeklődési körből fakadt néhány váratlanul stabilis ikerionos származék előállításának felismerése. Ez utóbbi két kutatási területre – beleértve a heterociklusos vegyületek továbbalakítási lehetőségének feltárását – koncentrálnak munkáikat jelenleg.

Angulárisan és linárisan kondenzált gyűrűvázak szintézise és átalakítási lehetőségei

Szignifikáns összefüggést észleltek az anelláció típusa és a kémiai viselkedés között. A jelenséget „heteroaromás anellációs effektus” néven általánosították. A vizsgálatok eredményeit szemiepiikus kvantumkémiai számításokkal is alátámasztották.

Vegyértékizomerizációs reakciók tanulmányozása

A 70-es években figyeltek fel az azid-tetrazol vegyértékizomerizáció elméleti és gyakorlati jelentőségére. Kimutatták, hogy ez az egyensúly jelentős mértékben függ a policiklusos vázak kondenzációs jellegétől. A legutóbbi években triazóliumsóknál is vegyértékizomerizációt észleltek, ami a pozitív töltésű vegyületek körében egyedülálló. Ennek felismerése új reakcióutak kidolgozását tette lehetővé.

Kondenzált [1,2,4]triaziniumsók szintézise

A címben megadott téma kutatásai kezdetben ipari indíttatásúak voltak, és több, központi idegrendszerre ható – antidepresszáns hatású – vegyület felismeréséhez vezettek. A vegyületeknél észlelt toxikus hatás miatt sajnos nem kerülhetett sor gyakorlati alkalmazásra. A vegyületkör ugyanakkor számos elméleti érdekességet is rejtett, és az ezeket célzó szintetikus vizsgálatok több új gyűrűváz első szintézisét eredményezték. A vegyületcsalád kutatása egy modern aspektusban: az azometin iminszármazékainak előállításával és cikloaddícióinak vizsgálatával ma is folyik.

Pd-kondenzált keresztkapcsolások felhasználása policiklusos vegyületek előállításánál

Ezt a legutóbbi években ismertté vált technikát hatékonyan tudták felhasználni policiklusos származékok szintéziséhez, s eddig már mintegy 15 új gyűrűváz előállítását – köztük négy természetes indolalkaloid totálszintézisét – oldották meg ezen az úton. A jelenleg is folyamatban levő kutatások főként a piridazinok és analógjaik területén ígéretesek.

Részvétel biológiailag aktív származékok előállítására célzott hatásterületeken

Az utóbbi évek kutatási stratégiája – különösen az Európai Unióval való együttműködés fontossága – megköveteli, hogy hangsúlyozottan foglalkozzanak adott hatásterületen aktív származékok előállításával. Jelenleg négy területen (DNS-interkaláció, multidrogrezisztencia-gátlás, fájdalomcsillapítás, neuro-protekción) végeznek intenzív kutatómunkát. Ezen vizsgálatok mindegyike orvosi-biológiai-biokémiai kooperációban folyik.

Szénhidrátkémiai kutatások

Cukorformazánok reakciói

Felismerték, hogy az acetilezett cukorformazánok dezacetilezésekor az „irreguláris Zemplén-dezacetilezés” a formazilcsoport aktiváló hatása folytán 1,4-eliminációs-addíciós mechanizmussal megy végbe, így az alkalmazott nukleofil reagenstől függően a 2-es helyzetben különböző csoportokkal szubsztituált új 2-dezoxi-aldózformazánok előállítása válik lehetővé.

Cukorfoszfiniminek

Az első cukorfoszfiniminek a kutatócsoport írta le. A vegyületcsoport továbbalakításával értékes, új cukorszármazékok szintézisét oldották meg: karbamidokat, tiokarbamidokat, heterociklusos származékokat, ciklikus karbamátokat állítottak elő. A foszfiniminek reakcióinak kiterjesztése a ciklodextrinek területére új típusú, karbamidhíddal összekapcsolt ciklodextrin-dimerek megfigyelését tette lehetővé.

A kutatócsoport munkájában Pintér István, Kovács József, Mády Virág és Mészáros Péter vett részt.

Glikózaminoglikán oligoszacharidok szintézise

1999-ben újjáalakult a Szénhidrátkémiai kutatócsoport *Fügedi Péter* vezetésével. Kutatómunkájuk eredményeként nagyszámú glikózaminoglikán oligoszacharid egyetlen szintézissel történő előállítására alkalmas szintézisstratégiát dolgoztak ki, és ezzel előállították a heparin és a heparán-szulfát diszacharid egységeit. A kidolgozott szintézisstratégia ortogonális védőcsoportok használatán alapszik, e védőcsoportok tetszőleges sorrendben történő eltávolítása révén egy alapváz tetszőleges pozíciói, illetve azok minden kombinációja hozzáférhető további kémiai módosítások céljára. A szintézisstratégia általánosan alkalmazható funkcionalizált oligoszacharidok előállítására. A metodika segítségével új gyógyszerhatóanyagok szintetizálhatók.

Természetes szerves anyagok szintézise

A természetes szerves vegyületek mind élettani, mind elméleti és szintetikus szerves kémiai vonatkozásaik miatt igen jelentős vegyületcsoportot képeznek. A kutatásukra szerveződött osztály *Szántay Csaba* vezetésével 1976-ban alakult meg az Intézetben. Az elmúlt évtizedek eredményeiből az alábbiakat emeljük ki.

A morfin szintézise

A morfin még ma is a leggyakrabban alkalmazott fájdalomcsillapítók egyike, így a gyógyászatban nélkülözhetetlen. Ugyanakkor, mint kábítószernek rendkívül káros társadalmi hatása van. Különösen vonatkozik ez acetilszermazékára a *heroin*-ra. A morfin világforgalmát igen nehéz ellenőrizni, hiszen alapanyagát, a mákot nagyon sok helyen könnyűszerrel lehet termelni. Célszerű lenne, ha a hatóanyagot gyárakban totálszintézissel állítanák elő. A szintetikus kémiai munka eredményeként sikerült a csoportnak egy *iparilag is megvalósítható morfinszintézist* kidolgoznia. Ezzel megnyílt az út a nagyléptékű gyártás megvalósítása előtt.

A munkában elsősorban Blaskó Gábor és Dörnyei Gábor vett részt.

Az epibatidin szintézise

Egy, a dél-amerikai őserdőkben honos béka (*Epipedobates tricolor*) mérgező anyagot tartalmazó bőréből amerikai kutatók 1992-ben rendkívül kicsiny mennyiségben (500 békából 0,1 mg-ot) egy alkaloidot izoláltak, amelyet *epibatidin*-nek neveztek el. Az anyag rendkívül erős, a morfinnál 500-szor hatékonyabb fájdalomcsillapítónak bizonyult. Ennél is fontosabb tulajdonsága, hogy ez a fájdalomcsillapítás *nem az opiát receptorokon* való kötődés révén következik be, így nem okozhat gyógyszerfüggőséget. Két lehetőség adódik, hogy a vegyülethez nagyobb mennyiségben hozzájussunk és biológiai hatását alaposabban tanulmányozzuk: megpróbáljuk a békát tenyészteni vagy megoldjuk a vegyület *totálszintézisét*. A tenyésztés során kiderült, hogy a béka néhány generáció után már nem termeli többé az epibatidint. Ez a mérgezőanyag ugyanis az állat védekezőszere.

A természetes szerves anyagok többsége *királis szerkezetű*, és csak az egyik enantiomer formában fordul elő, vagyis optikailag aktív. A biológiai hatás többnyire összefügg a molekula térszerkezetével. Ezért az ilyen anyagok totálszintézise csak akkor tekinthető megoldottnak, ha egyetlen, a farmakológiailag kedvező hatású enantiomer van a kezünkben. A kísérleti munka eredményeként a kutatócsoportnak sikerült egy rendkívül előnyösen végrehajtható epibatidinszintézist kidolgoznia, amely enantioszelektíven, azaz közvetlenül az egyetlen, kívánt térszerkezetű alkaloidot szolgáltatja. Következésképpen megnyílt a lehetőség nagyobb mennyiségek előállítására és a részletes biológiai vizsgálatokra.

Ebben a munkában elsősorban Balogné Kardos Zsuzsa, Moldvai István és Temesváriné Major Eszter vett részt.

Anyarozs-alkaloidok

Az anyarozs-alkaloidokból és származékaikból sok kiváló gyógyszer nyerhető. Előállításuk a rozson tenyésző gombákból történik, tehát ki van téve az időjárás viszonyosságainak, ezért mesterséges előállításuk jelentős előnyökkel járna. Az anyarozs-alkaloidok igen bonyolult szerkezetűek, így racionális, iparilag is megvalósítható szintézisük rendkívüli kihívást jelent. Sikerült ezen alkaloidok alapvázát, az ún. *ergolinvázat* hosszú évek kitartó munkájával három alternatív úton is szintetizálni. A három út közül az egyik végül is elvezetett a természetes anyagok szintéziséhez, és egy szabadalomképes eljárás alapját képezte lizergsav és származékainak (pl. ergokriptin) előállítására.

A kutatásokban Dörnyei Gábor, Incze Mária, Moldvai István és Temesváriné Major Eszter vett részt.

Új spiro-oxindol-vázás vegyületek szintézise

2-oxotriptaminok és homológjaik ketonokkal és aldehidekkel végrehajtott intramolekulás Mannich-reakciójával új spiro-, ciklikus ketonokkal bisz-spiro-oxindolokat állítottak elő. Feltárták az eddig nem vizsgált reakció érvényességét a sztérikus és a szerkezeti viszonyok függvényében. GABA-receptor kötődési vizsgálatokkal néhány származék esetében ígéretes antagonistá hatást állapítottak meg.

A munkában Dörnyei Gábor és Incze Mária vesz részt.

Új oxigén heterociklusos vegyületek szintézise szigmatróp átrendeződési reakciók felhasználásával

A 90-es évek elején elkezdett kutatásokat folytatva, vizsgálták hidrokinonok és naftolok reakcióit gyűrűs allil-alkoholokkal, cikloalkán-diolokkal, és metallilalkohollal. Vizsgálták a reakciók mechanizmusát és a termékek szerkezetét, sztereokémiáját. A keletkező új vegyületek közül kiválasztott mintákat citosztatikus vizsgálatok céljából átadták az Onkológiai Intézetnek.

A munkában – a BME Szerves Kémiai Tanszékével együttműködésben – Kovács Péter vesz részt.

Taxoidok izolálása

A 90-es évek farmakológiai és klinikai vizsgálatainak alapján az emlőrák leghatásosabb kemoterápiás szerének a kaliforniai fenyő (*Pinus californiarum*) kérgéből kinyerhető *taxol* bizonyult. Ezen vegyület – és származékai – szintézisének fontos intermediere a 10-dezacetilbaccatin-III, ami az európai tiszafa (*Taxus baccata*) tűleveléből izolálható. Az anyag kinyerésére és tisztítására a KKKI kutatócsoportja nagyítható eljárást dolgozott ki. A szombathelyi PRENOR Kertészeti Kft.-vel együttműködve vizsgálták a különböző klónozott ültetvények évszak-, időjárás- és szárításfüggő hatóanyagtartalmát. A több évig tartó együttműködés optimális termesztési feltételek kialakítását eredményezte. Ennek köszönhetően a Bristol-Meyers cég nagy mennyiségben vásárolja a PRENOR által szüretelt és szárított tiszafalevelet. A módszer jelentősége abban rejlik, hogy szemben a kéreg lehántásakor elpusztuló fával, a levelek szüretelése nem vezet a növény pusztulásához, a levelek újra kinőnek, a szüretelés többször megismételhető.

A munkában Dörnyei Gábor és Incze Mária vesz részt.

Nukleozid-, nukleotid- és oligonukleotid-analógok szintézise és bioorganikus kémiai kutatása

A hazánkban a KKKI-ben az 1960-as évek végén *Ötvös László* által elindított bioorganikus kémiai kutatások legfontosabb célja az volt, hogy a biokémiai átalakulásokat a *szerves kémia már ismert törvényei* alapján magyarázza meg. Mivel ezek a folyamatok biopolimereken vagy általuk irányítottan mennek végbe, a bioorganikus kémia a biokémián kívül szoros kapcsolatban áll a makromolekuláris kémiával is. Az alkalmazott metodikák több terület együttműködését (szerves szintézis, izotópszintézis, kromatográfiás analízis és elválasztástechnika, *in vitro* biokémiai műveletek, állatkísérletek) igénylik. A KKKI-ben művelt témák jelentős része a racionális gyógyszerkutatás céljait szolgálta.

Az eltelt három évtized alatt elért leglényegesebb bioorganikus kémiai eredmények közé sorolható a biopolimereken végbemenő reakciókban döntő jelentőségű szterikus effektusok értelmezésére kidolgozott *orientációs és kompressziós szterikus szubsztituens elmélet*. Ezzel számos enzim (hidrolázok, polimerázok, transzferázok) által katalizált átalakulás szubsztrátspecificitását – beleértve a sztereospecificitást is – sikerült megmagyarázni, és új, kvantitatív szerkezet-hatás összefüggésekkel leírni.

A nukleinsavak bifunkciós, fiziológiai hatású (rákellenes) alkilező szerekekkel végzett vizsgálata révén, a *DNS jobbracsavarodó kettőshélix szerkezetét kémiaiilag* is sikerült bizonyítaniuk oldatban, fiziológiás körülmények között.

A kutatócsoport további jelentős eredményei:

- A világon elsőként valósították meg a természetes nukleozidok furanóz gyűrűje helyett ciklopentánvázat tartalmazó, optikailag aktív, karbociklusos nukleozidok sztereospecifikus szintézisét enzimek alkalmazása nélkül.
- Nagyszámú, módosított pirimidinbázist tartalmazó, nukleozid- és nukleotid-analógot szintetizáltak és ezek felhasználásával
 - értelmezték a nem természetes nukleotidokat tartalmazó nukleinsavak enzim (DNS-polimeráz katalizálta) szintézisében tapasztalható szubsztrátspecificitást,
 - meghatározták az említett analógokat tartalmazó oligonukleotidok konformációját, duplexstabilitását, enzimkatalizálta hasíthatóságát és genetikai információtartalmát (templát aktivitás),
 - megmagyarázták egyes nukleozidok antivirális és tumorelles hatásának molekulárfarmakológiai alapjait.
- A 90-es évek elején hazánkban elsőként kezdték meg a különböző kórokozók génexpresszióját a transláció stádiumában gátló, ún. antiszensz oligonukleotidok (AON-ek) kutatását, ami jelenleg a vírus-, ill. rákkemoterápia új és rendkívül ígéretes irányvonalát képviseli. A korábbi vizsgálatok alapján optimális tulajdonságokkal rendelkező bázismódosítás (5-hexinil-uracil) beépítésével több, jelentős biológiai aktivitással rendelkező AON-t állítottak elő. Ezek közül külön említést érdemel a KKKI-538 jelű analóg, amely *in vitro* már szubmikromólos koncentrációban is hatásosan gátolta az AIDS kórokozó HIV-1 vírus szaporodását.
- Megállapították, hogy különböző, potenciálisan tumorelles hatású AON-ekhez változó számú kismolekulájú citosztatikumot, 5-fluor-2'-dezoxiuridint (FdU) kapcsolva, az FdU relatív hatékonysága több mint egy nagyságrenddel növelhető. Az ilyen oligonukleotid-gyógyszer konjugátumok az antiszensz elven működő gyógyhatású vegyületek elvileg új csoportját képezik.
- Az említettekre alapozva, azok továbbfejlesztésével egy új kemoterápiái gyógyszerelvet ("antisense directed prodrug therapy") alakítottak ki. Eszerint az AON felismeri a

valamely betegségért (rák, baktérium-, vírusfertőzés) felelős gént, ill. az azt expresszáló RNS-t, és az antiszensz oligonukleotidhoz kovalensen kötött gyógyszermolekula lokálisan lehasadva, igen nagy szelektivitással kifejti hatását.

Az említett kutatások révén jött létre hazánkban a bioorganikus kémia, amely ma már számos laboratóriumban fontos kutatási terület. Megemlítendő, hogy a KKKI kezdeményezésére alakult meg az MTA Bioorganikus Kémiai, majd később Nukleotidkémiai Munkabizottsága, amelyek jelentős szerepet töltenek be a magyar bioorganikus kémiai kutatások fejlődésében.

A kutatások gyakorlati eredménye a HEVIZOS márkanéven forgalomba került herpeszellenes antivirális készítmény, amely svájci és német klinikai vizsgálatok szerint az Acyclovirrel egyenértékű, ekvimoláris dózisa számolva azt lényegesen felülmúló hatékonyságú gyógyszer.

A kutatásokban az 1968-2000 közötti időszak különböző periódusaiban *Ötvös László* irányításával a következő kutatók vettek részt: Béres József, Bolyán Dóra, Elekes Zsuzsa, Ébinger Katalin, Fellegvári Irén, Ganzler Katalin, Gruber Lajos, Kemény Vera, Kovács Teréz, Kraicsovits Ferenc, Kruppa Gábor, Moravcsik Ernő, Ruff Éva, Sági Gyula, Sági János, Szabolcs Ottóné, Szemző Attila, Tegyei Zsuzsanna, Telegdi Lászlóné, Tóth József, Tömösközi István, Tüdős Ferencné és Weisz Imre.

Ezen időszakban a legfontosabb nemzetközi együttműködő partnerek a következők voltak: E. Selegny (University of Rouen, Franciaország), R.T. Walker (University of Birmingham, Anglia), E. DeClercq (Catholic University of Leuven, Rega Institute, Belgium), M. Vorličkova (Institute of Biophysics, Brno), L. Gorbacheva (Institute of Chemical Physics, Moszkva), A. Previero (INSERM Unité, Montpellier, Franciaország).

2001-től a korábbi osztály jogutóda a Nukleotidkémiai csoport (tud. csoportvezető: *Sági Gyula*), a Simonyi Miklós vezette Bioorganikus kémiai osztály egységként működik. A Csoport jelenlegi kutatási témái részben a korábbiak folytatásai (antiszensz oligonukleotidok és új karbociklusos nukleozidok szintézise), másrészt új kutatási irányok (módosított peptid-nukleinsav analógok szintézise és tulajdonságaik vizsgálata). Jelenleg a csoportban Sági Gyula, Bajor Zoltán, Sipos Ferenc és Tomasz Jenő dolgozik.

Receptor- és fehérjekötődési vizsgálatok

1977-ben *Simonyi Miklós* irányításával kezdődött el a KKKI-ban a gyógyszermolekulák szérumfehérjéken és receptorokon történő kötődésének vizsgálata, szoros kapcsolatban a gyógyszerkutatással és új gyógyszerek kifejlesztésével. A kutatások eredményeként igazolták, hogy az emberi vérben a *királis* hatóanyagok sztereoizomerjei különböző mértékben kötődhetnek, ill. eltérő kötődési interakciókat mutathatnak. Ez a felismerés azért lényeges, mert az összes ma alkalmazott gyógyszer mintegy 25 %-a sztereoizomer keverék, azaz racémformában kapható.

A csoport néhány további eredménye:

- A kötődés kémiai, termodinamikai jellemzőinek meghatározásával hozzájárultak a GABA_A/benzodiazepin, glicin és szerotonin ioncsatorna receptorok szerkezetének és működésének leírásához, az agonista és antagonisták hatásainak megkülönböztetéséhez.
- Az ioncsatornákra vonatkozó felismeréseket molekuláris biológiai módszerrel békapetében kifejlesztett emberi receptorok elektrofiziológiai vizsgálatával igazolták.
- Kimutatták, hogy ftalidizokinolin alkaloidok GABA_A-receptoron való kötődésének affinitását az határozza meg, hogy az adott molekula egyensúlyi konformációi közül mekkora hányadot képvisel a receptor számára kedvező forma.

- Megállapították, hogy a GABA-receptor A, B és C alosztálya, valamint az idegsejtek felvételi helyei a flexibilis GABA-molekulát egymástól különböző torziós szögekkel jellemezhető konformációkban kötik meg.
- Bizonyították, hogy a benzodiazepinek megkötődése GABA_A-receptoron a gyűrűkonformáció felismerésén alapul.
- Immobilizált fehérjéket tartalmazó kromatográfiás oszlopokon jellemezték számos vegyületcsoport kötődési affinitását, ill. sztereoselektivitását.
- Királis HPLC-technikával megvalósították több racém gyógyszer analitikai, ill. mikropreparatív rezolválását.
- Igazolták az allosztérikus kölcsönhatás jelenségét humán szérum albumin – korábban egymástól függetlennek tekintett – két fő gyógyszerkötőhelye között.
- Több farmakon esetén kimutatták, hogy a vérszérumban történő kötődésért nem a fő fehérjekomponens (albumin), hanem a 40-szer kisebb koncentrációjú α_1 -savas glikoprotein (AGP) a felelős.
- Kromatográfiás úton szétválasztották a humán AGP különböző kötődési tulajdonságokkal rendelkező genetikai variánsait.

A kutatások gyakorlati jelentősége, hogy az eredmények ismereteket szolgáltatnak a vizsgált molekulák farmakokinetikájáról, a hatás kifejtésének helyéről és módjáról az élő szervezetben. A számos farmakon gyógyszerfejlesztése során kidolgozott módszerekre négy szabadalmi oltalmat nyertek. 2004-től egy pályázat útján elnyert kapilláris elektroforézis készülék alkalmazásával fehérjeanalitikai és korszerű kötődésvizsgálati technikákat dolgoznak ki.

A munkában Maksay Gábor, Kardos Julianna (1995-ig) és Kovács Ilona (1995-ig), valamint Fitos Ilona, Benéné Visy Júlia, Mády Görgy és 2000 óta Bíró Timea vett részt.

Kiroptikai és molekulamodellézési vizsgálatok

1999-ben *Simonyi Miklós* irányításával jött létre a Kiroptikai és molekulamodellézési laboratórium egy cirkuláris dikroizmus (CD) spektropolariméter és korszerű modellezési programok pályázati forrásból történt beszerzése révén. A kutatások a biológiában és a gyógyszerekkel történő gyógyításban nagy szerepet játszó – nemkovalens kölcsönhatások útján keletkező – szupramolekuláris rendszerek vizsgálatára irányulnak. Az indukált kiralitás jelenségének alkalmazásával az alábbi eredményeket érték el:

- Természetes és félszintetikus karotinoidok aggregátumai a szupramolekula *card-pack*, ill. *head-to-tail* típusára jellemző UV/VIS és CD-exciton spektrumot adnak. Igazolták, hogy a láncvégi OH-csoportok száma és helyzete határozza meg az aggregátum fajtáját.
- Megfogalmazták a szupramolekuláris kiralitás geometriai feltételeit.
- Kiroptikai módszerrel jellemezték néhány fehérjemolekula kötőhelyét a jelző molekulák konformációs torzulása, ill. a fehérje felületén történő aggregációja által indukált kiralitás alapján.
- Specifikus kiroptikai jelölő (szonda) molekulákat találtak az AGP genetikai variánsainak megkülönböztetésére.
- Modellézték a *card-pack* és *head-to-tail* aggregátumok szerkezetét.
- A kiroptikai szondamolekulákat és receptorligandokat a fehérje kötőhelyekre dokkolták.

A vizsgálatoknak az a jelentősége, hogy a természetben elterjedt és fontos biológiai funkciót betöltő szupramolekulák (pl. fehérje + klorofill + karotinoid komplex a fotoszintézisben, karotinoid aggregátum a virágszirmokban) mintájára spektroszkópiái

kísérleti módszert vezetnek be a nehezen tanulmányozható, szekunder kémiai kötések által létrehozott komplexek szerkezetének és működésének jellemzésére.

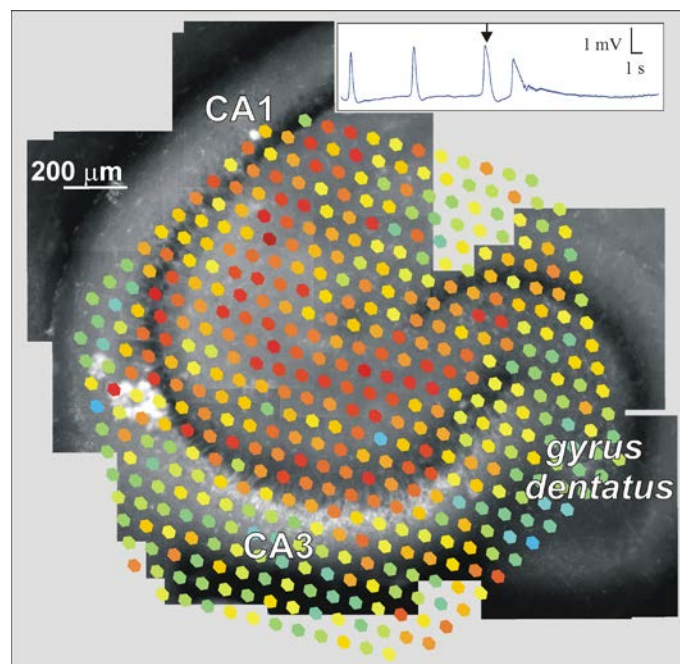
A munkában Zsila Ferenc, Bikádi Zsolt, Fitos Ilona és Benéné Visy Júlia vett részt.

Neurokémiai kutatások

Az Intézetben a neurokémiai kutatások 1995-ben indultak *Kardos Julianna* vezetésével. Azóta mind a munkatársak, mind a velük együttműködő szakmai partnerek száma négyszeresére, a műszerállomány értéke pedig több mint a tízszeresére növekedett. E tényezők nagymértékben hozzájárultak ahhoz, hogy az Intézet elnyerte az Európai Unió *Center of Excellence on Biomolecular Chemistry* címét és az ezzel együttjáró erkölcsi, valamint anyagi támogatást. A neurokémiai kutatások az idegi fő gátló és serkentő *membránreceptor* és *transzporter altípusok* kötődési és funkcionális folyamatainak molekuláris- és patomechanizmusára irányulnak.

Az említett, a központi idegrendszer működése szempontjából alapvető jelentőségű célfehérjék szabályozzák a kémiai jelátvitelben szerepet játszó ionok és molekulák transzmembrán fluxusának sebességét. Mivel természetes környezetükben, az idegsejt plazmamembránjában, ezek a folyamatok a másodperc tört része alatt játszódnak le, molekuláris mechanizmusuk tanulmányozása csak rendkívül érzékeny (radioaktív-, fluoreszcens-nyomjelzéses és elektrofiziológiai) detektálási módszerek, valamint a kémiai gyorskinetikai, nagy idő- (fotodióda mátrix) és térbeli (két- és háromdimenziós) felbontású képalkotó technikák kombinációjával lehetséges. A radioaktív detektáláson alapuló gyorskinetikai módszert *Kardos Julianna* amerikai tanulmányútjainak során sajátította el és valósította meg itthon “*A gammaaminovajsav membránreceptor által szabályozott transzmembrán kloridion fluxus*” vizsgálatára irányuló, US-Hungarian Joint Fund-nál elnyert pályázat (1993-1996) keretében. A módszer továbbfejlesztését, a fluoreszcenciadetektálás és a kémiai gyorskinetika kombinációjának megvalósítását az azóta elnyert hazai, valamint külföldi pályázatok tették lehetővé.

Az 1995 óta eltelt években a transzmembrán ion- (kálcium, nátrium, kálium, klorid) és molekulafluxus (gamma-aminovajsav, glutaminsav, nukleotid) változások, valamint reaktív szabad gyökök képződésének követésére alkalmas radioaktív, spektroszkópiai és elektrofiziológiai detektáláson alapuló, *in vitro* módszereket fejlesztettek ki, amelyeket *in vivo* vizsgálatok egészítettek ki. Ezen a metodikai alapon új, funkcionális tesztekkel dolgoztak ki, amelyeket ismert hatású receptor és transzporter agonistákkal, ill. antagonistákkal ellenőriztek. Számos gyógyszerfejlesztés alatt álló vegyületet is megvizsgáltak.



In vitro epilepsziamodelben, patkány agyszeleten regisztrált, térbeli potenciáeloszlás (színes hatszögek) a nyíllal jelzett időpillanatban. A potenciál nagyságát színskála kódolja a kéktől (nyugalmi, hiperpolarizált) a pirosig (aktív, depolarizált). Az ábra háttérében a hippocampális szelet fluoreszcenciás képe látható néhány anatómiai régió megjelölésével.

A molekuláris mechanizmusok, a farmakofór modellezés és a neurofarmakológia területén folyó kutatásokban Kardos Julianna, Nyikos Lajos és Emri Zsuzsa irányításával Antal Károly, Barabás Péter, Héja László, Kovács Ilona, Kovács Richárd, Lasztóczy Bálint, Molnár Tünde, Nyitrai Gabriella, Simon Ágnes, Skuban Nina és Szárics Éva vett részt.

Farmakobiokémiai kutatások

A farmakobiokémiai kutatások – a bioorganikus kémiai kutatások részeként – Dénes Géza irányításával kezdődtek el a KKKI-ben 1980-ban. A kutatásokban részt vett: Veres Zsuzsanna, Szinai István, Ledniczky Mária és Jemnitz Katalin is. A kutatócsoport fontos eredményeket ért el a pirimidin nukleozidok kémiai szerkezete és biokémiai transzformációja közötti törvényszerűségek feltárásában. A kutatások irányítását 1991-től Vereczkey László vette át.

Néhány fontos kutatási eredmény:

- Humán máj mikroszóma frakciót alkalmazva megállapították, hogy alacsony paracetamol koncentráció alkalmazása során számos citokróm P450 enzim vesz részt a paracetamol toxikus metabolitjának képződésében, míg nagy (toxikus) koncentrációknál elsősorban a CYP2E1 felelős a mérgezés kialakulásáért.
- Arra a következtetésre jutottak, hogy a *p*-nitrofenol hidroxilezését nem kizárólag a CYP2E1 enzim katalizálja, hanem további két citokróm P450 enzim, a CYP2A6 és a CYP2C19 is hozzájárul az aktivitáshoz.
- *In vitro* korrelációs módszert dolgoztak ki *in vivo* humán polimorf N-acetilézés előrejelzésére.
- Humán hepatocytákon vizsgálták a CYP1A1 indukálhatóságát glukokortikoidok jelenlétében. Ellentétben a patkány vizsgálatok, illetve a humán magzati májban végzett vizsgálatok eredményeivel megállapították, hogy a dexametazon nem fokozta, hanem

csökkentette a 3-metilkolantrén okozta CYP1A1 indukciót. A CYP1A1 enzimaktivitás és enzimfehérje-tartalom csökkenése mellett azonban a dexametazon nem befolyásolta a CYP1A1 mRNS szintjét. Feltételezésük szerint a dexametazon posztttranszkripció hatást fejt ki, csökkentheti a *de novo* CYP1A1 protein szintézisét, vagy fokozhatja a CYP1A1 enzimfehérje lebomlását.

- Parciális hepatectomiát követően a regenerálódó májból izolált sejtekben jelentősen megváltozik a citokróm P450 enzimek mennyisége és indukálhatósága. A CYP1A1, CYP2E1, CYP3A1/2 enzimek alapmennyisége lecsökken ugyan, de a sejtek megtartják indukálhatóságukat. Sőt, a CYP1A1 enzim indukálhatósága 2-3-szor magasabb a 3 napig regenerálódó májból izolált sejtekben, mint az áloperált állatokból származó hepatocytákban.
- A Gyógyszerkutató Intézet Rt. (Budapest) által fejlesztett új AMPA antagonist, a GYKI-47261 enzimindukáló hatását vizsgálták patkány és humán májsejtekben. Az enzimaktivitások és a CYP2E1 fehérjetartalom alapján a GYKI-47261 erős CYP2E1 enziminduktornak bizonyult.
- Kimutatták, hogy a dexametazon koordináltan indukálja a p-nitrofenol metabolizmusában résztvevő UDP-glukuroniltranszferáz (UGT1A6) enzim és a metabolit eliminációjában résztvevő mrp2 transzporter aktivitását.
- A környezeti toxikológiában, valamint a gyógyszerfejlesztés preklinikai fázisában az egyik leggyakrabban használt genotoxikológiai vizsgálat az Ames-teszt. A mai napig a hatósági protokollok a premutagén vegyületek metabolikus aktiválásához kettős indukcióval (β -naftoflavon, fenobarbital) kezelt patkányok májából preparált S9 frakció használatát írják elő. Kutatásaik fő célja olyan *in vitro* metabolikus aktiváló rendszer kidolgozása, amely a humán metabolizmust modellezi és a metabolizmusban részt vevő enzimek *in vitro* indukciója segítségével direkt humán kockázatbecslésre ad lehetőséget. Ez a munka az OTKA támogatásával a Fodor József Országos Közegészségügyi Központ Országos Környezetegészségügyi Intézet munkatársaival kialakított együttműködés keretében jelenleg is folyik.

Az Osztály munkatársai szervezték meg 1999-ben Budapesten a 7th European International Society for the Study of Xenobiotics (ISSX) Meeting-et. Jelenleg a 16th Microsomes and Drug Oxidations Meeting, Budapest rendezvény előkészítésén dolgoznak.

A kutatásokban Vereczkey László, Monostory Katalin, Jemnitz Katalin és Veres Zsuzsanna vesz részt.

Szabad gyökök élettani szerepének kutatása

A szabad gyökök élettani szerepének vizsgálata egyre nagyobb jelentőségű az egészség megőrzésében. Világszerte mind több kutatócsoport vesz részt ezekben a kutatásokban. A szabad gyökök rákos, illetve nem rákos megbetegedések és szövődményeik kialakulásában játszott szerepének kutatását 1999-ben kezdték el az Intézetben.

A cukorbetegség esetében fellépő szövődmények létrejöttét állatokban a Semmelweis Egyetem II. Belgyógyászati Klinikájával együttműködésben tanulmányozzák, míg a daganatos betegségekre jellemző szabad gyökös mechanizmusokat a Szent István Egyetem Állatorvosi Karával együttesen kutatják. A rákos megbetegedések fotodinamikus terápiájának szabad gyökös vonatkozásaival is foglalkoznak mind hazai (ELTE), mind távol-keleti (Inje University, South Korea; Yantai University, China) szintetikus vegyészek bekapcsolásával. A vizsgálatok eredményei alapján, valamint más, főleg gáz- és nagyteljesítményű folyadékkromatográfiás adatokból kvantitatív szerkezet-hatás számításokat is végeznek.

A munkákban Jakus Judit, Héberger Károly, Stadler Krisztián, Jenei Veronika, Farkas Orsolya, Zór Kinga és Pásztiné Gere Erzsébet vesz részt.

Élettanilag jelentős fémek és fémkomplexek kutatása

A KKKI-ban az élettanilag jelentős fémek komplexeinek vizsgálatát *Lakatos Béla* kezdte el 1968-ban. A téma jelentőségét az adta, hogy abban az időben fokozottabban kezdett előtérbe kerülni a fejlett országokban az egészséges táplálkozás igénye, továbbá egyre mélyebben kezdték megismerni a fémionok fiziológiai folyamatokban játszott szerepét. Annak ellenére, hogy néhány, fémek hiányára visszavezethető betegség – pl. vérszegénység – okai régóta ismeretesek voltak, nem állt rendelkezésre mellékhatások nélküli, kis dózisban is alkalmazható, jól felszívódó és hasznosuló, terhes anyák szervezete által is jól tolerált anémiás készítmény. A széles körben alkalmazott szervetlen fémsók, szerves sók és kelátkomplexek, biopolimerek fémkomplexei alkalmatlanok voltak az említett követelmények teljesítésére.

A kutatások első fázisában aminosavakkal, majd tőzezből izolált különböző huminsav frakciókkal képeztek komplexeket. Ezek a vegyületek azonban nem bizonyultak alkalmasnak. A munka során kiderült, hogy a célnak a természetes eredetű, közepes molekulatömegű és közepes stabilitási állandójú fémkomplexeket adó vegyületek felelhetnek meg. Ilyen anyag a növényi (pl. citrusfélék, alma) pektinből nyert *poligalakturonsav*. Különböző fémpoligalakturonát komplexeket állítottak elő, megvizsgálták a szerkezetüket, felszívódási sajátosságait és a jellemző klinikai paramétereket.

Az egyes fémek megfelelő fiziológiai hatásának optimális eléréséhez a többi fém, a vitaminok és az aminosavak interakcióját is ismerni kell. A munka eredményeként sikerült olyan poligalakturonát komplexeket előállítani, amelyek a fémeket, a kémiaiailag lehetséges határokon belül, bármely arányban tartalmazhatják. Elsőként állítottak elő *bázisos fémpoligalakturonátokat*, amelyek révén pl. vitaminokat is hozzá lehet kötni a fémkomplexekhez.

A kutatás gyakorlati eredményei a FERROCOMP, a MULTICOMP és a MAGNACOMP márkanevű termékek, amelyek 1993-1998 között kerültek forgalomba és jelenleg is kaphatók a patikákban. A FERROCOMP – három klinika vizsgálati szerint – a jelenleg elérhető legjobb, vérszegénység elleni készítmény.

Néhány élelmiszeradalékot is sikerült kifejleszteniük, amelyeket pl. müzlik adalékként hoztak forgalomba.

Jelenleg az egyes fémkomplexek kémiai sajátosságai és élettani szerepe közötti kapcsolatokat igyekeznek tisztázni.

A kutatásokban *Lakatos Béla*, *Mády György*, *Meisel Tiborné*, *Vinkler Péter*, *Szentmihályi Klára* és *Sándor Zoltán* vett részt.

Újabban, a fémek ismert katalitikus hatásai miatt, kutatásaikat kiterjesztették fémvegyületek antioxidáns/prooxidáns tulajdonságainak vizsgálatára, valamint természetes eredetű komplexáló anyagot tartalmazó, antioxidáns tulajdonságú Mg-, Mn- és Zn-vegyületek előállítására. E vegyületek tulajdonságait, hatásosságukat in vitro és részben in vivo tesztelték. Hiperlipidémiás állatokban igazolták pl. a Mg-malát és a Mg-poligalakturonát kezelés antioxidáns hatását. Az újabb eredmények felhasználásával lehetővé válik a fémion-pótlás és az antioxidáns kezelés együttes megvalósítására alkalmas fémkomplex hatóanyagok tervezése.

A fémek interakciójáról és a bejuttatott fémek metabolizmusáról azonban még mindig kevés információ van. Ezért a kutatásokat a fémmetabolizmusok és az együtthatások tanulmányozásának irányába is kiterjesztették a Semmelweis Egyetem II. sz. Belgyógyászati Klinikájával közösen.

A kutatásokban *Szentmihályi Klára*, *Blázovics Anna* és *Vinkler Péter* vesz részt.

A természetes eredetű (pl. gyógynövények) fémkomplexek kutatásának területén fémanalitikai vizsgálatokat is végeznek. Ebben a témában vezető szerepet játszanak az

országban. Elsősorban a diuretikus hatású, a májbetegségek és a diabetes terápiájában használható gyógynövényeket vizsgálják. Megállapították, hogy egyes gyógynövény-teáknak nemcsak diuretikus hatásuk van, hanem K/Na arányuk is igen kedvező (100 feletti). A kutatások a Semmelweis Egyetem Farmakognózia Intézetével közösen folynak.

A vizsgálatokban Szentmihályi Klára, Fodor Judit és Vinkler Péter vesz részt.

Növényvédőszer kutatások

A magyar mezőgazdaságnak az 1970-es években tapasztalt fellendülése hozta magával a vegyipar mezőgazdasági célú anyagai iránti fokozott igényeket. Egyre nagyobb lett a kereslet az új növényvédő szerek iránt. Az előző évtizedek szerves és bioorganikus kémiai eredményeire alapozva az Intézet 1979-ben kapcsolódott be a hazai növényvédőszer-kutatásokba a herbicid antidotumok területén. A herbicid antidotumok olyan molekulák, amelyek a nem kellően szelektív herbicidek haszonnövényt károsító hatását csökkentik gyomirtó hatásuk mérséklése nélkül. Más szóval az antidotumok alkalmazásával a nem-szelektív herbicidek új növénykultúrákban való felhasználására is lehetőség nyílik. A kutatás elsődleges célja az volt, hogy originális, a hazai vegyipar intermedierbázisára épülő, nemzetközi piacon is értékesíthető herbicid antidotumokat szintetizáljanak.

A *Dutka Ferenc* vezette Izotópos reakciómechanizmus csoport által indított kutatások kezdetben csak a hatóanyagok előállítására irányultak. Az előállított molekulákat az Intézetben kialakított növénylaboratóriumban tesztelték, amely azzal az előnnyel járt, hogy a vegyületek hatásának ellenőrzése helyben történt, s így a biotesztek eredményeként végrehajtott szerkezetmódosítások még a növénykísérletek befejezése előtt megkezdődhettek. A kutatások később kiterjedtek az előállított új molekulák biokémiai hatásáért felelős kémiai reakció és az azt közvetítő enzimek azonosítására. A kutatási tevékenység kiterjesztése a létszám növekedését eredményezte, és a kutatócsoportból létrejött a Növényvédőszer kutatási osztály.

A kutatómunkájuk eredményeként 1980-ban szabadalmaztatott új herbicid antidotumcsalád egy tagja, az MG-191(2-diklórmetil-2-metil-1,3-dioxolán) igen hatékonyan bizonyult a kukorica gyomirtásában használt tiokarbamát és klóracetanilid herbicidek fitotoxicitásának mérséklésében. Ez a vegyület típus szerkezetileg alapvetően különbözött az akkor kereskedelmi forgalomban levő antidotumoktól. Az eredmények igazolták, hogy az addigi nézetek ellenére nemcsak analóg szintézissel, hanem a kémiai reakciókészség és a biológiai válasz közötti összefüggések alapján is lehet növényvédőszert kifejleszteni. Az új vegyület nagyüzemi gyomirtási technológiában történő használatát az Intézet a szegedi Gabonatermesztési Kutatóintézettel közösen dolgozta ki. Az MG-191 gyártástechnológiájának fejlesztését és gyártását a fűzfői Nitrokémia Ipartelepek Rt. végezte. A jelenleg is gyártott termék 18 országban nyert szabadalmi védeltséget. A licencet a Monsanto Chemical Co. (USA) 3,5 M USD értékben vásárolta meg. A termék gyártásából és eladásából származó royalty díj a szabadalom lejártáig, 2003-ig jelentős bevételhez juttatta az Intézetet. Az MG-191 névvel fémjelzett diklórmetilacetál/ketál típusú vegyületek ma már az antidotumoknak egy külön kémiai családját alkotják. Az antidotumok felhasználását és biokémiai hatásmódját összefoglaló könyv szerkesztői (Crop Safeners for Herbicides: Development, Uses and Mechanism of Action, K.K. Hatzios and R.E. Hoagland, eds., Academic Press, San Diego, 1989) az Intézet kutatóit (Dutka Ferenc, Kőmíves Tamás) egy fejezet megírására kérték fel. Ugyancsak a magyar antidotumkutatások nemzetközi elismertségét jelezte, hogy 1990-ben Budapesten rendezték meg az első nemzetközi antidotum konferenciát (International Conference on Herbicide Safeners). A konferencia valamennyi előadásának anyagát a Zeitschrift für Naturforschung c. folyóirat közölte. Az MG-191 biokémiai hatásmódjának kutatását az utóbbi évtizedben az Intézet nemzetközi

együttműködésben (University of Durham, UK) végezte, és az eredményeket számos publikációban, valamint nemzetközi konferenciákon ismertette.

A kutatómunkában az Intézet részéről Dutka Ferenc vezetésével Barta István, Ekler Zsigmond, Fodor Tamásné, Hulesch Ágnes, Jablonkai István, Kárpáti Marianna, Kőmíves Tamás, Kőmíves Veronika és Márton Attila vett részt.

Prostaglandin kutatások

A proszttaglandinok és analogonjainak kutatása az 1970-es évek elején kezdődött az Intézetben. A kutatócsoportnak optikailag aktív oxabiciklo-oktenon sztereospecifikus hidroxilálásával, azt követően redukcióval és Wittig-reakcióval, majd dehidratációval jó termeléssel sikerült egy proszttaglandin intermediert (PGF_{2α}) előállítani. Prins-reakcióval sztereospecifikusan Corey-laktont készítettek, amelyből az említett proszttaglandinszármazék igen előnyösen nyerhető. A PGF_{2α} a gyógyszeriparban alkalmazott fontos köztitermék. Az eljárást a Chinoin Gyógyszergyár az elsők között hasznosította a világon.

A kutatásokat Tömösközi István, Gruber Lajos és Major Eszter végezte.

Oxigén heterociklusos vegyületek kutatása

A természetes oxigén-heterociklusos vegyületek kutatása az 1973-1977 közötti években *Farkas Loránd* tanácsadóként történt bevonásával és *Sóti Ferenc* csoportvezető közvetlen irányítása alatt folyt az Intézetben. Számos flavon, benzofurán, dibenzopiron származékot állítottak elő. A kutatásokban Incze Mária, Antus Sándor, Baloghné Kardos Zsuzsa is részt vett. 1977-től a csoport beolvadt a Természetes szerves anyagok szintézise elnevezésű osztályba.

Peptidkémiai kutatások

1976 és 1985 között egy peptidkémiai kutatócsoport működött az Intézetben *Medzihradzky Kálmán* irányításával. Az előállított rövidített és módosított szekvenciájú opioid peptidek közül kiemelkedő jelentőségű biológiai aktivitásúnak bizonyult az enkefalin-klórmetil-ke-ton, amely a szinaptoszóma membránokon irreverzibilis receptorinhibitornak bizonyult. Az N-terminálison melfalánt tartalmazó analóg segítségével sikerült bizonyítaniuk, hogy az irodalmi adatokkal szemben, a morfinban is jelenlévő fenolos hidroxil nem feltétlenül szükséges az opioid hatás kiváltásához. Megemlítendő, hogy a csoport kutatói olyan enzimszubsztrátokat szintetizáltak, amelyek a pontmutációval módosított szerin-proteázok jellemzésénél fontos szerepet játszottak.

A kutatásokban DiGléria Katalin, Hepp József, Magyar Anna és Huszthyné Szécsi Judit vett részt.

Fizikai kémiai kutatások

Katalitikus oxidáció és enzimmodellelés

A 60-as évek elején *Nagy Ferenc* vezetésével részletesen vizsgálták a hidrogénmolekula átmenetifém-komplexekkel szembeni homogén katalitikus aktivitását. A szubsztrátumok bizonyos körében érvényesnek talált szabadgyökös mechanizmusra ma is gyakran hivatkoznak az irodalomban. A csoport, ill. a később létrejött Katalízis osztály érdeklődése a biológiai rendszerekben működő oxidoreduktáz enzimek modellezése felé fordult. *Simándi László* irányításával olyan átmenetifém (kobalt, vas, mangán, molibdén) komplexeket állítottak elő, amelyek aktiválják a dioxigént és utánozzák bizonyos metalloenzimek működési mechanizmusát (*funkcionális enzimmodellek*). Kobaloxim és ferroxim komplexekkel sikerrel modellezték az élettani fontosságú *fenoxazinon szintetáz és katechol enzimeket*. Részletes kinetikai vizsgálatok segítségével tisztázták a modellreakciók mechanizmusát. Megállapították, hogy a vizsgált esetekben a szabad és a koordinált gyökönionok fontos szerepet játszanak.

Gyakorlati célú munkájuk során a Clariant GmbH (Németország) számára olyan fémkomplexeket sikerült előállítaniuk, amelyek a mosószerek fehéritőkomponenseinek oxidációs reakcióit gyorsítják.

A munkában *Simándi Lászlóné, May Zoltán, Szigyártó Imola, Szeverényi Zoltán, Németh Sándor, Záhonyi Domokosné, Poszmik Györgyné* és *Barna Teréz* vett részt.

Növényvédőszerkörnyezetbarát előállítás

A mezőgazdaságban használt kis dózisu gyomirtók gyártásánál széles körben alkalmazzák a veszélyes és környezetkárosító *foszgent*. Mivel a szigorodó környezetvédelmi szabályok miatt a foszgen használatát a jövőben várhatóan korlátozni fogják, új eljárásokra van szükség. A 80-as évek közepétől a szulfonil-karbamid típusú gyomirtószer előállításához alkalmazott foszgent kísérelték meg más eljárás révén helyettesíteni. A Nitrokémia Ipartelep Rt. megbízásából *környezetkímélő* eljárásokat dolgoztak ki a legelterjedtebben használt szerek *foszgenmentes* előállítására. Az új technológiák palládiumkomplexekkel történő katalitikus karbonilezésre épülnek. Magyarországon és külföldön számos eljárásukra szabadalmi védeltséget kaptak.

Az eredmények kidolgozásában *Besenyei Gábor, Németh Sándor, Viski Péter* és *Simándi László* vett részt.

Koordinációs kémiai kutatások

A foszgenmentes katalitikus karbonilezés köztitermékeinek vizsgálatából fejlődtek ki az új palládiumkomplexek szintézisére és szerkezetvizsgálatára irányuló kutatásaik. Arén-szulfonilazid és kétmagvú palládiumkomplexek reakciójában számos, korábban nem ismert, ún. A-vázis nitrén- és azidkomplexet állítottak elő. Az új vegyületek szerkezetét röntgendiffrakciós módszerrel határozták meg. Elsőként végezték el az arén-szulfonil-azidok és a palládiumdimer közti reakciók kinetikai vizsgálatát. A *szerkezet és a reakcióképesség* kapcsolatát a Hammett-összefüggés és a meghatározott kötéstávolságok alapján értelmezték.

A kutatásokban *Foch Izabella, Besenyei Gábor* és *Simándi László* vett részt.

Gyors oldatreakciók vizsgálata

A reakciósebességek mérése fontos információkat szolgáltat a reakciók elemi lépéseinek jellegéről, ami a reakciómechanizmusok kutatásának alapvető célja. Számos reakció sebessége hagyományos módszerekkel mérhető, nagy sebességek esetén (milliszekundumos felezési idők) azonban különleges módszerekre van szükség. A 60-as évek végén építették meg a gyors oldatreakciók követésére alkalmas *első hazai stopped-flow készüléket*, amely az áramló reakcióelegy gyors megállításán és az azt követő spektrofotometriás sebességméréseken alapul. A készülék lehetővé tette szerves vegyületek gyors, permanganátos oxidációjának részletes vizsgálatát és a reakciómechanizmus felderítését. A módszer több hazai kutatóhelyen is meghonosodott a közben megjelent kereskedelmi készülékek felhasználásával. Jelenleg a pirofoszfáto-mangán(III) komplexek gyors oxidációs reakcióit vizsgálják.

A kutatásokban Jáky Miklós, Bozor Imre és Simándi László vett részt.

A Katalízis osztály több nemzetközi tudományos konferenciát is szervezett, így pl. a XXII International Conference on Coordination Chemistry, 1982, Budapest, és a 4th International Symposium on Activation of Dioxygen and Homogeneous Catalytic Oxidation, 1990, Balatonfüred rendezvényét.

Az Osztály vezetője (Simándi László) a *Reaction Kinetics and Catalysis Letters* c. folyóirat alapítása óta (1974) annak főszerkesztője. Elindítása óta részt vesz a COST Chemistry nemzetközi programban, először mint a D1 Akció (Biokoordinációs kémia) Igazgató Bizottságának (MC) részidejű elnöke, majd a COST Technikai Bizottság magyar tagja. Jelenleg a D21 Akció (Metallo-enzimek és kémiai modelljeik) MC tagja. Hungarian COST Chemistry Day címen 2000-ben szimpóziumot szervezett a magyar résztvevők számára.

Hordozós fémkatalizátorok kutatása

A KKKI-ban megalakulása óta folynak heterogén katalitikus kutatások. Kezdetben Nagy Ferenc vezetésével Móger Dezső csoportjában részletesen vizsgálták kis molekulák hordozómentes fémeken végbemenő kemisorpcióját és reakcióit. Ezekben a vizsgálatokban a hagyományos adszorpció és az akkor újnak tekintett elektrokémiai módszereket alkalmazták.

A hetvenes évek végétől a Margitfalvi József vezette kutatások fő célja *hordozós fémkatalizátorok* előállítása és vizsgálata lett. A nyolcvanas évek elejétől ezeket a katalizátorokat szerves kémiai reakciókban – kemo- és enantioszelektív hidrogénezés, dehidrogénezés, izomerizáció, hidrodehalogénezés, redukzív aminálás – vizsgálták.

Az utóbbi két évtizedben megnőtt az igény a *szuperaktív és szelektív*, úgynevezett *reakcióra szabott katalizátorok* kifejlesztése, illetve új katalitikus reakciók kidolgozása iránt. Ezeknek a céloknak az elérését új utakon kísérelték meg. Egyrészt a hordozós fémkatalizátorok előállításánál, módosításánál végbemenő felületi reakciók és a katalitikus reakciók elemi lépéseinek *molekuláris szinten* történő megismerésére törekedtek, másrészt új kísérleti technikákat, mint például a kombinatorikus katalízis, nagy áteresztőképességű reaktorok, *in situ* Mössbauer- és FTIR-spektroszkópia, alkalmaztak.

Fémkatalizátorok előállítása

Kutatásaik fő célja jelenleg is a váz- és a hordozós *fémkatalizátorok előállítása* (módosítása), ezeknek a katalizátoroknak a szerkezete és a vizsgált reakcióban mutatott aktivitása-szelektivitása közötti összefüggések feltárása. Fontos területnek tekintik az aktív fázis nanokörnyezetének megváltoztatását is.

Kutatásaikban a következő katalizátortípusok előállítására helyezik a hangsúlyt:

- fém-fém kölcsönhatást mutató, ötvözet típusú, kétfémes katalizátorok előállítása egyfémes katalizátorok módosításával,
- fém-fém kölcsönhatást mutató, kétfémes katalizátorok előállítása a második fémnek az első fémen ionos formában történő stabilizálásával,
- fém-hordozó kölcsönhatást mutató kétfémes katalizátorok előállítása a második fémnek a hordozón ionos formában való rögzítésével,
- "fémion-fémnanoklaszter" aktív hely-együtteseket tartalmazó egy- és két-fémes katalizátorok előállítása.

Ónorganikus vegyületek felhasználásával olyan ötvözet típusú, hordozós Sn-Pt-katalizátorokat állítottak elő, melyekben széles tartományban változtatták az Sn/Pt nanoötvözetek összetételét. Vizsgálták a hidrogén, a szén-monoxid és az oxigén kemisorpcióját különböző Sn/Pt arányok mellett, valamint az új típusú Sn-Pt-katalizátorok aktivitását telítetlen aldehidek telítetlen alkoholokká történő szelektív hidrogénezésében, továbbá szén-monoxid alacsony hőmérsékletű oxidációjában. *In situ* FTIR- és Mössbauer-spektroszkópiai mérésekkel mindkét reakcióban bizonyítékot kaptak a hordozós Sn-Pt nanoötvözet-fázisok rekonstrukciójára oxidatív és redukzív atmoszférában.

A munka során elérték, hogy "irányított kémiai kölcsönhatások" vagy "irányított felületi reakciók" által biztosítani tudják az adott kémiai reakcióban katalitikusan aktív felületi alakulatok kizárólagos képződését. Olyan váz- és hordozós fémkatalizátorokat állítottak elő, amelyek szelektivitása a vizsgált reakciókban jelentősen felülmúlja a hagyományos módon előállítottakat.

Szerves karbonilcsoport, illetve szén-monoxid aktiválása

A karbonilcsoport aktiválásának meghatározó szerepe van a telítetlen aldehidek, ketonok telítetlen alkoholokká történő hidrogénezésében, a zsírsavak és származékaik katalitikus átalakításában. Kimutatták, hogy az "Snⁿ⁺-Pt", "Reⁿ⁺-Pt", illetve az "Snⁿ⁺-Ru" fémion-fémnanoklaszter aktív hely-együtteseknek meghatározó szerepe van a karbonilcsoport aktiválásában, ami egyrészt kedvezően növeli a katalizátor szelektivitását, másrészt biztosítja, hogy a reakció alacsonyabb nyomáson és hőmérsékleten játszódjon le.

A karbonilcsoport aktiválásának analógiája alapján a CO aktiválását is bizonyították Snⁿ⁺-Pt, illetve Au^{δ+}-Au és Meⁿ⁺-Au (Me = Fe, Mn, V, Ti) fémion-fémnanoklaszter aktív hely-együtteseket tartalmazó katalizátorokon. Kimutatták, hogy a CO aktiválódása alacsony hőmérsékleten az Au^{δ+}-Au, magas hőmérsékleten a Meⁿ⁺-Au aktív hely-együtteseken játszódik le.

Aszimmetrikus hidrogénezés

A 90-es évek közepétől az Osztyál a heterogén katalizátorokat *aszimmetrikus hidrogénezési* reakciókban is alkalmazza, vizsgálják a heterogén katalizátorokon a módosító által kiváltott királis indukció eredetét. A heterogén katalitikus, aszimmetrikus hidrogénezési reakciókban ugyanis a módosító a felelős a királis információ átviteléért.

A királis indukció, illetve a szubsztrátum-specifikusság eredetének felderítése során kidolgozták az úgynevezett "árnyékoló hatás modell" ("Shielding Effect Model"). A modell lényege a reakcióba lépő prokirális molekula és a királis módosító között a folyadékfázisban végbemenő *kompleképződés*. A komplexben a királis módosító "árnyékoló hatás"-t fejt ki a reagálandó prokirális molekulára. Az árnyékolás eredményeképpen a reagálandó molekula már csak egy meghatározott módon képes a heterogén katalizátor felületén adszorbeálódni és hidrogéneződni, így *csak az egyik optikai izomer keletkezik*. Az említett modell jól írja le a

királis indukció eredetét mind az α -keto-észterek, mind az analóg szerkezetű prokirális ketonok cinkona alkaloidok jelenlétében végbemenő aszimmetrikus hidrogénezésében.

Cinkonidin és cinkonin alkaloidok, mint kolloid stabilizátorok segítségével különböző átmérőjű (1,5-3,5 nm), hordozómentes Pt-nanorészecskéket állítottak elő, melyeket részletesen vizsgáltak α -keto-észterek enantioszelektív hidrogénezésében. Számítógépes modellezéssel és az idekapcsolódó kvantumkémiai és molekuláris mechanikai számításokkal valószínűsítették a „szubsztrátum-módosító” komplex és a Pt-kolloid közötti kölcsönhatást. Az eredmények alátámasztják a korábban javasolt "árnyékoló hatás modell" helyességét.

Kombinatorikus katalízis

A kutatócsoport csupán néhány éve kezdte el a "kombinatorikus katalízis" megjelölésű kutatási terület művelését. A kutatásoknak az ad különös jelentőséget, hogy segítségükkel a reakciókra szabott katalizátorok kidolgozása lényegesen nagyobb valószínűséggel és sokkal gyorsabban valósítható meg. A kutatások két fő elemre épülnek: nagy áteresztőképességű reaktorrendszerek használata, komplex informatikai platform kidolgozása. Az informatikai platform megteremtése során először a Holografikus Kutatási Stratégiát (HKS) fejlesztették ki, majd ezt kiegészítették a Mesterséges Neurális Hálózatok (MNH) alkalmazásán alapuló információgyűjtő módszerrel. A kidolgozott informatikai rendszer a következő lehetőségeket biztosítja: a többdimenziós kísérleti terekben végzendő mérések számának jelentős mértékű csökkentése; a globális optimum elérése viszonylag kisszámú kísérlet elvégzése esetén is, az összetétel – aktivitás közötti összefüggések feltárása. HKS-MNH informatikai rendszer minden olyan területen alkalmazható, ahol a kísérleti tér nagy kiterjedésű, de az elvégezhető kísérletek (mérések) száma korlátozott.

Az informatikai háttér az alábbi nagy áteresztőképességű kísérleti berendezések működését segíti: robottal kiegészített, 24 reaktort tartalmazó rendszer heterogén katalizátorok előállítására, 16 reaktoros rendszer gőzfázisú reakciók atmoszférikus körülmények között történő vizsgálatára, 16 reaktoros miniautokláv-rendszer folyadékfázisú reakciók vizsgálatára 150 bar nyomásig és 250 °C hőmérsékletig.

Az említetteken túlmenően jelentős eredményeket értek el ipari katalizátorok módosításával különböző eljárások szelektivitásának növelésében. Az alkalmazott kutatási eredményeket több jelentős cég (Air Products and Chemicals Inc., USA; Clariant GmbH, Németország; MOL Rt. stb.) is hasznosítja.

A kutatásokban *Margitfalvi József* irányításával a következők vettek részt: Gőbölös Sándor, Hegedűs Mihály, Tompos András, Tálás Emília, Kristyán Sándor és Borbáth Irina.

Zeolitikémiai és zeolitikatalízis kutatások

A zeolitok katalitikus hasznosításának kezdete az 50-es évekre tehető. Az Amerikai Egyesült Államokban a Union Carbide Corporation kutatói ezekben az években szintetizáltak először olyan zeolit molekulaszitát, a savas karakterű Y-zeolitot, mely a szénhidrogén-krakkolás sokkal aktívabb katalizátora, mint a petrolkémiai ipar által használt amorf alumínoszilikátok. Ugyanezekben az években vált nyilvánvalóvá, hogy a zeolitok nem ásványi ritkaságok, hanem nagy tömegben fordulnak elő földfelszín közeli üledékes kőzetekben.

Az Intézetben zeolitikémiával és zeolitikatalízissel 1967-ben, *Schay Géza* akadémikus irányítása mellett, *Kalló Dénes* és *Papp János* kezdett el foglalkozni. Abban az időszakban mutatták ki, hogy a Tokaji-hegység üledékes kőzeteiben jelentős mennyiségű zeolit, nevezetesen klinoptilolit és mordenit van. Kézenfekvőnek látszott, hogy a kutatást a természetes zeolitok vizsgálatával kezdjék. *Beyer Hermann*, *Engelhardt József* és *Valyon József* a 70-es években, *Pálné Borbély Gabriella* a 80-as évek elején kapcsolódott be a zeolitok vizsgálatába. Az elmúlt évtizedek során valamennyien a zeolitikutatás nemzetközileg

elismert képviselőivé váltak. A kutatók viszonylag hamar felismerték, hogy a nagyobb változatosságban, kémiai és fázisösszetételében tervezhetően és reprodukálhatóan előállítható szintetikus zeolitok mellett a természetes előfordulású zeolitok gyakorlati jelentősége alárendelt a katalízisben. Mindamelllett, a természetes és a szintetikus zeolitok kutatása a KKKI-ban párhuzamosan, egymással kölcsönhatásban fejlődött.

A tokaj-hegyaljai klinoptilolit- és mordenittartalmú riolittufa közettani és fizikai kémiai vizsgálata mellett az Intézet közreműködött a rétegfeltáró munkákban, a felszíni jövesztésre alkalmas összletek körülhatárolásában. A természetes zeolitok alkalmazása a víztisztítási technológiákban és a növénytermesztésben látszott ígéretesnek. Kalló Dénes és Papp János a Kertészeti Egyetemmel együttműködésben klinoptilolit-hordozós, retard hatású nitrogén-foszfor-kálium (NPK) műtrágyát fejlesztett ki. A műtrágya, ill. zöldségtáp alkalmazása a tápanyagok maximális hasznosítását teszi lehetővé, kiküszöbölve a tápanyagfelesleg okozta környezetkárosítást. A természetes zeolitok hasznosítására irányuló kutatás egy másik eredménye a szabadalommal védett, több országban értékesített, kommunális szennyvíztisztítási eljárás (a ZEOFLOCC-eljárás). Az eljárás révén a biológiai szennyvízkezelés hatékonysága 30-50 %-kal volt növelhető. A természetes zeolitok szennyvíz-technológiai alkalmazásának kutatása 2001 és 2004 között az Európai Unió által támogatott projektek keretében folytatódott.

A katalitikusan aktív alakulatok viszonylagos szerkezeti és energetikai homogenitása miatt a zeolitok alkalmazása a katalíziskutatásban jelentős mértékben hozzájárult egyes katalitikus reakciók mechanizmusának mélyebb megértéséhez. A tanulmányozott reakciók között találjuk például az alkének izomerizációját és hidratálását, az alkoholok dehidratálását, az aromások alkilezését és dezalkilezését, az alkil-aromások izomerizálását és átalkilezését, valamint az alkánok átalakításait.

Kalló Dénes, Papp János, Engelhardt József, Detrekőy Emil és munkatársaik kutatási eredményei közül a következőket említhetjük meg.

- A xilolok átalakulásainak vizsgálata során megállapították, hogy e vegyületek a xilolok monomolekuláris izomerizációja (molekulán belüli metilcsoport-vándorlása) a gyengébben savas helyeken, míg bimolekuláris átalakulása toluollá és trimetil-benzollá az erősebben savas helyeken megy végbe.
- A toluol etilén alkilezésének termékei közül csupán a *p*-etil-toluol értékes, minthogy ebből állítható elő egyszerű dehidrogénezéssel a fontos műanyaggyártási alapanyag: a *p*-metil-sztirol. Egy ZSM-5 típusú zeolit módosításával magas para-szelektivitású katalizátort állítottak elő. A *para*-izomer mellett csupán 2-4 % *meta*-izomer képződött.
- Úgy találták, hogy az acetilén acetaldehiddé történő hidratálásának kedvezőbb katalizátora a kétértékű fémionokkal, például Cd^{2+} és Zn^{2+} ionokkal ioncserélt klinoptilolit, mint a katalitikus gyakorlatban gyakrabban alkalmazott egyéb zeolitok Cd- és Zn-ionos formája, illetőleg ezeknek a fémeknek különböző oxidjai. A reakció sajátos vonása, hogy Langmuir-Hinshelwood (LH) mechanizmussal, adszorbeált víz és adszorbeált acetilén képződmények között játszódik le. Az LH-mechanizmus a zeolitikatalízisben kivételes.

Beyer Hermannak és munkatársainak a 70-es években elért kutatási eredményei közül az átmenetifém-zeolitok redoxi viselkedésére vonatkozó megállapítások emelkednek ki.

A 80-as évek közepétől Beyer Hermann, Pálné Borbély Gabriella és munkatársaik áttértek a zeolitok kémiai reakciók útján történő átalakításának kutatására. Új zeolit dezaluminálási eljárást közöltek, továbbá a zeolitok és fémsók, fénoxidok, ill. fémek között, szilárd fázisban lejátszódó ioncserét tanulmányozták. Alumíniumot tartalmazó rétegszilikátokat szintetizáltak és megvizsgálták alkalmazhatóságukat ioncserélőként. Eljárást kísérleteztek ki a rétegszilikátok zeolitokká történő átkristályosítására a folyadékfázis kizárásával.

A 90-es években *Valyon József*nek és munkatársainak a ($2\text{NO} \rightarrow \text{N}_2 + \text{O}_2$) reakcióval kapcsolatos kutatásai váltottak ki jelentősebb visszhangot. Réz-zeolitokon a reakció redoximechanizmussal játszódhat le. Ez azt jelenti, hogy a reakció aktív centrumait, a rézionokat, a katalitikus ciklus egyik lépésében a NO nitrogénfejlődés közben oxidálja. A katalizátorba beépülő oxidionok egy másik, ún. autoredukciós lépésben oxigéngáz formában hagyják el a katalizátort réz(II)ionok keletkezése közben. A vizsgálatok hozzájárultak az aktív alakulat szerkezetének megismeréséhez, valószínűsítették a reakció felületi átmeneti komplexét és intermedierjét, valamint az autoredukció mechanizmusát.

Az aktív helyek homogenitásából következő szelektivitásának és a zeolitos mikropórusok szabályos rendszerének tulajdonítható alakszelektivitás előnyei akkor jelentkezhetnek, ha a pórusrendszer a reaktánsok és legalább bizonyos reakciótermékek számára átjárható. A katalíziskutatásokban napjaink egyik kihívását jelenti a nagyobb molekulák számára is átjárható, szabályos mezopórusos csatornarendszerben a zeolitok aktív helyeihez hasonló tulajdonságú aktív alakulatok kialakítása. Az első ígéretes lépést ebbe az irányba 1992-ben tették meg, amikor előállították az egységes méretű mezopórusokat szabályos elrendezésben tartalmazó, M41S típusú amorf szilícium-dioxidból felépülő anyagokat, köztük az MCM-41 típusút. A kutatáshoz kapcsolódva Beyer Hermann és munkatársai szilícium mellett alumíniumot vagy más átmeneti fémet tartalmazó, MCM-41 szerkezetű anyagokat állítottak elő.

Az intézeti zeolitkutatás számára jelentős támogatás és egyben elismerés is volt, hogy kutatói több évtizeden át a szakterület élvonalát képviselő intézményekkel és kutatókkal működhetnek együtt. Az intézmények közül megemlíthetjük pl. a Leuveni Egyetemet (Belgium), a villeurbanne-i CNRS Katalízis Kutatóintézetet (Franciaország), az Edinburghi Egyetemet (Skócia), a Pittsburgi Egyetemet (USA), a berlini Fritz-Haber-Institut der Max-Planck Gesellschaft-ot (Németország) és a tsukubai kutatóközpontot (NIMC, Tsukuba, Japán). Munka- és szerzőtársaik között tarthatják számon a szakterület olyan kiváló személyiségeit, mint például W. K. Hall, J. B. Uytterhoeven, P. A. Jacobs, L. V. C. Rees, H. Karge vagy F. Mizukami.

A zeolitkatalízis első magyarországi, nemzetközi konferenciájára 1978-ban, a zeolitkutatás egy másik jelentős hazai műhelyének, a szegedi József Attila Tudományegyetem, Alkalmazott Kémiai Tanszékének szervezésében a KKKI kutatóinak közreműködésével Szegeden került sor. Ezt nemzetközi zeolit konferenciák sora követte, melyeket az Intézet (Zeolitkatalízis, Siófok, 1985; Természetes zeolitok, Budapest, 1985) vagy az 1992-ben Beyer Hermann kezdeményezésére megalakult Magyar Zeolit Társaság szervezett (Szombathely, 1995; Eger, 1999). A vezető kutatók közül többen is részt vesznek a nemzetközi szervezetek munkájában (International Committee on Natural Zeolites, International Zeolite Association, Federation of European Zeolite Associations).

Alapkutatási eredményeikre alapozva, a Szilikátipari Kutatóintézetrel és a MOL Rt.-vel együttműködve a petrolkémiai ipar számára egy új katalizátort és katalizátor adalékanyagot fejlesztettek ki. Az új anyagokat az ipar számára szükséges formában és mennyiségben a Szilikátipari Kutatóintézetben állították elő. A katalizátort a MOL Rt. a nehéz gázolajban lévő hosszú szénláncú normál paraffinok szelektív hidrokrakkolására, azaz alacsonyabb dermedéspontú gázolaj előállítására alkalmazza, míg a katalizátor adalékanyagot a MOL Rt. fluid katalitikus krakküzemében hasznosítják. A közreműködésükkel kidolgozott katalitikus eljárások révén a MOL Rt. Dunai Finomítójában jelentkező eredmény 1993 óta több mint évi 1 milliárd Ft. Kutató-fejlesztő munkájukat 1993-ban és 1996-ban a Magyar Innovációs Kamara, illetve a Környezetvédelmi és Területfejlesztési Minisztérium Innovációs Nagydíjjal ismerte el.

Ma már a világ katalitikus ipari eljárásainak döntő részében zeolitokat alkalmaznak: a termelt érték 60-70 %-át zeolitkatalízis útján nyerik, míg a feldolgozott mennyiség

tekintetében a zeolitkatalízis részesedése 80-90 %-ot tesz ki. A mai kívánalmaknak megfelelő, alacsony kéntartalmú és dermedéspontú gázolajok, az ólomadalék nélkül is nagy oktánszámú, de kevés aromást, oxigéntartalmú adalékkomponenst (étert, alkoholt) tartalmazó benzinek gyártása leggyazdaságosabban zeolitkatalizátorok alkalmazásával valósítható meg.

A zeolitok és a zeolitokkal rokonszerkezetű anyagok kutatása a szakterület „nagy öregjeinek”, Kalló Dénesnek, Beyer Hermannnak és Papp Jánosnak figyelmétől kísérve, szakmai támogatását élvezve a Kémiai Kutatóközpont Felületkémiai és Katalízis Intézetében folytatódik. A munkában 2003 áprilisától Valyon József, megbízott osztályvezető vezetésével Pálné Borbély Gabriella, Lónyi Ferenc, Onyestyák György, Rosenbergné Mihályi Magdolna és Szegedi Ágnes vesz részt. Jelenlegi kutatásaik egyik meghatározó célja mikropórusos zeolitot rendezett, mezo- vagy makropórusos szerkezetben, például MCM-41 struktúrában, tartalmazó, ún. hierarchikus pórusrendszerű anyagok előállítása és katalitikus alkalmazása. Különböző együttműködések keretében részt vesznek a korszerű motorhajtóanyagok fejlesztésében: 10 ppm alatti kén- és nitrogéntartalmú, minimális aromástartalmú gázolajok előállításában, magas oktánszámú, benzolmentes motorbenzin előállításában.

Elektrokémiai kutatások

Elektrokatalitikus és elektroszorpciós kutatások

Az elektrokatalitikus és elektroszorpciós vizsgálatok az Intézet alapítása óta folyó heterogén katalitikus kutatásokból nőttek ki. A 70-es évek közepéig az elektrokémiai kutatásokban a következők vettek részt: Nagy Ferenc, Horányi György, Telcs Iván, Szabó Sándor, Vértes György, Solt János.

Az első eredmények a folyadékfázisú heterogén katalízis elektrokémiai vonatkozásai felderítésének kapcsán jöttek létre. Ezek közül a vizes fázisú *katalitikus hidrogénezés és elektrohidrogénezés egyenértékűségének* igazolását lehet kiemelni. E vizsgálatok teremtették meg az intézeti elektrokatalitikus és elektroszorpciós kutatások alapjait. Az elmúlt négy évtized során az elektrokatalízis az elektrokémia egyik fontos részterületévé vált.

A Horányi György által vezetett téma *rendszerorientált* vizsgálataiban az elektrokémiai rendszer globális viselkedésének tanulmányozása áll a középpontban. Ennek a megközelítésnek első lépése a kémiai történések megismerése, amiben különösen jelentős szerepe van a nyomjelzős technikának, illetve a kombinált elektrokémiai és nyomjelzős módszereknek.

Az elmúlt évtizedben végzett elektroszorpciós kutatásaik fontos hidat képeztek az elektrokémiai, elektrokatalitikus, korróziós és kolloidkémiai kutatások között. Ezt – többek között – jól tükrözi az a tény, hogy 2002-ben a témavezető tollából három fejezet jelent meg három különböző enciklopédiában (elektrokémiai, felületi és kolloidkémiai, katalízis), 2004-ben pedig az Elsevier kiadónál megjelent *Radiotracer Studies of Interfaces* c. könyv szerkesztője és részben szerzője a témavezető.

Elektroredukció

Egyszerű szerves vegyületek (alifás dioxo-vegyületek, valamint az allilhelyzetű hidroxilcsoportot tartalmazó telítetlen származékok és az α -oxi-oxo vegyületek) redukciójának vizsgálata több olyan megfigyelést eredményezett, amelyek nem voltak összeegyeztethetőek az irodalmi adatokkal. Vizsgálataik alapján e vegyületek elektrokatalitikus folyamatainak mechanizmusáról, a polarizációs sajátságait meg szabó tényezőkről alkotott képet módosítani kellett. Az elektroredukciós kutatások egyik fontos mellékterméke volt annak megállapítása, hogy a volfram-karbid hidrogénező katalizátorként használható. Az eljárás szabadalmi oltalmat kapott.

Jelentős eredményeket értek el a nitrát-, nitrit- és perklorát-ionok elektrokatalitikus, elektrokémiai redukciójának területén. Eme ionok viselkedésének feltárása az alapkutatói eredményeken túlmenően környezetkémiai, illetve környezetvédelmi szempontból is fontosnak bizonyult. A perklorát-ionok elektrokémiai stabilitásával kapcsolatos nézetek tarthatatlanságát bizonyították be katalitikus (Pt, Pd, Re, Tc) rendszerekben és fémek (Fe, Co, Zn, Ni, Al) oldódása, illetve korróziója esetén. Horányi György, Láng Győző: Perklorátszennyezés: egy új környezetvédelmi kihívás címmel A Kémia Újabb Eredményei sorozatban megjelent monográfiájukban (2004) részben saját eredményeiket, részben a perklorátszennyezés felszámolására irányuló nemzetközi erőfeszítéseket tekintették át.

Elektrooxidáció

Az elektrooxidációs folyamatok vizsgálatában az egyik legkorábbi és gyakorlati szempontból legjelentősebb eredmény a *C-vitamin szintézis* egyik lépésének elektrokémiai megvalósítása volt. (Az eljárásra szabadalmi oltalmat kaptak.) Bevezették a nikkelt-hidroxidelektrod szerves elektrokémiai alkalmazását.

Etilénglikol és oxidációs származékai elektrooxidációjának és elektroredukciójának szisztematikus vizsgálata alapján értelmezték e vegyületcsalád elektrokémiai viselkedését. Vizsgálataikat más diolokra és polioloakra is kiterjesztették.

Elektroszorpciós kutatások radioaktív nyomjelzős módszerrel

Egyszerű és nemzetközileg széles körben elismert radioaktív nyomjelzős módszert dolgoztak ki elektródokon lejátszódó adszorpciós folyamatok *in situ* vizsgálatára. E módszer birtokában számos, eddig nem ismert adszorpciós jelenséget lehetett felderíteni. A ma is sokak által vizsgált jelenséget, az *ad-atomok által indukált anionadszorpciót* először a KKKI-ben mutatták ki. Ezzel megkérdőjelezték bizonyos korábbi értelmezések (elektroszorpciós vegyérték) jogosságát. Az anionok által indukált *kationadszorpció* létezésének igazolásával értelmezni tudták egyes kationok anomális adszorpciós viselkedését.

Szerves vegyületek platinaelektrodokon lejátszódó adszorpciós folyamatainak jellemzése során kimutatták, hogy e vegyületek szorpciós sajátosságai alapján két nagy csoportba sorolhatók. E felosztás lényegileg a mai napig elfogadott az irodalomban. Elsőként értelmezték számos vegyületcsalád adszorpciós viselkedését, középpontba állítva az egyes funkciócsoportok szerepét.

Behatóan foglalkoztak a különböző oxidokon (vas-, alumínium-, bizmut-, cink-, króm- és réz-oxid) lejátszódó specifikus anionadszorpció jelenségével, az adszorpció pH-függésének értelmezésével. Egyszerű módszert dolgoztak ki a specifikus és a nonspecifikus adszorpció megkülönböztetésére.

Néhány fontosabb, általános jelentőségű eredményt a következőkben sorolunk fel:

- Vizsgálataik alapján kimutatták, hogy a platinázott platina elektródok sajátosságaira vonatkozó klasszikus nézetek módosításra szorulnak. Voltammetriás viselkedésük jelentős mértékben függ előállítási módjuktól.
- Az elektrokatalitikus oxidáció és redukció során fellépő galvanosztikus potenciáloszcillációk értelmezésében, illetve megtervezésében fontos eredményeket értek el.
- A jelenkori elektrokémia elméletében és gyakorlatában mutatkozó ellentmondásokra hívták fel a figyelmet kritikai munkásságuk során. (Ennek egy részét magyarul is összefoglalták a Horányi György, Láng Győző: Zsákutcák, tévutak és csapdák a jelenkori elektrokémia elméletében és kutatásában című közleményben (A Kémia Újabb Eredményei 2002).
- Jelentős mértékben hozzájárultak a polimerfilm-elektrodokban lejátszódó folyamatok értelmezéséhez.

- Az anionadszorpció szerepét a korróziós folyamatokban az eddigi feltevések helyett közvetlen kísérleti úton is kimutatták, és világosan megkülönböztették a „szabad fémfelületen” és a felületi oxid-hidroxid rétegen bekövetkező adszorpciót.

Hidrogénezési és fémadszorpció vizsgálatok

A heterogén katalitikus reakciók mechanizmusának vizsgálata kapcsán a 60-as években a Szabó Sándor által vezetett téma keretében a palládiumozott palládium huzalelektrod-katalizátor főtömegéből a felületre irányuló hidrogéntranszportot tanulmányozták. Vizsgálták továbbá a palládiumban oldott hidrogén katalitikus reakciókban való részvételét. Megállapították, hogy az oldott hidrogén részt vehet a felületi reakciókban, és a hidrogénezés során mérhető elektródpotenciál alapján eldönthető, hogy a felületi reakció mechanizmusa ionos vagy gyökös. Megállapítható továbbá, hogy a felületen adszorbeált és az oldott hidrogén között a hidrogénezés körülményei között is egyensúly alakul ki. A téma keretében foglalkoztak *egyszerű alifás ketonok* platinakatalizátoron végbemenő *hidrogénezésével* is. Vizsgálataik alapján arra a következtetésre jutottak, hogy a ketonok hidrogénezhetők és elektrohidrogénezhetők. A termék aceton esetében tiszta propán, a nagyobb szénatomszámú ketonok esetében pedig szénhidrogén és szekunder alkohol. A szekunder alkohol nem közti terméke a szénhidrogén képződésének.

A 70-es évek elején a figyelem az *elektrokémiai fémadszorpció* felé fordult. Sikerült egy eljárást kidolgozni adszorbeált fémekkel módosított (hordozós) nemesfém-katalizátorok előállítására. Több, elsősorban a katalízisben fontos fém (Pd, Sn, Bi, Re, Au) platinán végbemenő adszorpciójának vizsgálatát végezték el. Az elektrokémiai (fémfelületkémi) és az alkalmazás révén kapott katalitikus eredményeikre gyakran hivatkoznak a szakirodalomban. A fémadszorpció kutatások eredményeit a határfelületeken összekapcsolódó két- és többfémű rendszerek (fémek forrasztása, vékony fémrétegek előállítása, fémkorrózió stb.) kialakulásának vizsgálatában és előállításának technológiájában alkalmazták.

A kutatásokban részt vett még Bakos István és Nagy Ferenc, aki a témát kezdeményezte, továbbá együttműködésben Mallát Tamás (BME) is.

Folyadékszerkezeti és folyadék/fém határfelületi kutatások

Folyadékok szerkezetének vizsgálata

Az oldószeres és elektrolitoldatok diffrakciós szerkezetvizsgálata Magyarországon a 60-as évek végén és a 70-es évek elején kezdődött el a Lengyel Sándor vezetése alatt álló MTA Kémiai Szerkezetkutató Laboratóriumban. A röntgendiffrakciós folyadék-szerkezetvizsgálatok meghonosítása Lengyel Sándor, Hajdú Ferenc és Pálinkás Gábor, a világviszonylatban is újszerű folyadék-elektrondiffrakciós módszer kidolgozása Lengyel Sándor, Kálmán Erika, Haklik Lajos és Eke Anna nevéhez fűződik. A Kémiai Szerkezetkutató Laboratórium beolvadásával a folyadékszerkezet-vizsgálatok a Központi Kémiai Kutatóintézetben folytak tovább. A 70-es években a két kutatócsoport nemzetközileg is elismert eredményeket ért el a víz (Hajdú Ferenc, Pálinkás Gábor) és az elektrolitoldatok (Pálinkás Gábor, Radnai Tamás) szerkezetének meghatározásában. Ekkor határozták meg először kísérleti úton a víz hidrogénjeinek eloszlásfüggvényeit elektrondiffrakciós módszerrel (Kálmán Erika, Pálinkás Gábor, Kovács Pál). 1975-ben Pálinkás Gábor bekapcsolódott az akkor nemzetközileg is újnak tekinthető kutatómunkába, a víz és a vizes elektrolitoldatok szerkezetének és dinamikájának vizsgálatára alkalmas *molekuladinamikai számítógépes szimulációs módszer* kidolgozásába, illetve alkalmazásába. Az elektrondiffrakciós kutatások, bár számos hidrogénhíd-kötéses folyadék szerkezetének felderítéséhez járultak hozzá és nagy nemzetközi érdeklődés kísérte az unikális módszer alkalmazását, anyagi nehézségek miatt 1984-ben megszűntek az Intézetben. A röntgendiffrakciós folyadékszerkezet-vizsgálatok

azonban ma is folynak *Pálinkás Gábor* és *Radnai Tamás* részvételével. A munkába az utóbbi években *Megyes Tünde* és *Grósz Tamás* is bekapcsolódott.

A 80-as években a Csoport kutatói szerkezeti modelleket dolgoztak ki az ionhidratáció jellemzésére, és alkalmazták azokat a nátrium-aluminát oldatok szerkezetének leírására. Ezzel párhuzamosan pedig kidolgozták a Bayer-féle timföldgyártás matematikai modelljét. Az elmúlt több mint két évtizedben a Csoport kutatóinak számos eredménye született a hidrogénkötés és az ionszolvatáció törvényszerűségeinek felderítésében, a molekuladinamikai módszer fejlesztésében és alkalmazásában (*Pálinkás Gábor*, *Radnai Tamás*), továbbá az oldószerkeletű többtettulajdonságainak szerkezetük alapján történő értelmezésében (*Pálinkás Gábor*, *Bakó Imre*). A 90-es években a kutatásokat kiterjesztették az oldószerkeletű oldatok szerkezetének extrém termodinamikai körülmények között történő vizsgálatára (*Radnai Tamás*), a molekuláris folyadékok és keverékek szerkezetének röntgen- és neutrondiffrakcióval, valamint fordított Monte-Carlo – szimulációval (*Pálinkás Gábor*, *Radnai Tamás*, *Bakó Imre*) történő tanulmányozására, továbbá koordinációs kémiai és komplexkémiai vonatkozású oldatszerkelet-kutatásra is.

A folyadék-röntgendiffrakciós vizsgálatokat a kutatók nemcsak elméleti (molekuladinamikai), hanem más kísérleti módszerekkel is kombinálták. Ez számos esetben nemzetközi kooperációban vált lehetővé. Az alkalmazott módszerek a következők voltak: folyadék-elektron-diffrakciós vizsgálatok, neutron-diffrakciós mérések (*Pálinkás Gábor*, *Radnai Tamás*, *Bakó Imre*, *John Dore*, *Marie-Claire Belissant-Funek*), Raman-spektroszkópia (*Pálinkás Gábor*, *Kálmán Erika*, *Radnai Tamás*, *Günther Kabisch*), termodinamikai vizsgálatok (*Radnai Tamás*, *Hitoshi Ohtaki*), EXAFS-spektroszkópia (*Radnai Tamás*, *Kazuhiko Ozutsumi*, *Hitoshi Ohtaki*), tömegspektrometriás oldatszerkelet-vizsgálatok (*Radnai Tamás*, *Megyes Tünde*, *Akihiro Wakisaka*), potenciometriás mérések és sűrűségmérés (*Radnai Tamás*, *Sipos Pál*, *Glenn Hefter*, *Peter May*), NMR-spektroszkópia (*Radnai Tamás*, *Manfred Zeidler*), Mössbauer-spektroszkópia (*Pálinkás Gábor*, *Radnai Tamás*, *Kálmán Erika*, *Vértes Attila*).

A laboratórium munkájára, éppen a módszer unikalitása miatt jellemző a nemzetközi kooperáció. A kutatók részt vesznek a szakterület nemzetközi társaságainak munkájában, pl. a Nemzetközi Elektrokémiai Társaságban, a European Molecular Liquid Group-ban, amelynek *Pálinkás Gábor* az elnöke és a Japanese Solution Chemistry Society-ben (*Radnai Tamás*). A nemzetközi együttműködések egyik eredménye a nagy nyomású és magas hőmérsékletű folyadék-röntgendiffrakciós módszer kifejlesztése és alkalmazása, amelyet 1991-ben sikerült megvalósítani Japánban a víz és a formamid, valamint a NaCl vizes oldatának szerkezetvizsgálatával nagy nyomáson, szuperkritikus körülmények között (*Radnai Tamás*, *Hitoshi Ohtaki*, *Toshio Yamaguchi*); 1994-ben Aachenben a metanol szerkezetvizsgálatával nagy nyomáson (*Radnai Tamás*, *Manfred Zeidler*) és 2000-től a KKKI-ban is alkoholok és komplexképző oldatok nagy nyomású vizsgálatával (*Radnai Tamás*, *Megyes Tünde*, *Grósz Tamás*).

A laboratórium számos hazai kutatócsoporttal is együttműködik. Így a következőkkel: ELTE TTK Kémiai Tanszékcsoport (*Vértes Attila*), BME Fizikai Kémiai Tanszék (*Zrínyi Miklós*) és Analitikai Kémiai Tanszék (*Hargittai István*), Veszprémi Egyetem Fizikai Kémiai Tanszék (*Liszi János*, *Szalai István*) és Analitikai Kémiai Tanszék (*Horváth Attila*), Szegedi Tudományegyetem Analitikai Kémiai Tanszék (*Burger Kálmán*, *Sipos Pál*), Debreceni Kossuth Lajos Tudományegyetem Fizikai Kémiai Tanszék (*Tóth Imre*), Miskolci Egyetem Fizikai Kémiai Tanszék (*Berecz Endre*, *Török Tamás*).

Korróziós inhibitorok hatásmechanizmusának kutatása

A 80-as években indultak meg *Kálmán Erika* vezetésével az inhibitorok kémiai kutatások, amelyek a szerves foszfonsavak korróziós inhibíciós mechanizmusának vizsgálatára irányultak. A foszfonsavak ipari szempontból jelentősek, mivel a hűtővizekben alkalmazott korróziógátló szerek legfontosabb komponensei. A hatásmechanizmus jobb megértése céljából a fém-elektrolit határfelületen lejátszódó adszorpciós/deszorpciós folyamatokat tanulmányozták. Vizsgálták az acélfelület előkezelésének hatását az oxidréteg kialakulására. Az inhibitorfilm, illetve a porózus inhomogén oxidréteg szerkezetének és tulajdonságainak vizsgálata során összefüggést állapítottak meg az inhibitorhatás és a fémfelület morfológiája között (*Kálmán Erika, Kármánné Herr Franciska, Telegdi Judit, Abdul Shaban, Felhősi Ilona*). Kimutatták, hogy a foszfonsavak és bizonyos kationok között szinergikus hatás lép fel.

Világszerte folynak a hatékony korróziós inhibitorok kifejlesztésére irányuló kutatások. A vizsgálatok során a leggyakrabban úgy járnak el, hogy egy ismert hatású, ígéretes vegyület (az alapvegyület) származékait készítik el, és meghatározzák az új származékok inhibíciós hatékonyságát. E módszerrel azonban – a lehetséges származékok nagy száma miatt – nem biztosítható az optimális tulajdonságú vegyület felfedezése. A kutatócsoport (*Lukovits István, Kálmán Erika, Telegdi Judit és Pálinkás Gábor*) által kidolgozott módszerrel a molekulák, elsősorban heterociklusos vegyületek *elektronszerkezete és hatékonysága* között mutattak ki statisztikai módszerrel összefüggést. A felismerés lehetővé tette, hogy újabb, nagyobb hatékonyságú inhibitorokat tervezzenek. A kutatócsoport a hatásbecslésre alkalmas módszert kiterjesztette a Langmuir–izoterma szerint megkötődő molekulák szerkezete és hatása közötti összefüggések tanulmányozására.

Vízkezelőszerek kifejlesztése

A gyakorlatban alkalmazott fémműtárgyak – megfelelő védelem hiányában – tönkremennek a használat során. Különösen nagy kárt okozhat a korrózió az iparban, ahol a berendezések hűtésére, előnyös tulajdonságai és olcsósága miatt, vizet alkalmaznak. Az ipari víz az esetek többségében szénacél szerkezeti anyagokkal érintkezik. Az alkalmazott vizek agresszivitásának következtében rendkívül nagy károk keletkezhetnek. A probléma megoldására világszerte széles körű kutatásokat végeznek. A kutatócsoport (*Kálmán Erika, Pálinkás Gábor, Telegdi Judit, Kármánné Herr Franciska*) által a 80-as években kifejlesztett vegyszereket elsősorban ipari hűtő- és fűtővízkörök kezelésére (*Kéthelyné Bella Erzsébet, Kálmán Erika*) alkalmazzák, de kifejlesztettek háztartási víz kezelésére, savas tisztításra (*Horváth Tibor, Kálmán Erika*), valamint környezetbarát hűtőfolyadék (*Horváth Tibor, Kálmán Erika*) előállítására alkalmas vegyszereket is. (A témában több szabadalom született). Az említett vegyszereket – CORIN márkanéven – magyar cég állítja elő, és azokat a hazai ipar széles körben alkalmazza, sőt külföldre is exportálja. A termékek 1985-ben a Budapesti Nemzetközi Vásár Nagydíját, ugyanebben az évben a HUNGAROKORR fődíját, 1986-ban az INCHEBA Aranyérmét és több más díjat is nyertek.

A korróziós inhibitorok alkalmazásakor – ipari körülmények között – mindig védekezni kell a hűtővizekben jelenlévő mikroorganizmusok (baktériumok, gombák, algák) elszaporodása ellen. Emiatt a korróziós inhibitorok mellett minden esetben *biocideket* is kell adagolni a hűtővízhez. A nemzetközi piacon ezért olyan készítmények iránt mutatkozik kereslet, amelyek mind a korróziós, mind a mikrobiológiai behatásokkal szemben védik a rendszert. A kutatócsoport (*Telegdi Judit, Kálmán Erika, Kármánné Herr Franciska*) által kifejlesztett szer (egy aminosavszármazék) gátolja a korróziót és egyben biocid, ezért szükségtelessé vált különböző (esetleg inkompatibilis) vegyszerek összekeverése. Környezetbarát biocidok alkalmazása a korrózióvédelem mellett a biológiai kioldáson alapuló

talajkezelési eljárások kifejlesztésében is jelentős szerepet játszik (Telegdi Judit, Keresztes Zsófia). E kutatások COST- és TÉT-témák keretében nemzetközi együttműködésben folynak.

A biológiai korróziós folyamatok műszeres nyomonkövetésében új szempontot jelentett a mikroorganizmusok által kialakított biofilmek (Telegdi Judit, Keresztes Zsófia, Rigó Tímea) redoxi tulajdonságainak vizsgálata. Elektrokémiai és felületanalitikai módszerek alkalmazásával a biológiai korrózió során létrejövő biopolimer – korróziós termék kompozitokat is jellemezték (Keresztes Zsófia, Kálmán Erika).

Magyarország természeti kincseinek jelentős hányadát a *termálvizek* adják. A Dél-Magyarországon nyert termálvizek jelentős részét ivóvízként használják. A hévizek kémiai összetételének és energiataartalmának függvényében igen jelentős a gyógyászati (balneológia), a mezőgazdasági (pl. terményszárítás, növényházak fűtése), ill. növekvő mértékben a kommunális célokra (lakóházak fűtése) történő hasznosítás. A termálvízben, mivel az a felszíni vizeknél jóval nagyobb mennyiségben tartalmaz oldott sókat és gázokat, fokozottan jelentkezik a vízkő kiválásával, ill. a korrózióval kapcsolatos problémák. A kutatócsoport (Kármánné Herr Franciska, Kálmán Erika, Telegdi Judit) által – az OMFB pénzügyi támogatásával – kifejlesztett vegyszer-kompozíció mindkét folyamat gátlására alkalmas. Megoldották a vegyszer üzemszerű gyártását is. A vegyszert kipróbáló felhasználók az elmúlt évek során rendszeres alkalmazóvá váltak.

Nanoszerkezetű és nanoméretű anyagok

Igen jelentős, új kutatási irányzat a fémek felületén lejátszódó önszerveződés jelenségének és az önszerveződött mono- és multirétegek szerkezetének, továbbá korrózióvédő hatásának tanulmányozása, amelyhez a kutatócsoport 1998-ban kapcsolódott. Az önszerveződő molekulákkal történő felületmódosítás új távlatokat nyit a korrózióvédelemben (Felhősi Ilona, Kálmán Erika, Telegdi Judit, Kármánné Herr Franciska, Keresztes Zsófia, Póczik Péter, Pilbáth Aranka). Nemzetközi konferenciákon számos plenáris és key-note előadás megtartására kaptak felkérést ebben a témában. Ebben a témakörben számos hazai (pl. Széchenyi-program, NKFP, OTKA-projektek) és európai uniós (pl. Hungarian Network of Excellence Centers on Nanosciences) projekthez nyertek támogatást. A témák vitelére szervezett, sok résztvevős kutatási konzorciumokat az Osztály kutatói irányítják. Nagy jelentőségük van a Langmuir-Blodgett rétegek vizsgálatával kapcsolatos kutatásoknak is (Telegdi Judit, Rigó Tímea).

A szol-gél technikával történő védőbevonatok készítésének megvalósítását Kálmán Erika kezdeményezte. Új típusú eljárásokat dolgoztak ki SiO_2 és ZrO_2 nanoszerkezetű bevonatok szol-gél technikával történő előállítására (Tolnai Gyula, Gergely András, Seszták Tímea). Ennek során folyadékközegben állítottak elő különböző méretű és méreteloszlású részecskéket, majd ezekből a rendszerekből szobahőmérsékletű rétegeképzési eljárással alakítottak ki egy és többszörös rétegeket szilárd hordozók (fémek, pl. vas és acél, illetve üveg és csillám) felületén. Pásztázó elektronmikroszkóppal mikroméretű tartományban tanulmányozták a részecskék méretét, méreteloszlását, valamint energiadiszperzív spektrométerrel vizsgálták a részecskék homogenitását. Atomerő-mikroszkópia (AFM) használatával tanulmányozták a rétegek nanoléptékű szerkezetét, és felderítették a rétegeképzés folyamatának kulcsparamétereit, amelyek a rendezett szerkezetű, különböző méretű nano-domaineket tartalmazó bevonatok előállítását teszik lehetővé. Vizsgálták a rétegek gyakorlati alkalmazhatóságát, szem előtt tartva a vaskülfelületek korrózióvédő bevonataként történő felhasználhatóságot is.

A biokompatibilis felületek kialakítása a biológiai felületkémia tárgykörébe tartozik. A kutatások célja olyan biomimetikus szerves-organikus kompozitok létrehozása, amelyek felhasználhatóak irányított szövetregeneráció során. Az ilyen típusú, természeti analógiát mutató anyagok kialakulása meghatározza a biopolimer kompozitok makromolekuláris

alkotóinak szupramolekuláris szerveződését. Elsősorban az adszorbeált fehérjestruktúrák kialakulásához vezető körülmények optimalizálása, a felületek kémiájának és nanoszerkezetének szerepe a fehérjeszerkezet stabilitásában, valamint az irányított nukleációban azok a területek, amelyeken szisztematikus vizsgálatokat folytatnak (Keresztes Zsófia, Kálmán Erika). Ez a kutatási irány nemzetközi TÉT-együttműködés keretében is támogatást élvez.

Nanocsövek előállítását, felületmódosítását és stabilitását pásztázó elektronmikroszkóppal, pásztázó tűszondás mikroszkóppal a Miskolci Egyetem Fizikai Kémiai Tanszékével együttműködésben vizsgálják (Kármánné Herr Franciska, Nagy Péter, Gábor Tamás, Ferencz Bernadette, Lukovits István, Papp Katalin).

Foglalkoznak túlyukmentes gyémántbevonatok CVD-módszerrel történő előállításával a BME Atomfizika Tanszékével együttműködésben (Kováchné Csorbai Hajnalka, Csíkvári Péter).

Pásztázó, tűszondás mikroszkópos vizsgálatok

A mikroelektronika és más csúcstechnológiák elterjedésével egyre nagyobb szükség van *felületek mikroszkopikus jellemzésére*, valamint a különböző felületi folyamatok mechanizmusának atomi, illetve molekuláris szinten történő követésére.

A pásztázó, tűszondás mikroszkópok (pásztázó alagútmikroszkóp és atomierő-mikroszkóp) lehetővé teszik vezető és szigetelő tulajdonságú felületek μm -es és nm -es tartományban történő, morfológiai és a fizikai sajátosságokra vonatkozó vizsgálatát. A kutatócsoport (Kálmán Erika, Keresztes Zsófia, Telegdi Judit, Szócs Edit, Felhősi Ilona, Nagy Péter) – az országban az elsők között – honosította meg 1994-ben az említett vizsgálati módszereket. A mérőberendezések kiképzése lehetőséget nyújt szilárd/gáz, illetve szilárd/folyadék határfelületen lejátszódó folyamatok nyomon követésére, így pl. elektrokémiai folyamatok *in situ* megfigyelésére. A berendezéseket sikerrel alkalmazták tiszta fémek és ötvözetek felületén lejátszódó korróziós folyamatok és korróziós inhibitorok hatásmechanizmusának vizsgálatára, polimer felületek morfológiai és reológiai jellemzésére, valamint biológiai minták tanulmányozására.

Az atomierő-mikroszkóp lokális adhézióserő-mérésekben való alkalmazhatóságát sikerült a tűszondák meghatározott felületi összetétel szerinti módosításával javítaniuk (Keresztes Zsófia, Kálmán Erika). Az így végrehajtott adhézióserő-mérések alapján számított lokális felületienergia-értékek meghatározása fontos fejlesztés a heterogén, nanoszerkezetű anyagok jellemzésében (Tolnai Gyula, Keresztes Zsófia, Nagy Péter, Kálmán Erika).

Az atomierő-mikroszkóppal végzett vizsgálatokat kiterjesztették a felületek nanokeménységének meghatározására (nanoindentáció) (Nagy Péter, Horváth Péter).

A tárgyalt kutatásokat végző Osztály tagjai számos hazai és nemzetközi szervezet munkájában vesznek részt, az Osztály vezetője (Kálmán Erika) 2000-2002-ig a Nemzetközi Elektrokémiai Társaság elnöke volt. Jelenleg az Európai Korróziós Szövetség Végrehajtó Bizottságának és Nemzetközi Tudományos Tanácsának, valamint az Amerikai Elektrokémiai Társaság Publikációs Bizottságának választott tagja. Kezdeményezésére 1989-ben megalakult a Magyar Korróziós Szövetség, a HUNKOR. A szervezet a hazai korróziós kutatás-fejlesztéssel foglalkozó szakemberek munkájának elősegítését tűzte ki célul.

Az Osztály kutatói több nemzetközi konferenciát szerveztek meg Magyarországon, így pl. a következőket:

- EUROCORR/1991 és 2003, Budapest,
- 1st Kurt Schwabe Conference, Tata, 1993,
- 47th Annual Meeting of the International Society of Electrochemistry Balatonfüred, 1996
- HUNGAROKORR Conference: Corrosion, Corrosion and Environmental Protection, Budapest, 1999,

- 7th International Symposium on Electrochemical Methods in Corrosion Research, Budapest, 2000.

Az Osztály vezető kutatói a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki Karán és Természettudományi Karán az elméleti képzésben és a laboratóriumi oktatásban is részt vesznek. Előadásokat tartanak a BME, továbbá a Miskolci Egyetem és a Veszprémi Egyetem Doktori Iskolája programjának keretében.

Gázkinetikai és fotokémiai kutatások

A gázkinetikai és fotokémiai kutatások a Szegedi József Attila Tudományegyetemen működött MTA Gázkinetikai Tanszéki Kutatócsoport Budapestre való költözése után, 1979-től *Márta Ferenc* és *Bérces Tibor* vezetésével indultak meg a KKKI-ben. A kutatók a molekulák ütközése, illetve fényelnyelése következtében végbemenő folyamatok alapvető törvényszerűségeit vizsgálták. Olyan modellreakciókat választottak, amelyek a tudományos érdeklődés előterében álltak, ugyanakkor fontosak voltak gyakorlati szempontokból is.



Gázfázisú elemi reakciók vizsgálatára szolgáló, lézerindukálta fluoreszcenciás detektálással összekapcsolt, gyorsáramlásos kinetikai berendezés

A kémiai folyamatok céljainknak megfelelő irányításához a folyamatok mechanizmusának pontos ismerete szükséges. Ez nem érhető el a kémiai folyamatot felépítő elemi reakciók szerepének tisztázása nélkül, ami viszont a reakciókinetikai kutatásoktól várható. Az elemi reakciók kísérleti és elméleti módszerekkel meghatározott kinetikai és termokémiai paramétereinek ismerete teszi lehetővé, számítógépes modellek felhasználásával, a bruttó kémiai folyamat mechanizmusának megismerését és ezzel a gyakorlati alkalmazás lehetőségeinek feltárását. Az elemi reakciók döntő többsége atomok és szabad gyökök részvételével lejátszódó folyamat, amelyek szoros kapcsolatban vannak a molekuláris szintű történésekkel (ütközésekkel, molekulák között és molekulán belül végbemenő energiaátadási

folyamatokkal stb.). Ezeknek az elemi reakcióknak a vizsgálata leghatékonyabban ún. *direkt reakciókinetikai kísérleti technikák* alkalmazásával végezhető el. Az impulzuslézer-fotolízist és a gyors áramlásos módszert alkalmazó kísérleti technikákat a kutatócsoportnak többéves fejlesztőmunkával sikerült kidolgoznia. Az említett módszerekkel végzett kinetikai kutatásai tudományos eredményei nemzetközi elismerést váltottak ki, amit az is mutat, hogy a létrehozott berendezéseken számos kelet- és nyugat-európai vendégkutató is végzett kísérleti munkát.

A *gázkinetikai kutatások* a korábbi években és jelenleg is elsősorban két, gyakorlati szempontból jelentős kérdéskörhöz, a légkör kémiai folyamataihoz, valamint az égések és lángok kémiájához kapcsolódnak.

A *légkörkémiái kutatások* a szerves légszennyezők troposzférikus lebomlásában szerepet játszó reaktív *szabad gyökök* elemi reakcióival és a köztitermékként keletkező *karbonilvegyületek* (alifás aldehidek és ketonok) fotokémiai sajátágaival foglalkoznak. Vizsgálják például a freonok helyettesítésére javasolt, halogénatomot nem tartalmazó szerves anyagok és az új, környezetkímélő ipari oldószerek légköri reakcióit. A kutatások célja, hogy adatokat szolgáltatassanak ezeknek az anyagoknak a légkörben történő lebomlásáról és ózonbontó, illetve ózonképző potenciáljáról. Az adatok ismerete hozzásegít ahhoz, hogy megállapíthassuk, az említett anyagok milyen mértékben járulnak hozzá az *ózonlyuk* keletkezéséhez (a sztratoszférában) és a veszélyes ózon, valamint a PAN (peroxi-acetil-nitrát) típusú légszennyezők képződéséhez (a troposzférában).

Az *égések és lángok kémiájának kutatása* elsősorban az úgynevezett alternatív, környezetbarát üzemanyagok égéséhez és magas hőmérsékletű oxidációjához kapcsolódik. Ilyen anyagok alkalmazása jelentősen csökkenti a gépjárművek káros égéstermékeinek kibocsátását. Kiemelkedő e tekintetben a *metanol* – mint ígéretes, környezetbarát üzemanyag – égési mechanizmusának vizsgálata, különösen a metanol égésében szerepet játszó elemi reakciók kinetikájának tanulmányozása. E munka során, szinte “mellékesen”, egy jelentős eredmény született, nevezetesen a metanol molekulában a *C-H kötés erősségére* (kötésszociációs entalpiájára) új, pontos értéket sikerült a kutatócsoportnak meghatározni, amelyet több termokémiai gyűjtemény is átvett.

Mind a légkörkémiái jelenségek, mind pedig az égések és lángok kémiájának kutatásában az említett bonyolult folyamatok elemi reakcióit nemcsak kísérleti, hanem kvantumkémiái és egyéb elméleti módszerekkel is tanulmányozzák. A meghatározott kinetikai paraméterek és termokémiai adatok *számítógépes modellek* (légkörkémiái modellek, égési folyamatok modelljei) útján hasznosíthatók.

A reakciókinetikai témákhoz szorosan kapcsolódnak a *fotofizikai és fotokémiai* kutatások. Kezdetben az ultraibolya fény hatására képződő, rövid élettartamú köztitermékek vizsgálata állt a kutatások középpontjában. A kutatócsoport nemzetközileg is elismert eredménye annak bizonyítása, hogy a gerjesztett és az alapállapotú ketonok kölcsönhatásakor képződő *dimer* (excimer) döntő szerepet játszik az alifás ketonok fotokémiájában.

A 90-es években a *molekulaszerkezet* és a *fluoreszcenciás sajátágok* közti kapcsolat felderítése volt fő céljuk. Így például a naftálimidek fluoreszcenciájának tanulmányozása során egy új típusú, kettős lumineszcencia jelenséget sikerült felfedezniük. A gerjesztett fluorenon-származékok energiavesztési mechanizmusának vizsgálata során elért eredményeik átfogó képet adtak az e vegyületcsalád fluoreszcenciáját befolyásoló tényezőkről, és *felhasználhatók új, fluoreszcenciás jelzőanyagok, fotoiniciátorok és fotostabilizátorok tervezésében*. Az újabb kutatások során sikerült kimutatniuk, hogy a szingulett gerjesztett fluorenon olyan jelzőanyag, amely képes szelektíven detektálni a mikrokozmoszával létrejövő, dipólus jellegű és hidrogénhíd-kölcsönhatások erősségét.

A fotokémiai kutatások egy további ága az oxigén egy speciális, rövid élettartamú, nagyon reakcióképes módosulatával, az ún. *szingulett oxigén* vizsgálatával foglalkozik. Egy

speciálisan a szingulett oxigén detektálására kifejlesztett mérőeszköz segítségével a szingulett oxigén élettani szempontból fontos reakcióit vizsgálják. Az anyag citotoxikus tulajdonságú. Ezt a hatást egyes esetekben a napfény idézi elő. Ugyanakkor, megfelelő körülmények között, éppen ez említett tulajdonság révén érhető el rákellenes hatás, ami az alapkutatási, fotokémiai téma legfontosabb gyakorlati vonatkozását jelenti.

A téma alapkutatási jelentőségét alátámasztja az a felismerés, hogy számos gázfázisú elemi reakció a korábban feltételezettnél *bonyolultabb módon* megy végbe, másodlagos kötőerőkkel (diszperziós erők révén, illetve hidrogénhíd-kötéssel) laza molekuláris komplexek alakulnak ki a reagáló molekulák között.

A szakirodalomban 2003-2004-ben közölt nagy érzékenységű, légkörkémiái elemzések eredményei azt mutatják, hogy a laza molekuláris komplexek fontos szerepet játszanak a *troposzféra kémiájában*. Ennek a szerepnek a vizsgálata manapság a légkörkémián talán „legforróbb” területe. Az idevonatkozó új eredmények akár gyökeresen megváltoztathatják például a légkör kémiájának és az éghajlat változásának kölcsönhatására vonatkozó tudományos elképzeléseinket. A Reakciókinetikai osztály kutatói a karbonilvegyületek (elsősorban aceton) vízmolekulával képzett komplexeinek reakciókinetikai, valamint fotokémiai laboratóriumi és elméleti vizsgálatát végzik. Különösen a troposzféra felső rétegeire vonatkozóan születtek fontos megállapítások. A kutatók sikeresen pályáztak az Európai Unió VI. Kutatási Keretprogramjában a „SCOUT” elnevezésű, átfogó, légkörkémiái „Integrated Project” résztvevőjeként. A kutatócsoport a korábbi években is kiemelkedően sikeresen szerepelt a különböző európai uniós pályázatokon: 1994 és 2004 között összesen 8 pályázatuk nyert el támogatást.

A gázfázisban végzett kutatások kiegészítését, ill. kiterjesztését jelentik az oldatfázisú vizsgálatok. Ezekben a vizsgálatokban a fő hangsúlyt annak a felderítésére helyezik, hogy a *hidrogénhíd-kötéssel létrejövő komplexek* hogyan befolyásolják az alapállapotú molekulák fényelnyelését és termodinamikai sajátságait, valamint az elektrongerjesztett állapotok reakcióit.

Új kutatási irányt jelent munkájukban a *fémgőzlézer kutatása és fejlesztése*. A fémgőzökben létrejövő lézerhatás számos reakciókinetikai, fotofizikai és lézerfizikai alapkutatási érdekességet tartalmaz. A kifejlesztendő lézerberendezések közvetlen gyakorlati felhasználásra kerülhetnek. A kutatók a legutóbbi időszakban egy új típusú *részgőzlézer* prototípusát készítették el, amely zöld és sárga színű monokromatikus fényt bocsát ki, s így különösen alkalmas különféle bőrbetegségek gyógyítására.

A kutatásokat, 2003-ban történt nyugállományba vonulásáig, csaknem negyed századon keresztül, Bérces Tibor irányította. 2003-tól *Dóbé Sándor* látja el az osztályvezetői teendőket. A gázkinetikai kutatásokban Bencsura Ákos, Dóbé Sándor, Farkas Edit, Imrik Krisztina, László Barna, Lendvay György, Kovács Gergely, Réti Ferenc, Szilágyi István, Turányi Tamás, Vasvári Gábor és Zalotai Lajos, a fotokémiai-fotofizikai és lézerfizikai kutatásokban Baranyai Péter, Biczók László, Demeter Attila, Förgeteg Sándor, Kovács Gábor, Nagy Krisztina, Nemes Péter és Vidóczy Tamás vett részt.

Elektronátadási folyamatok vizsgálata és fluoreszcenciaspektroszkópai kutatások

A hatékony fotokatalitikus eljárások tervezése, valamint a fényenergia tárolása, kémiai energiává történő alakítása szempontjából alapvető fontosságú az elektronátadási folyamatok sebességét és a töltésselkülönülés határfokát befolyásoló tényezők megismerése. Fényelnyelés hatására a molekulák oxidáló vagy redukáló képessége nagymértékben módosul, így új reakcióutak nyílnak. Mivel a változás pillanatszerű, lehetővé válik gyors folyamatok követése is.

A *Biczók László* által vezetett téma keretében, fenolokat használva elektronodonorként, kimutatták, hogy a reakciósebességben több nagyságrendnyi növekedés érhető el hidrogénhíd-kötésre képes anyagok jelenlétében. Különösen fontos az a felismerés, hogy ekkor a gerjesztett molekulák egy olyan, új típusú elektronátadási folyamatban reagálnak, melyben az elektron és a proton mozgása egymással csatoltan megy végbe, ezért jelentős kinetikai izotóphatás figyelhető meg. E kísérleti eredmények alapul szolgálnak az elektronátadási folyamatok elméletének továbbfejlesztéséhez. A kutatások során elsőként tudták meghatározni a C_{60} foszforeszcencia spektrumát és a $C_{60}^{\bullet\ominus}$ gyökkation moláris elnyelési együtthatójának pontos értékét.

A kutatásokat H. Linschitz professzorral (Brandeis University, Waltham, USA) amerikai-magyar tudományos együttműködési project keretében folytatták.

A fluoreszcenciás módszerekkel végzett vizsgálatok fő célja új, fluoreszcenciás jelzőanyagok kifejlesztése és ezek alkalmazása a mikroökönyezetükben lejátszódó változások kimutatására. Mivel a fluoreszcencia hullámhossz-eloszlását, élettartamát, polarizációfokát a molekulák közötti kölcsönhatások jelentősen befolyásolják, egy fluoreszkáló csoport beépítésével nemcsak a jelzett molekulák mennyisége határozható meg, hanem információt nyerhetünk a jelzőcsoport körül kialakult lokális polaritásról, viszkozitásról és a hidrogénhíd-kötő anyagok jelenlétéről is. A fluoreszcenciás jelzőanyagok egyre inkább tért hódítanak az anyagtudományban, a környezetvédelmi, a kémiai, a biológiai és az orvosi kutatásokban. Sokoldalú felhasználásuk és népszerűségük nagy érzékenységüknek, jó szelektivitásuknak és egyszerűségüknek köszönhető.

A fluoreszkáló festékek szisztematikus vizsgálatával egy új, fluoreszcenciás jelzőanyagot sikerült kifejleszteniük a 90-es években, ami a szakirodalomban eddig közölteknel lényegesen több és pontosabb adatokat szolgáltat. Az új anyagot sikeresen alkalmazták micelláknak és ionos folyadékok aggregációjának a vizsgálatára.

A munkákban Sebőkné Nagy Krisztina és Miskolczy Zsombor is részt vett, egyes részeredmények H. Inoue professzor (Tokyo Metropolitan University) kutatócsoportjával együttműködve születtek.

Oxidációs folyamatok tanulmányozása

Mind ipari, mind elméleti kémiai szempontból a szénhidrogének gyors oxidációja (égése, robbanása) mellett a lassú oxidáció is jelentős folyamat – akár ha annak megvalósításáról (pl. szintetikus eljárások), akár elkerüléséről (motorhajtóanyagok, illetve élelmiszerek megóvása) van szó. Ezek a körülmények indokolták, hogy a lassú oxidációs folyamatokkal *Gál Dezső* irányításával a hatvanas évek végén egy új osztály foglalkozzon a KKKI-ben.

Modellezés, mint a kutatások elvi koncepciója

A rendszerelmélet, a számítástechnika és a kémiai kutatások műszerezettségének gyors fejlődése a hetvenes években lehetővé és szükségessé tette olyan modellezési eljárások kidolgozását, amelyek az összetett kémiai folyamatok vizsgálata során kapott *egyedi* adatokat

felhasználhatóvá teszik az adott reakciótípus *általános* leírására. A Gál Dezső vezetésével folyó kutatások során kidolgozott modellezési eljárás fő összetevői: irodalmi adatok alapján a vizsgálandó folyamat "lehetséges mechanizmusának" összeállítása; kísérlettervezés a mechanizmus alapján; a kísérleti eredmények felhasználása a mechanizmus redukciójára, illetve az adatok alapján a mérések számítógépes szimulációja. Az eljárás részletes leírása az Emanuel NM, Gál D: *Modelling of Oxidation Processes, Prototype: The Oxidation of Ethylbenzene* (Akadémiai Kiadó, Budapest) c. könyvben található meg.

Az eredmények nemcsak a lassú oxidációs folyamatok modellezését tették lehetővé, de példát is adtak ezen megközelítés általános alkalmazhatóságára. A munka legjelentősebb eredménye az ún. unicitás-tétel (mérési hibától mentes kinetikai adatok birtokában a folyamat mechanizmusa – bizonyos feltételek teljesülése esetén – egyértelműen meghatározható) Nemes István nevéhez fűződő bizonyítása.

A kutatások résztvevői Nemes István, Botár László, Vidóczy Tamás és Hajdú Péter voltak.

A modellezés alkalmazása kémiai oxidációs folyamatokra

Bár a kutatócsoport több szénhidrogén (kumol, toluol, metán, ciklohexanol, olajkeverékek) oxidációs folyamataira is alkalmazta a kifejlesztett eljárást, modellreakcióként az etil-benzol folyadékfázisú oxidációja szolgált.

A legfontosabb eredmények az alábbiak:

- tisztázták a folyamatban keletkező stabilis közti- és végtermékek képződési sorrendjét és a reakcióban fontos reaktív szabad gyökök szerepét a termékek képződésében,
- megállapították, hogy bár a régebbi feltételezéseknek megfelelően az elsődleges köztitermékek, a hidroperoxidok bomlása szabja meg a folyamatok időbeli lefutásának jellegét, a termékek mennyiségét ugyanezen köztitermék gyökök által kiváltott átalakulása határozza meg.

Az elméleti eredményeket az alkalmazott kutatásban és a fejlesztésben elérték egészítették ki. Számos ipari eljárás (többek között a kőolajkutak harmadlagos leművelése során a kutak begyűjtására alkalmazott módszer vagy a zsírok és olajok avasodásának elkerülésére alkalmazható eljárás) kidolgozására, szabadalmaztatására is sor került. Kiemelendő az a technológiai megoldás, amelynek segítségével a Nitrokémia Ipartelepek Rt. megvalósította egy széles körben alkalmazott gyomirtószer egyik köztitermékének gyártását. A vonatkozó szabadalmat a Monsanto cég (USA) megvásárolta.

Az osztály eredményeinek nemzetközi elismertségét mutatja a nyolcvanas években az Intézetben működő Nemzetközi Bázislaboratórium, melybe a környező országok, elsősorban a Szovjetunió rendszeresen küldték az oxidációs folyamatok kutatásával foglalkozó kutatóikat rövidebb-hosszabb tanulmányutakra. Ekkor indították útjára az Elsevier és az Akadémiai Kiadó közös folyóiratát, az *Oxidation Communication*-t, melynek alapító főszerkesztője Gál Dezső volt.

A Gál Dezső irányításával végzett kutatások résztvevői a következők voltak: Danóczy Richárdné, Havasné Gedra Ágnes, Héberger Károly, Keszler Ágnes, Móger Galina, Németh András, Paálné Lukács Júlia, Sümegi László, Vasvári Gábor és Vidóczy Tamás.

Fotokémiai vizsgálati módszerek

A szabad gyökös reagáló rendszerek elemi folyamatainak tanulmányozásának igénye vezetett el a lézeres villanófény-fotolízis kísérleti módszerének hazai meghonosításához. Mind szabad gyökök (pl. a hidroxilgyök), mind gerjesztett részecskék (szingulett oxigén, triplett keton) reakcióinak lejátszódását vizsgálták szénhidrogének folyadékfázisú oxidációjának körülményei között.

Ilyen kutatási feladatokon dolgozott *Vidóczy Tamás* irányítása mellett *Iryni György*, *Kúti Zsolt*, *Szedlacsek Péter* és *Vágó Júlia*.

Fotoszenzibilizátorok vizsgálata, oxidációs folyamatok a biológiában

A fotokémiai vizsgálati módszerek megismerése ráirányította a kutatók figyelmét egyes, fotoszenzibilizátorok által indukált oxidatív folyamatok fontosságára, a humán gyógyászatban történő felhasználás lehetőségére. A fotodinamikus terápia (ami hiperproliferatív betegségek, elsősorban rosszindulatú daganatok gyógyítására alkalmazható eljárás) fotokémiai hátterét többoldalú vizsgálatokkal igyekeztek tisztázni.

A *Gál Dezső* vezetésével végzett kutatások a szabad gyököknek a folyamatban betöltött szerepére helyezték a hangsúlyt, ezen az elven kíséreltek meg új mechanizmus alapján ható fotoszenzibilizátort kidolgozni. Ezekben a munkákban számos külföldi vendégkutató mellett *Kriská Tamás* és *Németh András* vett részt.

A fotoszenzibilizátorok gerjesztett állapotát, illetve az ennek segítségével képződő szingulett oxigén keletkezését és kioltását vizsgálta a fotokémiai folyamatok alaposabb megismerését célzó munka, melyben *Baranyai Péter*, *Botár László*, *Kúti Zsolt* és *Vidóczy Tamás* vett részt. Ilyen indíttatású vizsgálatokat végeztek a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyész-mérnöki Karának Fizikai Kémia Tanszékén is. Az Intézet és az egyetem együttműködésének eredményeképpen a két intézmény megalapította a Lézerspektroszkópiai Laboratóriumot, amely az új évezredben kezdte meg működését *Kubinyi Miklós* vezetésével.

Az említett folyamatok során zajló gyors (diffúziókontrollált) reakciók fenomenológiai, illetve bolyongásos modell segítségével történő általános kinetikai leírása *Botár László* munkásságához kapcsolható.

Az elméleti eredmények gyakorlati alkalmazása (a fotodinamikus terápia bevezetése a hazai gyógyítási gyakorlatba) a *Vidóczy Tamás* irányításával elkészült száloptikás fényforrás és fényintenzitás-mérő segítségével az Országos Gyógyintézeti Központ Fül-orr-gége osztályán *Csokonai Vitéz Lajos* vezetésével kezdődött el.

A fotokémia biológiai alkalmazásának témakörében a számos nemzetközi kooperációban elért eredmény közül a bécsi egyetem kutatóival közös munkát, a membránok fázisátalakulásának triplétt próbák segítségével történő vizsgálatát érdemes kiemelni. Az eredmények nemzetközi megbecsülését jelzi, hogy *Vidóczy Tamás* 3 éven át főszerkesztője volt a tématerület egyik vezető folyóiratának (az Elsevier által kiadott *Journal of Photochemistry and Photobiology B: Biology*-nak), majd alapító társ-főszerkesztője lett a Royal Society for Chemistry által kiadott *Photochemical & Photobiological Sciences*-nek.

Kemometriai kutatások

A kemometriai kutatásokat *Héberger Károly* témavezető kezdte el a KKKI-ban a 80-as évek közepén. Az első kemometriai tárgyú cikket 1987-ben jelentették meg az aktiválási paraméterek becsléséről, a súlyozás szerepéről, az exponenciális függvény konfidencia sávjának számításáról. A kutatások néhány eredménye az alábbiakban olvasható.

- Gyökaddíciós reakciók sebességi állandóit jelezték előre a molekulaszervezet alapján; főkomponens-elemzés segítségével szétválasztották a poláris és az entalpiás hatást.
- Kromatográfiás polaritási jellemzőket és stacioner fázisokat osztályoztak, tisztázták a polaritást meghatározó főbb faktorokat.
- Bizonyították, hogy a Kováts-index hőmérsékleti változását leíró függvényen minimum figyelhető meg, javaslatot tettek ennek termodinamikai, valamint kinetikai magyarázatára.

- Kvantitatív szerkezet–hatás összefüggések kemometriai módszerekkel történő vizsgálatának alapján:
 - fotodinamikus terápiában használatos fotoszenzibilizátorok tumorgátló hatását és felhalmozódását sikerült mesterséges ideghálók segítségével előre jelezniük,
 - számos tetrapirrol vegyület HIV-vírus ellenes hatását jósolták meg sikeresen.

Közreműködtek az első magyar nyelvű kemometriai tankönyv megírásában. Részt vesznek a kemometria egyetemi oktatásában. Rendszeresen megszervezik a kemometria kutatóinak magyarországi konferenciáit.

Makromolekuláris kémiai kutatások

A KKKI-ben annak megalapítása óta folynak makromolekuláris kémiai és fizikai kémiai kutatások. Az első háromfős kutatócsoportot *Hardy Gyula* vezette. 1957-től kezdve *Tüdős Ferenc* is részt vett a bővülő személyi állományú kutatócsoport munkájában, amelynek később vezetője lett. A kutatások elsődleges területe a *gyökös polimerizáció* kinetikája volt, ezen belül az inhibíció folyamatának kutatása kapott különös hangsúlyt. A molekuláris inhibitorok viselkedésében tapasztalt, valamint egyéb látszólagos anomáliák vezettek a *forró gyök hipotézis* kialakításához, amely a kísérleti eredmények egyértelmű magyarázatát adta. Az elmélet jelentős visszhangot keltett a nemzetközi tudományos életben. A kutatócsoport gyökkémiai szintetikus munkát is végzett, és jelentős része volt az elektronspinrezonancia spektroszkópiai módszer hazai elterjesztésében.

Az évek során a létszám bővülésével, Tüdős Ferenc vezetésével létrejött a Makromolekuláris kémiai osztály, melynek négy csoportjában polimerizációkinetikai, kopolimerizációs, polimer degradációs, reológiai, polimer fizikai kémiai és polimer hordozóhoz kötött bioaktív vegyületekkel kapcsolatos kutatások folytak. A polimer degradációs vizsgálatok a PVC, valamint a poliolefinek termikus és termooxidatív degradációjára terjedtek ki. Ezek a kutatások a későbbiek során polimer stabilizációs vizsgálatokkal bővültek, amelyek a PVC-stabilizálás egy új mechanizmusának, az *Iván Béla* által kidolgozott *reverzibilis blokkolási mechanizmusnak* a felismeréséhez vezettek. Az elmúlt évtizedben a Makromolekuláris kémiai osztály jelentős szervezeti átalakulásokon ment át. Jelenleg polimerekkel két osztály kutatói foglalkoznak. Az Alkalmazott polimer fizikai kémiai osztály és a Polimer kémiai és anyagtudományi osztály a Kémiai Kutatóközpont Anyag- és Környezetkémiai Intézetéhez tartozik.

Az *Alkalmazott polimer fizikai kémiai osztály* 1995 óta közös laboratóriumot alkot a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Műanyag- és Gumiipari Tanszékével. Az Osztályon, ill. a Közös Laboratóriumban *Pukánszky Béla* vezetésével folynak a kutatások, melyek fő területei a következők: poliolefinok degradációja és stabilizálása, határfelületi jelenségek heterogén polimer rendszerekben (polimer keverékek, töltőanyagot tartalmazó polimerek, szálerősítésű rendszerek, nanokompozitok), kis molekulájú anyagok transzportja polimerekben (gázok és gőzök permeációja, adalékok és oldószerek diffúziója és oldhatósága), biológiailag lebomló vagy megújuló nyersanyagforráson alapuló polimerek. A témák kiválasztásánál elsősorban a következő szempontok játszottak szerepet:

- a poliolefinok a legnagyobb mennyiségben gyártott műanyagok, mégsem tisztázott degradációjuk és stabilizálásuk minden kérdése. Különösen vonatkozik ez a feldolgozás közben végbemenő folyamatokra;
- a heterogén polimer rendszerek felhasználásának növekedése messze meghaladja az ipar és még a műanyagok növekedési ütemét is. Alkalmazásukkal kapcsolatban számos elméleti és gyakorlati kérdés merül fel, melyek tisztázása a jövő feladata;
- a transzportfolyamatok rendkívül fontosak a csomagolótechnikában, de más területeken is. A stabilizátorok oldhatósága és diffúziója, továbbá az adalékok közötti kölcsönhatások jelentősen befolyásolják a hatékonyságukat. A kémiai szerkezet és a hatékonyság közötti összefüggések felderítése ezért jelentős kérdés;
- a növekvő műanyagfelhasználással egyidejűleg egyre fontosabbá válnak a környezetvédelmi szempontok. A felhasznált műanyagok jelentős része a kommunális hulladékba kerül, így a műanyagok megsemmisítésének vagy újrahasznosításának megoldása elengedhetetlen a hulladékkezelés szempontjából. Mind a megsemmisítés,

mind az újrahasznosítás azonban számos nehézséggel jár, így célszerű olyan polimerek létrehozása, melyek a felhasználást követően biológiailag lebomlanak.

A Közös Laboratórium tagjai alap és alkalmazott kutatásokat egyaránt végeznek, és folyamatosan részt vesznek a BME Műanyag- és Gumiipari Tanszékén folyó oktatásban. Számos hazai és külföldi vállalattal állnak kapcsolatban, melyek közül a Tiszai Vegyi Kombinát Rt. (TVK) az egyik legrégebbi és legstabilabb magyarországi partner. A munkatársak gyakorlati célú eredményeire példaként említjük a *csomagolásra használt polietilén* fóliák stabilizátorai recepturájának kidolgozását.

A munkából jelentős tudományos eredmények is születtek. A korábban széleskörűen alkalmazott adalékok ugyanis az egészség- és környezetvédelmi előírások szigorodásával elavultak. A Laboratórium partnere, a termék gyártója bevezette a kidolgozott új recepturát, amely a polimer feldolgozók körében is sikert aratott. A kutatók vizsgálták a polimer ömledékben a feldolgozás során lejátszódó kémiai folyamatokat, a polimer szerkezete és tulajdonságai közötti összefüggéseket, valamint a polimerömledék stabilitását meghatározó tényezőket is. Az együttműködésben részt vett és jelenleg is részt vesz a Clariant Co. (Franciaország) adalékgyártó cég. A munka jelentős részét képezi új stabilizátorok kifejlesztése, amelyek közül egynek a szabadalmaztatása már megtörtént.

A Borealis Ltd. (Ausztria) vállalat megrendelésére a Laboratórium kutatói kidolgoztak egy lökhárító-alapanyag recepturát, amit a cég azóta is sikerrel alkalmaz. Számos, különböző célra alkalmas poliolefin termék adalékanyag-recepturájának kifejlesztésében és optimalizálásában működtek együtt a TVK szakembereivel. A legutóbbi fejlesztés eredményeképpen geotextília előállítására alkalmas polipropilén alapanyag stabilizátor rendszerét dolgozták ki.

Az alkalmazott kutatások mellett intenzív alapkutatások is folynak a Laboratóriumban, s ennek kapcsán új, nemzetközileg is elismert eredmények születtek. Összefüggéseket állapítottak meg a polimerek és a társítóanyagok jellemzői, a határfelületi kölcsönhatások, valamint a heterogén rendszerek szerkezete és tulajdonságai között. A Pukánszky Béla nevéhez fűződő, a töltőanyagot tartalmazó polimerek tulajdonságainak az összetételtől való függését leíró modellt az egész világon használják.

Az Osztály, ill. a csoport munkájában korábban résztvevő kutatók a következők voltak: Barabás Mihályné, Bálint Pálné, Epacher Edina, Fodor Zsolt, Földes Péterné, Iring Rezsőné, Iván Béla, Jókay László, Kelen Tibor, László Györgyné, Nagy Tibor, Turcsányi Béla.

A Laboratórium munkáiban jelenleg a következők vesznek részt: Pukánszky Béla, Földes Enikő, Bódiné Fekete Erika, Móczó János.

A több mint egy évtizedes külföldi (USA, Németország, Dánia) kutatómunka után az 1990-es évek második felében visszatérő *Iván Béla* vezetésével alakult meg a *Polimer kémiai és anyagtudományi osztály* azzal a célkitűzéssel, hogy a polimer kémia és az ezzel kapcsolatos anyagtudományok területén az utóbbi időben végbement és jelenleg is zajló, rendkívül dinamikus fejlődés legmodernebb irányaihoz kapcsolódó, nemzetközi színvonalú – elsősorban új funkciós polimereken alapuló – kutatásokat honosítsanak meg hazánkban is. Az ennek a tudományos osztálynak a munkájába bekapcsolódott, nagyrészt fiatalokból álló kutatógárda máris több nemzetközileg is elismert eredményt ért el. E kutatások a következő főbb területekre terjednek ki:

- a kvázielő karbokationos polimerizáció tanulmányozása és az ilyen eljárásokkal előállított új, polimer struktúrák szerkezetének és tulajdonságainak vizsgálata;
- új típusú polimer szerkezetek és topológiák előállítása kvázielő gyökös polimerizációval;

- nanoszerkezetű amfifil polimer kotérhálók: új szintézisek kidolgozása és az új anyagok szerkezetének, tulajdonságainak tanulmányozása, különös tekintettel a bioanyagokként és nanohibridekként történő alkalmazások szempontjából;
- polimerek, elsősorban a PVC környezetileg előnyös átalakításai és lebontása.

A Shell (Amsterdam) céggel folyó együttműködés keretében végzett karbokationos polimerizációs kutatásaik során egy olyan új katalizátorrendszert fedeztek fel, amely minden eddiginél szűkebb molekulatömeg-eloszlású polimereket eredményez. Ennek igen nagy a jelentősége jól definiált, elsősorban nanoszerkezetű és szupramolekuláris anyagok előállításában.

Igen jelentős nemzetközi érdeklődést váltottak ki a kvázielő atomátadásos, gyökös polimerizációval előállított, új, polisztirol makromonomer és propilén metallocénnel katalizált kopolimerizációjával nyert, poli(propilén-g-sztirol) ojtásos kopolimerekre vonatkozó eredményeik. Német kutatókkal együttműködve a szerkezeti paraméterek szisztematikus változtatásával tanulmányozták azok hatását az ojtásos kopolimerek kompatibilizáló hatékonyságára. Ezek a vizsgálatok meglepő, a várttal ellentétes tendenciájú változást mutattak az oldallánc hosszúságának vonatkozásában. Az erről szóló közleményüket egy angol társaság, a Warwick Effect Polymers, „Paper of the Week”-nek választotta 2003-ban.

A kutatócsoportnak a világon elsőként sikerült alternáló hidrofil és hidrofób láncszegmensekből viszonylag széles összetétel tartományban *amfifil kotérhálót* szintetizálnia. Előállítottak egy új típusú, pH-érzékeny, ún. intelligens amfifil kotérhálót is. Nemzetközi együttműködések keretében különféle szerkezetmeghatározó módszerek (pl. AFM, TEM, SAXS, SANS, DSC, szilárdtest NMR) alkalmazásával feltárták az amfifil polimer kotérhálók nanofázis-szerkezetű morfológiájának sajátosságait és annak összetételtől való függését. Pozitron annihiláción alapuló módszert dolgoztak ki és alkalmaztak az amfifil kotérhálók duzzadási dinamikájának vizsgálatára. Sejtletapadási vizsgálataik azt mutatják, hogy ezek az új, különleges szerkezetű anyagok másként viselkednek mint az irodalomban eddig leírt rendszerek.

Új eljárást dolgoztak ki PVC oxidatív lebontására, amely poláris csoportokat tartalmazó, kis molekulatömegű PVC-t eredményezett. Kidolgozták a degradált, azaz feldolgozáson már átesett PVC epoxidálását is. Ez utóbbi eljárásra világsszerte máris több kutatócsoport és iparvállalat felfigyelt.

A Polimer kémiai és anyagtudományi osztály kutatói több neves külföldi kutatóhellyel (pl. Max Plack Institute for Polymer Research, Material Research Center of the University of Freiburg, Institute of Polymer Research Dresden, Kyoto University, Technical University of Denmark, Vienna University of Technology, University of Akron, MIT stb.) folytatnak közös kutatásokat. Több nagy iparvállalattal volt kutatási együttműködésük, így pl. a következőkkel: BASF, Clariant GmbH (Németország), General Electric Co. (USA), DuPont Co. (USA). Ezek során több új típusú, szabadalmaztatásra került polimert és előállítási eljárást dolgoztak ki.

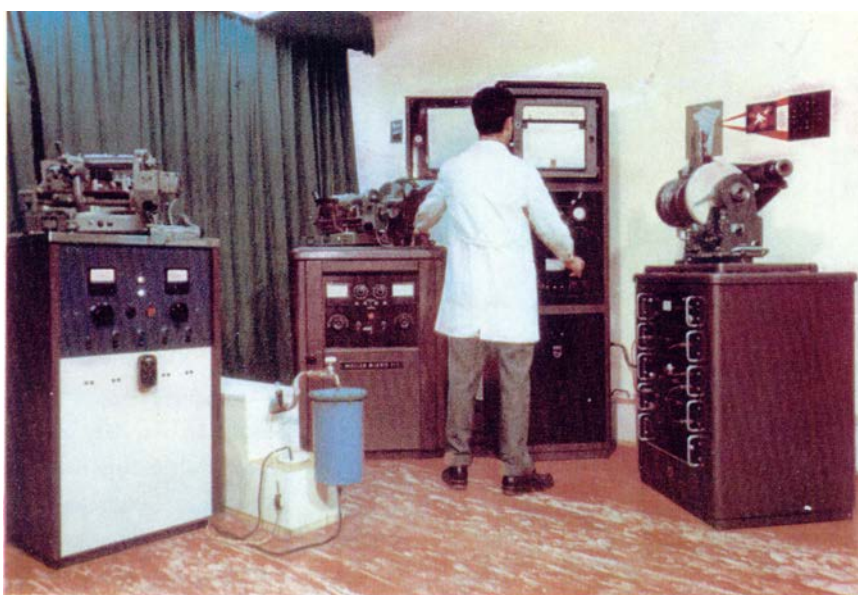
Iván Béla az Eötvös Loránd Tudományegyetem egyetemi magántanáraként fiatal munkatársaival együtt aktívan részt vesz az ott folyó elméleti és gyakorlati polimerkémiai és -technológiai oktatásban. Az elmúlt néhány évben ennek keretében 28 tudományos diákköri dolgozat – köztük számos díjazott pályamunka – 22 szakdolgozat és 5 PhD disszertáció készült a polimer kémia, a polimer technológia, valamint az anyagtudomány témakörében.

Jelenleg a kutatásokban Erdődi Gábor, Fónagy Tamás, Groh Werner Péter, Haraszi Márton, Iván Béla, Kali Gergely, Máthé Árpád, Mezey Péter, Mijid Narmandakh, Pálfi Viktória, Szakács Tibor, Szabó Sándor Géza, Szanka István és Szesztay Andrásné vesz részt.

Elméleti kémiai és szerkezeti kémiai kutatások

Röntgendiffrakciós kristály- és molekulaszervezet-kutatások

A röntgendiffrakciós *kristályszerkezet-kutatásokat*, egy évtizednyi (1947-1957) kényszerű szünet után, *Náray-Szabó István* – régi munkatársa *Sasvári Kálmán* (1957), majd *Kálmán Alajos* (1958) csatlakozásával – 1958-ban kezdte újra a négy évvel korábban alapított MTA KKKI-ben. 1972-ben bekövetkezett haláláig, több kézikönyv (pl. *Kristálykémia*, 1965) megírása mellett, elsősorban a többkomponensű polikristályos rendszerek (pl. talajok) diffraktometriás vizsgálatával és kvantitatív fázisanalízisük kidolgozásával foglalkozott. A kísérleti munka elvégzését egy Philips pordiffraktométer üzembeállítása (1959) tette lehetővé. Tanítványai 1974-1985 között a “Náray-Szabó–Péterné–Kálmán” néven leírt módszer segítségével Magyarország agyagásvány térképének elkészítéséhez sok ezer talajminta elemzését végezték el.



CHF Müller-Mikro-111 röntgendiffrakciós készülék az 1960-as évekből

A pordiffraktométert az újrainduló kristályszerkezet-vizsgálatokban is alkalmazták. A kálium-ólom-diszilikát diffraktogramjából számított modell ma is helytálló. A rendkívül időigényes és több szempontból is nehézkes filmtechnika viszonylag eredményes alkalmazása (1960-1980) után a szerkezetmeghatározásokban fontos előrelépést jelentett az első Nonius CAD-4 típusú diffraktométer üzembehelyezése (1979), amit 1993-ban egy második ún. *turbo* CAD-4 beszerzése követett. A két készülék párhuzamos működtetése biztosította mind a $\text{Cu-K}\alpha$, mind az $\text{Mo-K}\alpha$ sugárzás alkalmazását. Műszerenként hetenként átlagosan egy-egy kristály szerkezetét lehetett meghatározni. Ezzel a felszereltséggel az egykristálydiffrakciós csoport számos gyógyszer (pl. Arduan, Cavinton, Cimetidin, Deprenyl, Famotidin, Morpholep) szerkezetét állapította meg a hazai gyógyszeripar részére.

Kelet-Európában elsőként (1979) Magyarországon vált elérhetővé a gyógyszertervezési munkában is egyre fontosabb cambridge-i Krisztallográfiai Adatbank, amely jelenleg már háromszázezernél több szerves vegyület kristályszerkezetét tartalmazza. Ebből közel 900-nak a szerkezetét (~0.3%) a KKKI röntgendiffrakciós laboratóriumának munkatársai tárták fel.

2004-ben a kutatócsoport az Oktatási Minisztérium pályázati támogatásának segítségével egy *Rigaku R Axis Rapid* térdetektoros diffraktométert állíthat üzembe. A mérési idő egykristályonként az eddigi átlagosan egy hétről körülbelül fél napra rövidül.

Náray-Szabó István és Argay Gyula még a klasszikus filmtechnika (Weissenberg-kamra) alkalmazásával határozta meg többek között a PbCrO_4 (krokoit) és a Na_2SeO_4 szerkezetét. Az utóbbit Kálmán Alajos a K_2SeO_4 és a NaIO_4 szerkezetével együtt 1969-ben finomította, majd az adatokból kiindulva levezette (1971) a tetraédes oxianionok átlagos kötéshosszát ($\langle X-O \rangle$) megadó egyenletet. Ugyancsak filmekről gyűjtött adatokból határozta meg Sasvári Kálmán az első gyógyszerszerkezeteket (pl. citosztatikumok) a Chinoin Gyógyszergyár részére.

Tartós együttműködést a Laboratórium munkatársai először az ELTE Szerves Kémiai Tanszékével alakítottak ki (1965). Ennek keretében tisztázták az N-acil-szulfilimekben a kén oxidációs állapotától függően létrejövő, egyszeres és többszörös (S-N)-kötések természetét. Ezt követte a legegyszerűbb stabil spirozulfurán szerkezetének röntgendiffrakciós bizonyítása (1973), majd a szimmetrikus spirozulfuránokra jellemző hipervalens kötéseknek – az aszimmetrikus szerkezetekben kialakuló kettős ionokon át az izomer szulfoxidokban képződő ún. “nem kötött” $S \cdots O$ atomkapcsolatokig terjedő – vizsgálata. Ezek a kutatások több tucat, gyakran idézett dolgozattal a 90-es évek végén záródtak.

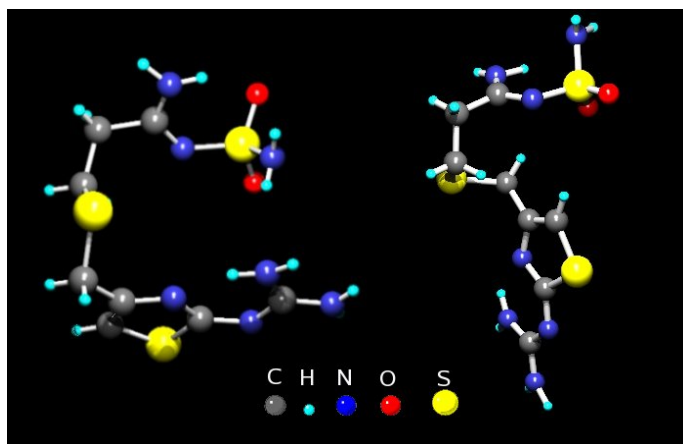
Párkányi László bekapcsolódásával 1970-ben megkezdődött a fémorganikus vegyületek vizsgálata. Ehhez a témához csatlakozott később Fülöp Vilmos, aki doktori értekezése megvédése után (1989) Angliába távozott, ahol fehérjeszerkezet-kutatásokban ért el nemzetközileg elismert eredményeket. Párkányi László, együttműködve a BME Szervetlen Kémiai Tanszékének munkatársaival, elsősorban a szilatránok szerkezetvizsgálatával gazdagította a hipervalens kötésekre vonatkozó ismereteket. Később nemzetközi kooperációban (University of Texas at El Paso) a 14. csoport elemei (Si \rightarrow Pb) által képzett fémorganikus vegyületek szerkezetvizsgálatában ért el fontos eredményeket. Intézetben belül, elsősorban Besenyei Gáborral együttműködve palládium-dimerek, valamint ezek nitrén- és azidkomplexei térszerkezetének meghatározásával foglalkoztak. Jelenleg az önszerveződő makrociklusok szintézise és szerkezetmeghatározása képezi kutatásuk fő irányát. Az ELTE Doktori Iskolájának hallgatójaként 2004-től ezen a témán dolgozik Hollóné Sitkei Eszter. Ide kapcsolódnak Deák Andrea NMR- és Mössbauer-vizsgálatokkal is kiegészült eddigi kutatásai, aki 1998-tól kezdődően doktori értekezése témájaként számos, potenciálisan biológiai aktivitással rendelkező organoórnkomplex önszerveződési mechanizmusát derítette fel. Jelenleg, az NMR-laborral együttműködve, újabb ónvegyületek szupramolekuláris kémiájával foglalkozik.

Czugler Mátyás, a kutatócsoportban elkészített diplomamunkáját követően (1972), kezdeményezte a zárványvegyületek (pl. koronaéterek), illetve a gazda-vendég komplexek máig tartó eredményes kutatását. Hazai és nemzetközi kooperációban végzett munkája jelentősen hozzájárult a kristályokat szupramolekulákként kezelő gondolkodás kialakulásához. Jelentős eredményeket ért el a szupramolekuláris-kovalens analógiák, pl. a királis "Big Mac", illetőleg "Csocsin" Piedfort-asszociátumok leírásában. Vezetésével több fiatal munkatárs kapcsolódott be a zárványkomplexek kutatásába. Bombicz Petra 1993-tól foglalkozik a gazda-vendég rendszerek szerkezetvizsgálatával. Tanulmányozta többek között a sztérikus, valamint az elektrosztatikus hatások és a vendégmolekula mérete közötti összefüggéseket. Jelenleg a BME Általános és Analitikai Kémiai Tanszékével együttműködve dolgozik a teofillin zárványvegyületei térszerkezetének feltárásán. Az irodalomban fellelhető legrövidebb $H \cdots H$ távolság hosszának (1,96 Å) alacsony hőmérsékletű neutron- és röntgendiffrakciós mérésekkel, továbbá oldékonyági vizsgálatokkal történő megerősítésével

új megvilágításba helyezte az 50-es évek elejétől többször vizsgált, az ún. "eltűnő", majd 1981-ben a Laboratóriumban megtalált, ismét "előtűnő" polimorfia jelenségét.

Jelenleg a gazda-vendég komplexek témaköréből készíti értekezését Báthori Nikolett, a BME Doktori Iskolájának hallgatója. Értekezése témája – együttműködve a BME Szervetlen Kémia Tanszékkel – új, háromfogású szimmetriatengelyű gazdamolekuláknak és ezek Piedfort-típusú komplexeinek előállítására, továbbá szerkezetük felderítése.

A *szupramolekuláris kémiába* beilleszthető mind a polimorfok (szupramolekuláris izomerek), mind az izostrukturális halmazok leírása. Ez elősegítheti mind a homo-, mind a heteromolekuláris kristályokban a molekulakomplementaritás lehetséges formáinak megértését. A szerves vegyületek kristályaiban felismert izostrukturalitás formák rendszerezése (1984-1997) után, Fábrián László kidolgozta (1999) az izostrukturalitás fokának heteromolekuláris rendszerekre is alkalmazható számítási módszerét. Kálmán Alajos és Argay Gyula kimutatta (1998), hogy a szimmetriavándorlásokkal együtt szupramolekuláris jelenségnek tekinthető a nemkrisztallográfiai szimmetriák megjelenése is. A szegedi Szent-Györgyi Albert Orvostudományi Egyetem Gyógyszerészi-Vegyteni Intézetében előállított, biológiailag aktív heterociklusos vegyületek 1979-től folyamatosan végzett szerkezetvizsgálata 2000-től az aliciklusos 2-hidroxi-karbonsavak és karboxamidok, továbbá ciklusos β -aminosavak vizsgálatával folytatódott. A vegyületek hidrogénhíd-hálózatainak elemzése feltárta a szupramolekuláris szoros illeszkedés kanonikus formáit, aminek az alapján új szerkezetek jósolhatók meg. Az izostrukturalitás újabb eseteinek felismerésén túl, feltárták a két alapvető krisztallográfiai jelenség: a polimorfia és az izostrukturalitás belső kapcsolatát. Több esetben kimutatták, hogy a polimorfia gyakran az izostrukturalitás egy-, két-, határesetben háromdimenziós formáinak megőrzésével kezdődik. Igazolták (2004), hogy a polimorfíához kötődő kétdimenziós rétegek irány szerinti váltakozásával kialakuló izostrukturalitás élesen megkülönböztetendő a klasszikus (morfológiai) izomorfiától.



A Quamatel nevű, gyomorfekély kezelésére, kiújulásának megelőzésére használt gyógyszer H_2 -receptor antagonistá hatóanyagának, a famotidinnek két polimorf módosulata röntgendiffrakciós szerkezetvizsgálat alapján

Az Intézetben folytatott bioorganikus kémiai kutatásokban való együttműködések közül kiemelendő számos nukleozid (pl. az IPDU) és nukleotid szerkezetmeghatározása. Több nukleozidszármazék szerkezetét tárták fel hazai együttműködők (Gyógyszerkutató Intézet) és külföldi partnerek, pl. a birminghami (Anglia) és a utahi (Salt Lake City) egyetem részére. A spirozul-furánok mellett, ezekben a vizsgálatokban is részt vett Koritsánszky Tibor, aki a korszerű deformációs elektronsűrűség-számításokban szerzett nemzetközi tekintélyt.

A kutatómunka mellett az egykristálydiffrakciós csoport részt vett és ma is részt vesz a röntgenkrisztallográfia oktatásában. Kálmán Alajos az 1964-1965. évi (Mérnöktovábbképző Intézet) veszprémi kurzus után, először a BME Vegyészmérnöki Karán (1969-1971), majd az ELTE TTK-án (1971-1980) tartott speciális kollégiumokat a röntgenkrisztallográfia tárgyköréből. 1981-1990 között a IV. éves vegyészhallgatóknak "Kémiai Krisztallográfia" címmel tartott főkollégiumot. 1990 után az igénynek megfelelően tart speciális kollégiumot III-IV. éves, illetve PhD-hallgatóknak. Több évig oktatott a Veszprémi Egyetemen is. A BME vegyészmérnök, illetve mérnök-fizikus hallgatóinak meghirdetett röntgendiffrakciós szemináriumok megtartásában Párkányi László, valamint Czugler Mátyás nyújtanak segítséget.

A kristálydiffrakciós csoport munkatársai 1974-ben részt vettek a Második Európai Krisztallográfiai Találkozó (ECM-2, Keszthely) megszervezésében. 2004 augusztusában az MKE támogatásával megszervezték a 22. Európai Krisztallográfiai Találkozót, amelyen öt kontinensről több mint 700 krisztallográfus vett részt. A konferencia elnöke Kálmán Alajos, titkára Bombicz Petra volt.

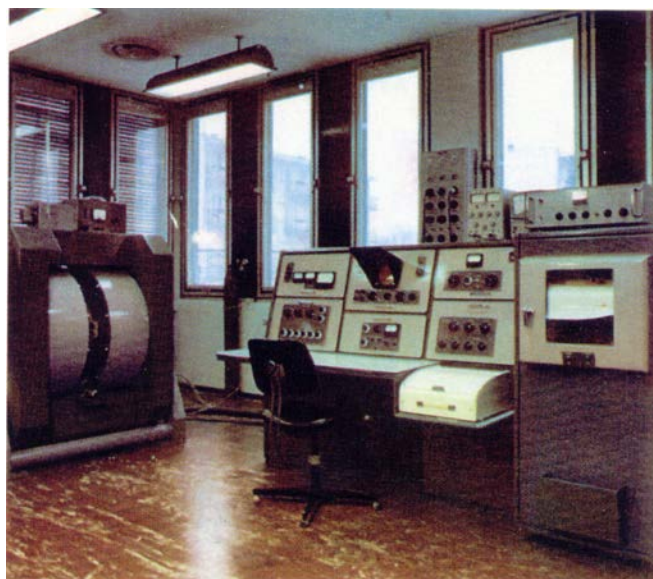
A kutatásokban Náray-Szabó István (1958-1972), Péterné Gál Éva, (1963-1972), Sasvári Kálmán (1958-1975), majd *Kálmán Alajos* vezetésével Argay Gyula, Bombicz Petra, Czugler Mátyás, Deák Andrea, Fábíán László, Fülöp Vilmos (1985-1989), Koritsánszky Tibor (1979-1992) és Párkányi László vett részt. 2003-ban Besenyei Gábor is az egykristálydiffrakciós csoporthoz csatlakozott. Jelenleg a csoportnál készíti doktori értekezését Báthori Nikolett és Hollóné Sitkei Eszter. 1963 és 1993 között Csonka-Horvai Júlia, majd Simon Kálmán vendégkutatóként vett részt a Chinoin részére végzett kristályszerkezet-meghatározásokban.

NMR-spektroszkópiai kutatások

A magmágneses rezonanciaspektroszkópia (NMR) a korszerű molekula- és anyagszerkezet-kutatás egyik legfontosabb és leggyorsabban fejlődő fizikai módszere. A módszer jelentősége arra vezethető vissza, hogy az általa nyert spektrumok közvetlen felvilágosítást adnak a vizsgált rendszert (molekulát) felépítő atomok számáról, atomi szintű kémiai környezetéről; az NMR-spektrumok segítségével meghatározható a vizsgált molekula (vagy más atomi rendszer) teljes háromdimenziós kémiai szerkezete.

Az NMR-spektroszkópiai csoport 1965-ben alakult meg a KKKI-ban. Ez az időpont egybeesett az első, kutatási célokra alkalmas, kereskedelmi NMR-spektrométerek megjelenésével. Hazánkban az első ilyen berendezést a KKKI-ban helyezték üzembe (AEI RS-2 60 MHz). Az azóta eltelt több mint három évtized alatt az NMR-spektroszkópia látványos fejlődésen ment keresztül. Az első évek (1964-1973) fő feladata a molekulák hidrogénatomjainak magrezonancia jelenségén alapuló NMR-spektroszkópia megismertetése és alkalmazása volt mind az Intézetben belül, mind azon kívül. A nagyszámú eredményesen megoldott szerkezetvizsgálati feladat közül kiemelkedő jelentőségű volt a szubsztituált tetrahidro-izokinolinium sók térkémiai törvényszerűségeinek meghatározása.

A szerkezetkutatásokban igen nagy előrelépést hozott az ország első Fourier-transzformációs, számítógép-vezérelt NMR-spektrométerének (Varian XL-100) a felállítása 1973-ban. Jóllehet az új mérés technika jelentős fejlődést eredményezett a proton NMR-spektroszkópia területén, a nagy változást azonban a természetes előfordulású szén-13 NMR-módszerek alkalmazása jelentette. Ezzel a módszerrel néhány milligrammnyi anyagminta szén-13 spektrumának felvétele révén betekintést nyerhetünk a vizsgált molekula szénvázába: teljes leltárt készíthetünk a szénatomokról, azok kémiai környezetéről, az egyes szénatomokhoz kapcsolódó hidrogén- és heteroatomokról.



AEI RS-2 típusú 60 MHz-es NMR-spektrométer
az 1960-as évekből

A kutatásoknak csupán néhány eredményét említjük: 1973-1984 között nagyszámú modellvegyület szisztematikus vizsgálatával elméleti és empirikus összefüggéseket állapítottak meg a szén-13 spektrumadatok és a vizsgált rendszerek kémiai és térkémi jellemzői között; a nyert tapasztalatok birtokában az NMR-csoport kutatói sikeresen tárták fel jelentős számú szintetikus és természetes vegyület szerkezetét; úttörő vizsgálatokat végeztek – egyebek között – az aromás kationok NMR-spektroszkópiai jellemzőinek elektronszerkezeti magyarázatával és a többszörös szubsztitúciós hatások elméleti értelmezésével összefüggésben.

A 80-as évek nagy technikai újdonsága: a kétdimenziós NMR-spektroszkópia és a nagy mágneses tér együttes alkalmazása. Ez a technika a KKKI-ban 1985-ben vált elérhetővé az országban elsőként egy modern, 400 MHz-es, multinukleáris NMR-spektrométer üzembeállításával. Az ezt követő időszak kutatási tevékenysége elsősorban a közepes (500-2000 dalton) móltömegű szerves és bioorganikus molekulák teljes (3D) szerkezetének meghatározására irányult. Az eredményesen vizsgált rendszerek a szerves kémia szinte teljes területét felölelik. Jelentőségük folytán azonban kiemelendők azok a kutatások, melyeket a Csoport az új természetes anyagok: antibiotikumok, alkaloidok, poliszacharidok, peptidek, nukleotidok, kisebb proteinek stb. teljes szerkezetmeghatározásával végzett. 1997-ben a Laboratórium egy korszerű Varian Unity-Inova 400 spektrométert kapott, amely közvetett detektálást, pulzáló térgradiens és szilárd állapotú feltét használatát is lehetővé teszi.

A kutatásokban *Radics Lajos* vezetésével: Peredyné Kajtár Mária, Gácsné Baitz Eszter, Sándor Péter, Matchytka Daisy és Egyed Orsolya vett részt. A kutatócsoport 2003-ban Tárkányi Gáborral és 2004-ben Domján Attilával erősödött.

A több alapegységből álló molekulák oldatban kialakuló szerkezeteinek vizsgálatára a longitudinális *relaxációs idők* gradiensét meghatározó NMR-spektroszkópiai módszert fejlesztett ki *Neszmélyi András* számos hazai és nemzetközi kutatóhellyel kooperációban. A módszert eredményesen alkalmazták szénhidrátok, glikokonjugáltak (flavonoid- és szteroid-glikozidok), lipopoliszacharidok és ciklodextrin-komplexek tanulmányozására.

A Csoportnak igen széleskörű és sikeres együttműködései vannak mind hazai, mind külföldi kutatóhelyekkel, amit a nagyszámú, kooperációban készült közlemény is igazol. Különösen eredményesek a közös kutatások a következő kutatóhelyekkel: Istituto Superiora di Sanita, Róma (C. G. Casinovi); Università di Perugia (C. F. Rossi, G. Grandolini, A.

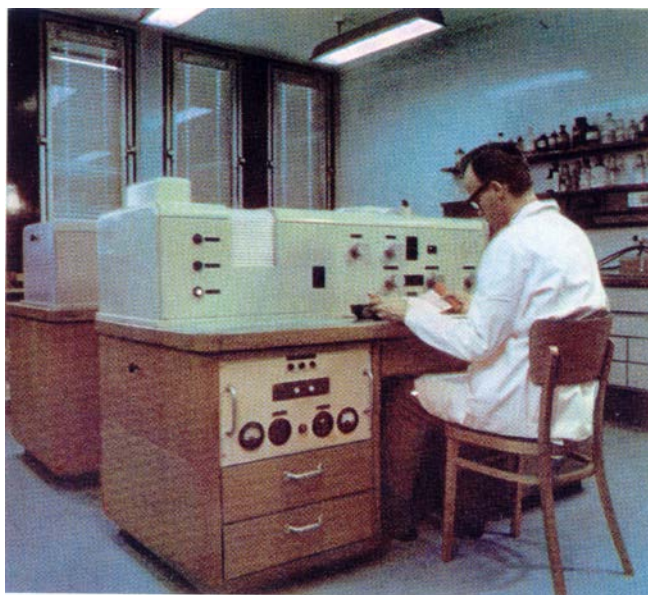
Taticchi); Università Cattolica, Róma (D. G. DelleMonache); University of New Brunswick, Canada (J. A. Findlay).

Tervezik, hogy pályázat révén sikerül majd egy 700 MHz-es berendezést beszerezniük. A tervezett műszerfejlesztés megvalósulása után az NMR Laboratórium a biológiailag érdekes makromolekulák szerkezetvizsgálatát is tervezi. A vizsgálatok kiterjednének a fehérjék, a nukleinsavak és a nukleotidok élettani szerepével összefüggő szerkezeti részletek feltárására. Terveik között szerepel új, hatékony bioanalitikai módszerek meghonosítása és a ^{31}P , ^{13}C és ^{15}N izotópot tartalmazó biomolekulák előállítása analitikai háttérének kiépítése.

Optikai spektroszkópai kutatások

Az optikai spektroszkópai csoport 1957-ben alakult meg *Varsányi György* vezetésével, *Szathmáry József* és *Holly Sándor* részvételével. A Csoport különösen a dihalogén-benzolok és a monosubsztituált piridinek normálrezgéseinek és rezgési frekvenciáinak asszignálása témákban ért el figyelemre méltó eredményeket.

A kísérleti infravörös (IR) spektroszkópai munka 1957 tavaszán kezdődött meg a SzUTA-tól ajándékba kapott IKSZ 11 típusú, *prizmás, egysugarú* infravörös spektrométerrel. Magyarországon ez volt az első *regisztráló* IR-spektrométer, amellyel komplett infravörös spektrumokat lehetett készíteni. Ezt a műszert 1959-ben egy NDK-gyártmányú, automatikus prizmováltású készülék (UR-10), 1967-től pedig egy világszínvonalú, *diffrakciós rácson* spektrofotométer (Perkin-Elmer 225) váltotta fel. Az IR-vizsgálatokat kiegészítő Raman-spektroszkópai mérések 1976-ban indultak meg egy Cary 82 típusú, tripla monokromátoros, *lézer-gerjesztéses* Raman-spektrométerrel.



Az országban elsőként (1959-ben) üzembe helyezett NDK gyártmányú (Zeiss, Jena) UR-10 típusú infravörös spektrométer

Az igazi technikai korszakváltásra 1978-ben került sor, amikor az optikai spektroszkópai laboratórium egy nagy teljesítményű (nagy spektrális felbontású és nagy érzékenységű) Fourier-transzformációs IR-spektrométerrel (Nicolet 7199) és ahhoz "on-line" csatolt gázkromatográfval gyarapodott. Az elválasztástechnikával kombinált, hatékony, új analitikai eszköz, a GC/FT-IR módszer alkalmazása a digitális mérés technikára és a

számítógépes adatfeldolgozási módszerekre való áttérés gyökeres változást hozott. Ez hamarosan maga után vonta a hagyományos (analóg detektálású) lézer-Raman spektrométer házilag digitalizálását is (Varga János, Jalsovszky György), ami lehetővé tette az azonos formátumra hozott IR és Raman spektrális adatok egyazon szoftverrel, azonos módszerekkel való kezelését és a számítógépes adatfeldolgozási módszerek alkalmazását.

A laboratórium műszerállománya 1994-95-ben egy-egy újgenerációs FT-IR és FT-Raman spektrométerrel gyarapodott (Nicolet Magna 750, ill. Nicolet Raman 950). Az 1978-as beszerzésű GC/FT-IR műszeregyüttest 23 évi megbízható működés után 2002-ben végleg elavultnak kellett nyilvánítani, 2003-ban az akkor már 9 éves Magna 750-es FT-IR spektrométer mellé beszerzett – a réginél két nagyságrenddel érzékenyebb – új GC/IR interfésszel (Thermo Nicolet gyártmány) és korszerű kapilláris gázkromatográf (Thermo Finnigan Trace) sikerült felváltani.

A *Holly Sándor* vezette kutatócsoport tevékenysége kezdettől fogva kétirányú volt: *alapkutatások* végzése egyszerűbb modellmolekulákkal a molekulaszervezet, a rezgésmódok és a spektrális paraméterek közötti összefüggések feltárására, ill. *alkalmazott kutatások* a jellemző kötési és csoportfrekvenciák segítségével részben a hazai szerves kémiai kutatások, részben a kémiai iparágak – elsősorban a gyógyszeripar – feladatainak megoldását segítő. Ez utóbbiak közül kiemelt jelentőségűek voltak – 1964-1967-ben az ún. *klóramfenikol szabadalomtorlási per* kapcsán – a Holly Sándor által végzett spektroszkópai vizsgálatok, melyek alapvetően járultak hozzá a pernek a magyar gyógyszeripar számára kedvező kimeneteléhez.

A több évtizeden át folyamatosan végzett szerkezetfelderítési munkák közül a néhány ezer szteránvázas (köztük a közismert *Flucinar* és *Apulein* kenőcsök hatóanyaga), több száz izokinolin-, valamint indolvázis vegyület (pl. a *Cavinton* hatóanyaga), továbbá tiokarbamid és tioszemikarbazid származékok spektroszkópai vizsgálatát és szerkezetmegállapítását, valamint a metabolizmuskutatásokhoz a GC/FT-IR módszerrel való hozzájárulást érdemes elsősorban kiemelni.

A spektrumok részletes értelmezése céljából végzett rezgési analízishez, az ún. *normálkoordináta-számításokhoz* kapcsolódott az infravörös elnyelési sávok *intenzitásának* (Jalsovszky György) és *polarizációs* sajátságainak kísérleti és elméleti vizsgálata (Keresztury Gábor). Ennek keretében az 1970-es években a molekulakristályok orientált rétegeinek infravörös elnyelési spektrumait vizsgálták lineárisan polarizált fényel, újabban pedig nematikus folyadék-kristályban oldott, *uniaxiálisan orientált* molekulákat tanulmányoznak. Az észlelt sávok polarizációs viselkedését (az ún. dikroizmust vagy polikroizmust) a *kvantumkémiai módszerekkel* számított erőterek felhasználásával végzett normálkoordináta-analízis eredményeivel kombinálva értékelik ki. Igazolták, hogy míg a korábban alkalmazott félempirikus erőterek alkalmatlanok voltak az olyan érzékeny spektrális sajátságok predikciójára, mint a sávintenzitások (vagy alacsony szimmetria esetén a sávpolarizáció iránya), a ma rendelkezésre álló, magasabb szintű, ún. *ab initio*, ill. *sűrűségfüggő* számítások segítségével igen közel kerülhetünk az IR- és Raman-spektrumok alapvető jellegzetességeinek gyakorlatilag teljes leírásához. A kutatócsoport vezetését 1997-ben *Keresztury Gábor* vette át.

Az elválasztástechnikával csatolt rezgési spektroszkópai kísérleti módszerek fejlesztése terén az utóbbi években végzett kutatások közül említést érdemelnek a TLC-rétegekre felvitt anyagok ún. felületerősített Raman-spektroszkópai (SERS) azonosítására irányuló kísérletek, valamint a folyadékkromatográfia (HPLC) és az FT-IR spektroszkópia csatolására vonatkozó átfolyócellás LC/IR kísérletek (István Krisztina).

Megemlítendő, hogy az első hazai infravörösspektroszkópai monográfia (Holly S., Sohár P.: *Infravörös Spektroszkópia*, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1968) egyik szerzője a csoport korábbi vezetője volt.

Az elmúlt időszakban a rezgési spektroszkópiai kutatásokban Holly Sándor, Imre Lajos, Jalsovszky György, Keresztury Gábor, Vinkler Péter, Lejtoviczné Egyed Orsolya, Varga János, Mohammedné Ziegler Ildikó és István Krisztina vett részt.

Igen eredményes nemzetközi együttműködések alakítottak ki finn (T. Sundius, Helsinki University), bolgár (B. Jordanov, BTA Szerves Kémiai Int., Szófia), horvát (Prof. Z. Meič, Rudjer Boskovič Institute és Zágrábi Egyetem) és indiai kollégákkal (G. Aruldas, Kerala University).

A Csoport több nemzetközi spektroszkópiai konferencia szervezésében vállalt jelentős szerepet (Osztrák-Magyar Rezgési Spektroszkópiai Konferenciák sorozata; Magyar-Indiai Molekulaspektroszkópiai Szeminárium Budapest, 1990, ill. New Delhi, 1992; 10th International Conference on Fourier Transform Spectroscopy Budapest, 1995; 25th European Congress on Molecular Spectroscopy Balatonfüred, 1996; 18th International Conference on Raman Spectroscopy Budapest, 2002).

2003. év folyamán a kutatóközponti átszervezések eredményeképpen a rezgési spektroszkópiai kutatásokkal foglalkozó csoport személyi és műszerállománya, Mink János kutatócsoportjának az Izotóp Intézetből való átköltözése és a két rezgési spektroszkópiai laboratórium összevonása folytán, jelentősen bővült: a jelenlegi IR- és Raman-spektroszkópiai Laboratóriumhoz nyolc kutató és két technikus tartozik. A csoport kutatási területe a következő témákkal gazdagodott: fémorganikus vegyületek spektroszkópiai vizsgálata; az IR- és a Raman-spektroszkópia biológiai és orvosi diagnosztikai alkalmazásai; nanoszerkezetek, vékonyrétegek és katalizátorok felületi tulajdonságainak vizsgálata reflexiós és emissziós IR-spektroszkópiai módszerekkel; atmoszférikus szennyezők FT-IR-spektroszkópiai tanulmányozása.

Molekulaspektroszkópiai és lézerkémiai kutatások

Az elméleti molekulaspektroszkópiai kutatások 1965-ben indultak az MTA KKKI-ban, kezdetben a *Varsányi György*, majd *Szőke Sándor* vezetése alatt álló Spektroszkópiai osztályon. A molekulák rezgési erőterének és az infravörös sávok intenzitásának számításával, majd gázfázisú molekulák rezgési-forgási spektrumainak analízisével, elsősorban a Coriolis rezgési-forgási kölcsönhatások vizsgálatával, valamint az intramolekuláris rezgési erők meghatározásával Nemes László és Jalsovszky György foglalkozott. A későbbiekben Nemes László van der Waals komplexek mikrohullámú forgási színképeit tanulmányozta, továbbá kis gyökmolekulák lézerspektroszkópiájával is foglalkozott (pl. CH, NH és az OH..Ar vdw komplex).

A lézerkémiai, ill. lézerspektroszkópiai kutatásokat 1980-ban kezdték el az MTA Szervetlen Kémiai Kutatólaboratóriumában *Nemes László* vezetésével. Jelenleg ezek a vizsgálatok a Kutatóközpont Szerkezeti Kémiai Intézetének Lézerspektroszkópiai laboratóriumában folynak. A Laboratórium legfontosabb témái a következők: szénklaszterek (pl. C₆₀) rezgési spektroszkópiája, lézerrel keltett plazmák (elsősorban szénplazmák) emissziós spektroszkópiai analízise, ill. kémiai és kinetikai modellezése, szén nanocsövek Raman-spektroszkópiai vizsgálata. Ezekben a kutatásokban korábban részt vett PhD-hallgatóként Varga Ferenc és a jelenleg PhD-hallgató Keszler Annamária is. A csoport az elmúlt években létrehozott egy lézerindukált plazmajelenségek spektroszkópiai vizsgálatára alkalmas laboratóriumot.

Felületspektroszkópiai kutatások

A Laboratórium 2002-ben jött létre, amikor is egy összefrekvencia-keltési (SFG) spektrométert állítottak üzembe. A felületvizsgálati módszerek között az SFG-spektroszkópia

egyedülálló lehetőséget ad a határfelületeken lejátszódó jelenségek nagy érzékenységgel történő *in situ* vizsgálatára. 2003-ban a Laboratórium felszereltsége tovább bővült egy ultranagyvákuumban (UHV) működő moduláris felületmódosítási (elektronsugaras párologtató, ionágyú) és felületanalitikai mérőrendszer (XPS és UPS) beszerzésével. A berendezéshez egy UHV és nagynyomáson, -130 és 600 °C hőmérséklet között egyaránt használható, speciálisan az SFG-mérések céljára kialakított cella is tartozik. A két berendezés összekapcsolásával kialakuló műszeregyüttes a világ vezető felületkémiai laboratóriumaival megegyező színvonalú kutatási infrastruktúrát képvisel.

A Laboratórium kutatásainak alapvető célkitűzése nanoszerkezetek és határfelületi rendszerek kémiai összetételének, elektronszerkezetének, morfológiájának, katalitikus tulajdonságainak, a határfelületen adszorbeált rétegek szerkezetének egyidejű jellemzése, a felsorolt tulajdonságok egymásra gyakorolt hatásának tisztázása.

Az eddig eltelt időszakban a következő témák kísérleti munkáit kezdték meg:

- Langmuir-Blodgett filmek orientációs és konformációs állapotainak vizsgálata,
- ion- és elektronsugarakkal, valamint plazmakezeléssel módosított polimerfelületek összetételének, orientációs és konformációs viszonyainak tanulmányozása,
- tenzidelegyek folyadék/levegő határfelületének vizsgálata,
- adalékokkal módosított polimerelegyek felületi összetételének, orientációs és konformációs viszonyainak tanulmányozása,
- hidrofobizált üvegfelületek vizsgálata,
- egyszerű folyadékok felületének vizsgálata nemlineáris spektroszkópiai és elméleti kémiai módszerekkel.

A Laboratórium vezetője *Guczi László*, munkatársai: *Keszthelyi Tamás*, *Pásztai Zoltán* és *Hakkel Orsolya*.

Tömegspektrometriai kutatások

Hazánkban a szerves kémiai analitikai célú tömegspektrométeres kutatások 1963-ban indultak meg, amikor az MTA Kémiai Szerkezetkutató Laboratóriumában *Tamás József* vezetésével létrejött egy önálló tömegspektrométeres kutatócsoport. Elsődleges feladatuk a szerves kémiai tömegspektrometria hazai szakembergárdájának kinevelése és a metodika minél szélesebb körben történő elterjesztése volt. Kutatásaik, a nemzetközi tudományos élet vezető irányaihoz kapcsolódva, főképpen a molekulák szerkezete és a tömegspektrum közötti összefüggések megismerésére irányultak.

A sikeresen működő csoport műszerparkja fokozatosan gyarapodott, és hamarosan az ország legjobban felszerelt MS-laboratóriumává fejlődött. Az induláskor beszerzett szovjet gyártmányú MX-1303-as tömegspektrométert 1969-ben egy – az akkori csúcstechnológiát képviselő – AEI-902, majd 1974-ben egy VG-MM-12-F GC-MS berendezés követte. A csoport tevékenységébe fokozatosan beépült a gyógyszeripari problémák megoldására irányuló gyakorlati tömegspektrometriai kutatási irány is. 1973-ban, az akkorra már tízfősre bővült kutatócsoportot az MTA Központi Kémiai Kutatóintézethez csatolták. Itt a műszerpark 1990-ben egy VG-ZAB-SEQ típusú készülékkel gazdagodott. Ennek nyomán a kutatások hangsúlya a tandem tömegspektrometriára tevődött át.

A kutatócsoport munkájának irányítását 1994-től *Vékey Károly* vette át. Vezetése alatt fokozatosan kirajzolódott az a két kutatási irány, mely az Osztály jelenlegi tevékenységét is döntően meghatározza.

Az *elméleti tömegspektrometriai kutatások* célja kettős. A vizsgálatok egyrészt igyekeznek olyan reakciókinetikai, fizikai kémiai és kvantumkémiai leírását adni a tömegspektrométerben végbemenő folyamatoknak, aminek alapján a spektrumok elméleti előrejelzése legalább is részben megvalósítható. Ennek mind a peptid- és proteinanalitikában,

mind pedig a gyógyszeripari alkalmazásokban óriási a jelentősége. Másrészt, a meglévő spektrumadatok és az ismert fizikai kémiai paraméterek felhasználásával olyan molekuláris alapadatok is számszerűsíthetőkkelé válnak, melyek eddig csak spekulatív alapon voltak közelíthetők. Kifejlesztettek egy speciális szoftvert, amely MASS-KINETICS néven az internetről is hozzáférhető, és ma már széles körben használják. A kutatócsoport nemzetközi hírnévre tett szert a tömegspektrometriás reakciók energetikai viszonyainak feltérképezésében.

Az elméleti munkák mellett az Osztályon szerteágazó és sikeres *alkalmazott kutatási tevékenység* is folyik. A méréseket kisebb részben a VG-ZAB-SEQ készüléken, elsősorban viszont az 1995-ben vásárolt Bruker BIFLEX és az 1997-ben beszerzett PE-SCIEX API-2000 típusú MALDI-TOF, illetve HPLC-MS készüléken végzik.

Az elmúlt évtizedben számos szerves vegyület, foszfor- és fluorszármazékok, fémorganikus vegyületcsaládok, továbbá biomolekulák (peptidok, oligoszacharidok, oligonukleotidok) szerkezetét határozták meg. Közreműködtek gyógyszerek hatóanyagainak, tisztaságának vizsgálatában, a minőségbiztosítás új módszereinek kidolgozásában, gyártási problémák megoldásában, farmakokinetikai mérésekben, bioekvivalencia meghatározásokban, új orvosi diagnosztikai lehetőségek kidolgozásában, valamint a metabolizmus- és a proteinkutatásban is.

Az egi Borászati Kutatóintézettel több eredeti eljárást dolgoztak ki a magyar borok aromaanyagainak azonosítására. A Magyar Nemzeti Múzeummal és a Palermói Egyetemmel együttműködésben foglalkoztak muzeális viaszanyagoknak, festékek kötőanyagainak és enyveknek tömegspektrometriás vizsgálatával.

Az elmúlt évek egyik legsikeresebb együttműködését hozta a Heim Pál Gyermekkorházzal, valamint az Országos Onkológiai Intézettel közösen végzett munka. Ennek eredményeképpen megkezdtek a világszerte egyre szélesebb körben alkalmazott, de hazánkban még nem rendszeresített, az újszülöttkori anyagcsere rendellenességek diagnosztizálására irányuló szűrővizsgálatokat. A célzott vizsgálatok elsősorban az aminosav-anyagcsere (elsődlegesen különböző organikus acidémiák), illetve a mitokondriális zsírsavoxidáció zavarainak diagnosztikájára irányulnak. Ezek mintegy húsz különböző rendellenesség (így pl. fenilketonúria, carnitinhiány, propionsav acidémia, hiperprolinémia, citrullinémia) kimutatására alkalmasak. A kidolgozás alatt álló új vizsgálati módszer rutin eljárást kínál az epesav- és a nukleozid-anyagcsere zavarainak, valamint egyes májrendellenességeknek a diagnosztizálására is. Az Országos Onkológiai Intézettel közösen új kutatásokat kezdtek az onkomarker glikoproteinek azonosítására, új rákdiagnosztikai lehetőségek kialakítására.

Hazai viszonyaink között meghatározó jelentőségű, hogy a kutatócsoport több évtizede folyamatosan magas szintű tömegspektrometriás háttérrel és továbbképzési lehetőséget biztosít mind az egyetemi oktatás, mind az iparvállalatok számára. Az egyetemi kutatások tömegspektrométeres vizsgálati igényeit együttműködések keretében elégítik ki, a Laboratóriumban hallgatói gyakorlatokat végeznek, évente három-négy doktorandusz és diplomamunkás hallgatót fogadnak.

A kutatócsoport tagjai jelenleg: Bihari Mária, Drahos László, Gömörly Ágnes, Imre Tímea, Ludányi Krisztina, Nagy Kornél, Pollreisz Ferenc, Szabó Pál, Szabó Rita, Sztáray Judit és Újszászy Kálmán. Korábban Bruck Péter, Bujtás György, Csizér Éva, Czira Gábor, Dobó András, Hegedűs Lászlóné, Lipták Miklós, Lovász Csaba, Mák Marianna, Schlosser Gitta, Szilágyi Zoltán, Takáts Zoltán is részt vett a kutatómunkában.

Elektronspin-rezonancia spektroszkópiai kutatások

Az ESR (elektronspin-rezonancia) spektroszkópiai laboratórium (korábban a Makromolekuláris kémiai osztály Gyökkémiai csoportja) kezdetben *Mohos Béla*, majd *Rockenbauer Antal* irányításával a 60-as évek elején honosította meg Magyarországon ezt a korszerű szerkezetvizsgálati módszert. A mérési eljárás az elektronok mágneses tulajdonságán alapul: paramágneses anyagokban a külső mágneses tér hatására szétváló energianívók között rezonanciaabszorpciót lehet létrehozni megfelelő frekvenciájú, mikrohullámú sugárzás segítségével. Ezzel a módszerrel kompenzálatlan elektronspinű anyagokat, például szabad gyököket és bizonyos átmenetifém-vegyületeket lehet vizsgálni, melyekben az elektronok mágnesességét nem szünteti meg a közöttük lévő kölcsönhatás. A módszer folyadék- és szilárdfázisú vizsgálatokra is alkalmazható, segítségével tanulmányozni lehet: a párosítatlan elektron molekulán belüli eloszlását; a szabad gyökök képződésének, átalakulásának, eltűnésének sebességét; a molekulák dinamikáját; a molekulák közötti mágneses kölcsönhatásokat.

A kutatások eredményességét döntő módon befolyásolja a rendelkezésre álló spektrométer minősége. A 70-es, 80-as években a Laboratóriumban egy japán gyártmányú JEOL spektrométer (JESME-3X) működött. A modern, számítógép által vezérelt mérésekre való áttérést saját fejlesztésben valósították meg a 90-es évek elején. Ehhez jelentős segítséget nyújtott a BME Fizikai Intézetével közösen alapított ESR-laboratórium létrehozása is. Ez a közös laboratórium, a Fizikai Intézet Jánossy András vezette nagyfrekvenciás laboratóriumával együttműködésben, jó háttérrel nyújt a szilárdtest-fizikai kutatásoknak is. Ezen a területen a magas hőmérsékletű szupravezetők és dópolt fullerének elektromos és mágneses tulajdonságainak vizsgálatában értek el jelentős eredményeket. Perovszkit-szerkezetű anyagokban speciálisan rendezett oxigénstruktúrákat mutattak ki, melyek fontos szerepet játszanak a szupravezető állapot kialakulásában. Fullerének nitrogén dópolásával a vezetési tulajdonságok változása idézhető elő, ami alapot teremthet új, félvezető anyagok kifejlesztéséhez. A műszeres háttér továbbfejlesztésében jelentős előrelépést hozott a 2003-ban üembe helyezett Bruker gyártmányú Eleksys spektrométer, ami legfontosabb paramétereiben világszínvonalon áll. A műszer nagy érzékenysége mindenekelőtt az ESR-spektroszkópia biológiai irányú alkalmazásaiban biztosít újabb lehetőségeket.

A szabad gyökös vizsgálatok egyik fontos célja olyan módszerek kidolgozása volt, amelyek lehetővé teszik rövid élettartamú gyökök kimutatását és azonosítását. Évekkel korábban, mielőtt a nitrogénoxid-molekula jelentős biológiai szerepét felismerték volna, az ESR-csoport vizsgálta, hogy az NO_x milyen gyökös reakciókban vehet részt, hogyan reagál különböző telítetlen szénhidrogén vegyületekkel. Az újabb vizsgálatokból az is kiderült, hogy az NO_x reakciók a fullerének polimerizációját is előidézhetik. A biológiai hatásmechanizmusban fontos szerepet játszó reaktív oxigén-speciesszek kimutatásában fontos eredményt értek el a spincsapdázott szabad gyökök ciklodextrines kapszulázásával. Ez a módszer még az erősen redukzív biológiai közegekben is módot ad a gyökök megfigyelésére. Ezek a kutatások az Université de Provence kutatóival együttműködésben folynak. A biofizikában széleskörűen alkalmazott pirrolidin-gyűrűs nitroxid-vegyületek szerkezeti és konformációs tulajdonságainak elemzésére, új módszert dolgoztak ki a természetes gyakoriságú ^{13}C atomoktól származó hiperfinom struktúra elemzésével.

Az ESR-spektrumok egyedülálló sajátága, hogy valamennyi atomi kölcsönhatás (hiperfinom struktúra) a molekula egyetlen párosítatlan elektronjától származhat. Ennek következménye, hogy még nagyon összetett vonalszerkezet is jellemezhető néhány csatolási paraméterrel. Ez a spektroszkópiai tulajdonság teszi lehetővé, hogy a spektrumok számítógépes szimulációja viszonylag kisszámú független paraméterrel megoldható legyen. A Laboratórium erre az eljárásra alapozva fejlesztett ki számítógépes módszereket, amelyek

bonyolult mozgások tanulmányozását, ill. a sok specieszből felépülő spektrumok szétbontását teszik lehetővé. Az eljárás alkalmas arra is, hogy aminosavak, peptidok és más, biológiai fontosságú ligandumok fémekkel alkotott komplexekben akár 15 különböző – gyakran más módszerrel nem tanulmányozható – specieszt is azonosítani lehessen. A hagyományos potenciometriai, illetve spektrofotometriai eljárásokkal szemben az izomereket is meg lehet különböztetni. A molekuláris dinamika leírására létrehozott eljárást sikeresen alkalmazták molekulafelismerési módszerek kidolgozásánál. Az ESR-laboratórium által kimunkált kiértékelő eljárásokat számos külföldi kutatóhely alkalmazza.

A kutatásokban Rockenbauer Antal, Korecz László, Győr Miklós, Árkosi Zsuzsanna és Nagy Nóra vett részt.

Elméleti kémiai és kvantumkémiai kutatások

A kvantumkémiai kutatások meghonosítása az Intézetben *Ladik János* nevéhez fűződik. Az általa kezdeményezett munkák a kvantumkémia és az elméleti szilárdtest-fizika határterületeire estek. Témaként a biopolimerek (fehérjék, DNS) szerkezetének elméleti vizsgálatát határozták meg. E fő kutatási témán kívül folytak azonban a szerkezet-hatás összefüggések (QSAR) elméleti alapjait tisztázni kívánó és a kvantumkémiai módszerfejlesztésekhez kapcsolódó kutatások is. Elsősorban az elektronkorreláció figyelembevételére szolgáló módszereket tanulmányozták.

Ladik János F. Martinoval (USA, ill. Svédország) közösen vezette le a Löwdin-féle „extended Hartree-Fock” (EHF)-módszer egyenleteinek egyszerűsített változatát. Az EHF-módszer teljes kidolgozását Mayer István végezte el.

A csoportban a 60-as években Pethő Árpád matematikai módszerek kémiai alkalmazásával foglalkozott. Később ő is, hasonlóan Ladik Jánoshoz, Németországban folytatta tovább munkáját.

A kvantumkémiai számítási módszerek kidolgozásában, a QSAR-kutatásokban, valamint a polimerek és biopolimerek, a molekulák és makromolekulák elektronszerkezetének számításában, a polimerek és kristályok határainál kialakuló elektronállapotok kvantumelméleti vizsgálatában Suhai Sándor, Mayer István, Biczó Géza, Lukovits István és Kertész Miklós vett részt, akik közül az utóbbi később az USA-ban, Suhai Sándor pedig Németországban folytatta szakmai karrierjét. A csoporthoz a későbbiekben Paizs Béla és Hamza Andrea csatlakozott.

A számítógépek elterjedésével a nemzetközi szakmai közvélemény figyelméből kiszorultak a *kémiai jelenségek kvalitatív fizikai értelmezésével* kapcsolatos szempontok, pedig ezeknek vizsgálata révén érthetjük meg a molekulák elektronszerkezetének alapvető vonásait olyan fogalmak segítségével, mint pl. a hibridizáció vagy az elektronegativitás. A Chemical Hamiltonian Approach (CHA) formalizmus keretében felírt energiapartícióból kiindulva, *Mayer Istvánnak* sikerült olyan kötésrend- és vegyértékindexeket definiálnia, amelyeket nagyon könnyen meg lehet határozni egy kvantumkémiai számítás eredményei alapján, s amelyek közvetlenül megfeleltethetők a kötésrend (multiplicitás) és az atomi vegyérték kémiai fogalmának. Ezeket a paramétereket (főleg a kötésrendeket) ma már széles körben használják különböző kémiai kérdések elméleti tárgyalásánál. A CHA-módszer sikerrel volt alkalmazható intermolekuláris kölcsönhatások vizsgálatára is. A különböző energiapartíciós módszerek az utóbbi években ismét az érdeklődés homlokterébe kerültek. Az elméleti kémiai kutatások eredményei alapján született meg Mayer István tollából a *Simple Theorems, Proofs, and Derivations in Quantum Chemistry* c. könyv a Kluwer Academic / Plenum Publishers, 2003 kiadásában.

Az 1970-es és a 80-as években *Gyarmati István* és *Lengyel Sándor* a termodinamika hullámelméletének alkalmazása, az elemi reakciók homogén kinetikája nemlineáris

termodinamikai elméletének kidolgozása területén végzett nemzetközi színvonalú kutatásokat.

Az elméleti kémiai kutatások *Lendvay Györgynek* a csoporthoz való csatlakozásával a kémiai reakciók kinetikájának és dinamikájának elméleti vizsgálatával bővültek. Ezek a vizsgálatok arra hivatottak, hogy elméleti oldalról segítsék a *kémiai szerkezet és a reakcióképesség*, konkrétan a szerkezet és a reakciósebesség kapcsolatának megértését az összetett kémiai folyamatok modellezése révén. A vizsgálatok olyan gyakorlati fontosságú területekre is kiterjednek, mint a légkörben és az égések során lejátszódó gyökreakciók kinetikája, a tömegspektrometriában előforduló ionbomlások, kis molekulák és atomok reakcióinak dinamikája, valamint az erősen gerjesztett molekulák ütközéses energiaátadási folyamatai. Az utóbbiakkal kapcsolatban megállapították, hogy a nagy rezgési energiát hordozó molekulák inert partnerrel ütközve legvalószínűbben kis energiaadagot veszítenek, de nem elhanyagolható mértékben igen nagy energiaadagok átadása is lehetséges. Meghatározták az energiaátadási valószínűség függvényalakját, melyet utóbb külföldi kísérletek is igazoltak. A folyamatban lévő kutatások egyik legizgalmasabb problémája annak felderítése: milyen módon lehet szabályozni, hogy egy molekula adott része reagáljon.

Az elméleti kémiai csoport az elmúlt években további kutatókkal bővült, és 2002-ben *Pápai Imre* vezetésével megalakult az Elméleti kémiai osztály. A jelenleg mintegy 10 fős kutatógárda tevékenysége tematikailag is kiszélesedett. Az új kutatási területek közül megemlítendő a homogén katalitikus folyamatok kvantumkémiai modellezése, melynek alapvető célja a reakciók legfontosabb elemi lépéseinek azonosítása és ezen ismeretek felhasználása új katalizátorok tervezésében. Ide vonatkozóan több, a széndioxid kémiai átalakítására irányuló reakció mechanizmusát is feltárták (*Schubert Gábor, Pápai Imre*). Szintén új kutatási terület a fémionok szolvatációjának pontos kvantumkémiai módszerekkel történő tanulmányozása (*Bakó Imre*), mely szorosan kapcsolódik az Intézetben folyó kísérleti folyadékszerkezeti vizsgálatokhoz. Az elmúlt években elméleti jellegű kutatások indultak a fémfelületeken végbemenő kemiszorpciós folyamatok tanulmányozására, melyekben periodikus kvantumkémiai és klasszikus molekuladinamikai szimulációs modelleket egyaránt alkalmaznak (*Bakó Imre, Borzsák István, Rozgonyi Tamás*).

Az Osztály kutatói aktívan részt vesznek nemzetközi konferenciák szervezésében. 2003 júniusában Balatonföldváron került megrendezésre a *“Theory of the Dynamics of Chemical Reactions”* témájú NATO Iskola, melynek fő szervezője *Lendvay György* volt.

Elektron diffrakciós szerkezetkutatások

Hargittai István vezetésével 1973-tól 1979-ig az Intézetben elektron diffrakciós szerkezetkutatások is folytak, amelyek a csoportnak az MTA Szervetlen Kémiai Kutatólaboratóriumhoz való kerülésével szüntek meg a KKKI-ben.

Az akkori munkákból kiemelendők a kén-szén és a kén-nitrogén kötés körüli forgási formáknak, ill. gyűrűkonformációknak, a szilícium- és germániumorganikus vegyületek konformációs jellegzetességeinek, valamint az alumínium- és galliumsók molekulakomplexei szerkezetének tanulmányozása során született kutatási eredmények.

A kutatásokban *Hargittai Magdolna, Rozsondai Béla* és *Schultz György* is részt vett.

Kémiai analitikai és környezetanalitikai kutatások

A kromatográfias, illetve a szerves mikro- és radioanalitikai kutatások az Intézet megalakulásától kezdődően a szerves- és később a bioorganikus kémia területéhez kapcsolódtak.

Az 1960-70-es években a radio- és a mikroanalitikai metodikai kutatások mikro- és "atmoszférikus" izotóp-gázanalitikai módszerek kifejlesztésére és automatizálására irányultak. A szerves vegyületek szén-, hidrogén- és kéntartalmának mikroanalízisére, illetve ^{14}C , ^3H és ^{35}S izotóppal jelzett szerves vegyületek és biológiai eredetű anyagok gázfázisú radioaktivitásmérésére kidolgozott eljárások, elvi újdonságuk mellett, biztos mérés technikai háttérrel nyújtottak a biológiailag aktív vegyületek kutatásához.

Az Intézetben szintetizált szerves vegyületek analitikai munkáit hosszú éveken keresztül Fodor Gáborné (későbbi nevén: Boromisszáné Varga Éva), Ötvösné Visontay Mária, Sarkadiné Keresztes Júlia és Szilágyiné Somogyi Klára végezte.

Az 1980-as években, a korszerű folyadékszintillációs mérőberendezések és szcintillátorok megjelenésével párhuzamosan, a folyadékszintillációs mintaelőkészítés és annak automatizálása került az Intézet radioanalitikai kutatásainak középpontjába. A KKKI kutatói által kifejlesztett és gyártott, nagyszámú, ^{14}C és/vagy ^3H izotóppal jelzett biológiai eredetű minta radioaktivitás-mérését lehetővé tevő készüléket (Oxiscint) több izotóplaboratórium még jelenleg is használja. Ugyancsak használják mind bel-, mind külföldön több laboratóriumban az élelmiszerek természetes tríciumtartalmának folyadékszintillációs ellenőrzésére az Intézetben kifejlesztett *automatikus mintaelőkészítő* berendezést. Ugyanebben az időszakban a mikroanalitikai kutatásokat az áramlóoldatos nyomanalitikai (FIA) módszerek fejlesztése váltotta fel. A kilencvenes évek elejére a csoport kutatóinak sikerült megvalósítani egy ún. on-valve mintadúsítási technikát. Ennek révén új, egyszerű környezetanalitikai eljárásokat dolgoztak ki.

A laboratóriumot kezdetben *Mlinkó Sándor*, majd később *Gács István* vezette.

A kutatásokban a következők vettek részt: Dobis Ottóné, Payer Károly, Szarvas Tibor, Vargay Zoltán, Dombi Sándor.

1993-ban a Kromatográfias csoport kivált a Bioorganikus kémiai osztályból és önálló szervezeti egységként működött tovább. Az intézeti folyadék- és gázkromatográfias szolgáltatási feladatok ellátása mellett a Csoport fő kutatási területe a *kémiai szerkezet* és a *kromatográfias retenció* közötti összefüggések vizsgálata volt. A későbbiekben a tématerület bővült, és új kutatási irányok kerültek előtérbe. Így például: új, nagyteljesítményű folyadékkromatográfias oszloptöltetek fejlesztése, elválasztási sajátságaik felderítése és alkalmazásuk a gyógyszer-, a környezetvédelmi és az élelmiszeralitikában, többváltozós matematikai-statisztikai módszerek alkalmazása a kromatográfias adatértékelésben, valamint a molekuláris kölcsönhatások kromatográfias vizsgálatának lehetőségei.

A Laboratórium munkáját korábban *Vajda Miklós*, majd *Valkó Klára*, a későbbiekben *Forgácsné Tóth Eszter* irányította. A kutatásokban Cserháti Tibor, korábban Csárnyi Ágnes, Ganzler Katalin, Fellegvári Irén és Juvancz Zoltán is részt vett.

A kromatográfias csoport korábbi tematikája a 90-es években átalakult, a kutatási tevékenység döntően a környezetvédelemhez kapcsolódott.

A Kémiai Kutatóközpont Környezetvédelmi és Korrózióvédelmi Laboratóriumának akkreditálási okiratát 2001. július 2-án adták ki. A Laboratórium vezetője *Pálinkás Gábor*, a Központ főigazgatója (csoportvezetője: *Horváth Tibor*) volt.

A Laboratórium 2003-tól Horváth Tibor vezetésével a Kutatóközpont Anyag- és Környezetkémiai Intézetéhez tartozik.

A Laboratórium a következő főbb tevékenységeket végzi:

- környezetvédelmi analitikai mérések,
- gyógyszeranalitikai mérések,
- analitikai módszerfejlesztés,
- analitikai módszerek validálása,
- felületvizsgálatok,
- elektrokémiai vizsgálatok.

Legfontosabb kutatási témáik a következők:

- új analitikai módszerek kidolgozása felületaktív anyagok meghatározására,
- új kromatográfiás módszerek kidolgozása és alkalmazása növényvédő szerek és maradványaik meghatározására,
- szennyezőanyagok egymás melletti kimutatásának kidolgozása.

Az alkalmazott analitikai módszerek, ill. eszközök a következők:

- nagyteljesítményű folyadékkromatográfiás rendszerek (HPLC),
- tömegspektrometriás detektorral felszerelt gázkromatográf (GC/MS),
- C-, H-, N-, S-elemanalízis kromatográfiás elválasztással,
- UV-VIS, IR-, FTIR-spektrometria,
- szekvenciális, induktív csatolású plazmaemissziós spektrométer (ICP-OES),
- klasszikus analitika,
- növénytesztek,
- gravimetrikus korróziós vizsgálatok:
 - ipari hűtővizekben,
 - belső égésű motorok fagyálló hűtőfolyadékaiban,
 - savas közegben,
- elektrokémiai vizsgálatok:
 - egyenáramú elektrokémiai vizsgálatok,
 - impedancia-spektroszkópiai vizsgálatok,
- felületvizsgálatok:
 - fémfelületek pásztázó elektronmikroszkópos vizsgálata,
 - felületkémi vizsgálatok alagúteffektuson alapuló mikroszkóppal (STM),
 - felületkémi vizsgálatok atomerő-mikroszkóppal (AFM),
- szilárd minták kristályos fázisainak elemzése röntgendiffrakciós módszerrel.

5. A kutatásokat segítő részlegek

Természetes, hogy egy kutatóintézet munkáját számba véve, a hangsúly a kutatáson, a kutatókon van. Tudjuk azonban, hogy jó kutatási eredményeket csak megfelelő körülmények között lehet elérni. A KKKI, ill. megalakulása óta a Kémiai Kutatóközpont gazdasági, műszaki, beruházási, raktári, könyvtári és a különböző adminisztrációs teendőket ellátó részlegei, valamint a közvetlenül kutatást segítő, méréseket, szintéziseket végző technikus és laboráns munkatársainak kiváló munkája nélkül nem vívhatott volna ki magának nemzetközi tekintélyt a tudományos életben.

Tudományos Titkárság

A Tudományos Titkárság szervezete 1975 óta a Könyvtárból, a Reprográfiából, a Nemzetközi kapcsolatok csoportjából és a Tudományos koordinációs csoportból áll; vezetője jelenleg *Vinkler Péter*.

Korábban a Titkárság koordinálta az Intézet által gondozott kutatási főirányok és programok szerteágazó adminisztrációs feladatait. Jelenlegi feladatai közé tartoznak a következők: az MTA és más főhatóságok részére készítendő különböző tájékoztatók, jelentések, beszámolók, tervek és koncepciók összeállítása, tudományos rendezvények és nemzetközi együttműködések szervezése, az Intézet tevékenységét és eredményeit ismertető kiadványok szerkesztése, a publikációk és idézetek nyilvántartása; rendszeresen megjeleníti az Intézeti Híradót (illetve jelenlegi címén: Kutatóközponti Krónikát), amely beszámol az Intézet életét érintő legfontosabb eseményekről.

A *Reprográfiai (xerox, nyomda)* részleg vezetője 1994-ig *Schmidt Gábor* volt, őt *Bereyné Woosch Katalin* követte.

A KKKI Tudományos titkársága *Nemzetközi kapcsolatok csoportjának* vezetője hosszú időn keresztül *Jakab Lászlóné* volt.

Könyvtár és informatika

A Kutatóközpont Könyvtára a Központ létrejötte óta két részlegből áll. Az egyik az Izotópkutató Intézetben, a másik a központi telephelyen, a Pusztaszeri úton található. A két könyvtári részleg egységes és összehangolt állománygyarapítási gyakorlatot folytat.

A KKKI könyvtára a tervszerű könyv- és folyóiratbeszerzéseknek köszönhetően a 90-es évekre az ország egyik legjobb kémiai szakkönyvtárává vált. Pedig 1962-ben a könyvtárban mindössze 6869 dokumentum, 3984 könyv és 2885 kötetnyi folyóirat volt található. 1970-ben már 20000 kötetet számlált az állomány, és mintegy 200 folyóiraatra fizettek elő. Ezek között a folyóiratok között azonban nagy számmal voltak hazai és olyan külföldi periodikák, amelyek nem tartoztak a nemzetközi tudományos információáramlás fő vonulatába.

1968-ban az MTA Sztereokémiai Kutatócsoportjának, 1973-ban a Kémiai Szerkezetkutató Laboratóriumnak a könyvtári állományával gyarapodott a KKKI könyvtára. 2003-ban az állomány mintegy 72000 kötet (a Pusztaszeri úti telephelyen 52000, a Konkoly-Thege úton 20000 kötet található).

A két részlegben összesen négy könyvtáros dolgozik. A KKKI könyvtárának első vezetője *Varga Veronika* volt 1978-ig. A könyvtár 1975-től az Intézet Tudományos titkárságának szervezetébe integrálódott. A könyvtár Pusztaszeri úti részlegének vezetője 1979-től *Ficzere Jenőné*, ahol *Ihrig Ernőné* és *Pintérné Kecskés Györgyi* mint beosztott

könyvtárosok tevékenykednek, míg korábban Bakos Éva és Schlitter Erzsébet dolgoztak ott hosszú ideig. A Konkoly-Thege úti könyvtár vezetője (1996-tól) Kis Sándorné.

A IV. épület elkészültéig (1978) a Könyvtár az igazgatósági épületben volt elhelyezve igen szűkös körülmények között. Az új épületben egy 606 m²-nyi hasznos alapterületű, korszerű, tágas, szabadpolcos elrendezésű könyvtárat létesítettek, amelyhez a pincében egy nagyszámú könyv és folyóirat elhelyezésére alkalmas raktárhelyiség is tartozik.

A KKKI, ill. a Kémiai Kutatóközpont mindenkori vezetői, szem előtt tartva a kutatásokhoz szükséges szakirodalmi információ elsődleges fontosságát, a legnehezebb pénzügyi körülmények között is igyekeztek a Könyvtár színvonalát megőrizni, sőt emelni. A Könyvtár folyóiratbeszerzésekre fordított kiadásainak a KKKI, ill. a Központ MTA-költségvetési támogatásához viszonyított aránya mintegy 5-7 %, ami az MTA-intézetek között az egyik legmagasabb.

A könyvtár mindig is számottevő mértékű könyvtárközi kölcsönzést bonyolított le. 2003-ban pl. mintegy 1280 dokumentumról kért és 1756 dokumentumról küldött másolatot.

Az utóbbi tíz évben a beszerzett könyvek bibliográfiai adatait a könyvtár a mindkét részlegben működő integrált számítógépes rendszerben (TINLIB) rögzíti, amely lehetővé teszi a katalógus egy felületen történő megjelenítését, így az adatok az Interneten keresztül is hozzáférhetővé váltak.

Annak ellenére, hogy a tudományos folyóiratok ára évről-évre jelentős mértékben nő, 2004-ben 178 periodikára – amelyek között 143 külföldi folyóirat – fizettek elő. Elektronikusan is lehetséges a folyóiratcikkek teljes szöveggel történő elérése további többszáz periodikára vonatkozóan pl. a Springer-adatbázis segítségével. Internet-kapcsolat révén a Központ kutatói elérhetik a Beilstein's CrossFire adatbázist, ami elsősorban a szintetikus szerves kémikusok számára elengedhetetlen fontosságú. Hasonlóképpen hozzájutnak a Web of Science révén a Science Citation Index adattáraihoz is. Az Amerikai Kémiai Társaság kiadásában megjelenő 22 folyóirat, köztük az illető szakterületek legjobb folyóiratai (így pl. Journal of Organic Chemistry, Analytical Chemistry, Biochemistry, Journal of Physical Chemistry, Inorganic Chemistry, Chemical Reviews stb.) olvashatók Interneten a könyvtárban, s nem csak a friss cikkek, hanem a folyóirat megjelenésétől kezdve az archív anyagok is. A Science Direct elérése révén az Elsevier-kiadású folyóiratok is olvashatók.

A könyvtárban a kémikusok legfontosabb referáló folyóiratának, a Chemical Abstracts-nek nemcsak a papírpéldányai, de a 12., 13. és a 14. Collective Index-e (az 1987-2001 közötti kivonatokkal) CD-n is rendelkezésre áll. Hasonlóképpen a 2002-2004. évek referátumai is.

A Kutatóközpontnak a Hungarnet hálózathoz való gyors (1 Gb) csatlakozása 1998-ban épült ki. Jelentősen korszerűsödött a belső számítógépes hálózat, létrejött az Intranet, amely a gyors, belső tájékoztatást segíti.

A Kutatóközpontban működik a Cambridge Krisztallográfiai Adattár (CSD-system) Magyar Nemzeti Alközpontja.

Megemlítendő, hogy az MTA Kémiai Kutatóközpontban, a Tudományos Titkárság keretében jött létre 2000-ben az MTA Tudományos Publikációs Adattára. Az Adattár csoportvezetője Biróné Vasvári Lilian. Jelenleg, 2004-ben az Adattár az MTA kutatóintézetek és az egyetemeken lévő támogatott tanszéki kutatócsoportok 1992-től 2003-ig publikált tudományos és ismeretterjesztő közleményeinek bibliográfiai leírását, a PhD, ill. az MTA Dr. értekezéseket, továbbá a közleményekre érkezett hivatkozásokat (ez utóbbiakat 2002-ig) tartalmazza. A publikációk adataihoz az Internet révén bárki hozzáférhet, míg az idézeteket csak az MTA kutatói olvashatják. Az idézetek között nemcsak a Web of Science-ben (tehát Science Citation Index-ben), hanem a kutatók által talált, ott nem szereplő folyóiratokban, valamint könyvekben, egyéb helyeken lévő hivatkozások is szerepelnek. Az Adattár nemcsak

a tudományos információellátást segíti, de a kutatók, az intézetek vagy az Akadémia részére publikációs jegyzékek, statisztikák készítésével a kutatásirányítás számára is hasznos adatokat nyújt.

Gazdasági osztályok

Az Intézet gazdasági részlegének végleges kialakítására 1962-ben került sor, amikor az Intézet gazdasági vezetőjévé *Kerekes Károlyt* nevezték ki, aki ezt a feladatát 1995. december 31-ig, nyugdíjba vonulásáig látta el.

A gazdasági szervezetet három önálló osztály alkotta:

- Pénzügyi és számviteli osztály,
- Beruházási és anyagellátási osztály,
- Üzemeltetési osztály.

A Pénzügyi és számviteli osztály első vezetője *Nemes Miklós* volt, aki a 60-as évek második felében munkavégzés közben tragikus körülmények között elhunyt. Utóda *Kenézy Miklós*, majd *Nasztanovics Ferencné* lett, akinek nyugdíjba meneteletét követően (1986-ban) *Czakóné Tóser Mária*, majd 1996-ban *Geösel Mária* lett a pénzügyi osztályvezető. Az Osztály feladata az Intézet pénzügyi, számviteli és munkaügyi feladatainak ellátása volt, beleértve a személyi jövedelemadó és a TB-ügyintézkést, valamint az utókalkulációt is, továbbá a tárgyi eszközök és anyagok analitikus nyilvántartását.

Megemlítendő, hogy a Pénzügyi és számviteli osztály feladatait kiválóan látta el, amit bizonyít az is, hogy az Akadémia revizorai a kétévenként tartott ellenőrzések alkalmával mindig elismeréssel szóltak és szólnak ma is az Osztály munkájáról.

A Beruházási és anyagellátási osztály első vezetője *Katona Péter* volt, őt *Kenézy Miklós* és *Márkus László* követte. Ezt a feladatkört a 80-as évek második felében *Molecz István* vette át. A 90-es évek második felétől kezdődően *Kiss István* vezeti az Osztályt. Az Osztály feladata műszerek, anyagok beszerzése, az ezzel kapcsolatos ügyintézkések, a vegyszerraktár, a műszaki anyagraktár és az általános anyagraktárak működtetése.

Az Üzemeltetési osztály első vezetője 1983-ig *Nagy Rezső* volt. Őt *Berey János* követte. Ezután az Osztály feladatait részben a Beruházási és anyagellátási osztály, részben pedig a Műszaki osztály vette át. Az Osztály feladata a gondnoki teendők ellátása volt.

A Munkaügyi csoport vezetője hosszú éveken keresztül *Bándy Jánosné* volt.

1996. január 1-jei hatállyal nevezte ki az Intézet főigazgatója *Benussi Silvio Antoniot* az Intézet jelenlegi gazdasági igazgatóját. Vezetése alatt sokat fejlődött a gazdasági-pénzügyi adatok számítástechnikai információs rendszere.

Az Intézet gazdálkodását a 60-as évek elejéig központi gazdálkodási rend határozta meg, ami annyit jelentett, hogy a pénzügyi kereteket nem bontották le az egyes szervezeti egységekre, hanem központilag kezelték. Később az egyes osztályok számára egységesen dologi költségkeretet állapítottak meg.

A 70-es évek közepétől látni lehetett, hogy az Intézet kizárólag a központi költségvetésből már nem tudja fenntartani magát. Az Igazgatóság ezért 1977-ben egy ún. Működési Bizottságot hozott létre *Ötvös László* igazgatóhelyettes vezetésével, aminek a feladata egy teljesen új finanszírozási rendszer kidolgozása volt. Az új finanszírozási rendszer lényege az volt, hogy a tudományos részlegeket saját bevételek növelésére ösztönözze, de úgy, hogy ezzel párhuzamosan biztosítsa a megfelelő színvonalú és mennyiségű tudományos eredmény publikálását is. Mindez úgy valósulhatott meg, hogy nemcsak a dologi kereteket osztották szét az osztályok között, hanem 5% tartalék képzése mellett, az Intézet teljes költségvetési támogatását. Az Intézet költségvetési keretét az osztályok publikációs teljesítményének és létszámának arányában osztották szét. A mindenkori költségek

figyelembevételével törekedtek az egyes tudományos részlegek bevételeinek növelésére. A finanszírozási rendszer hosszú ideig jól működött, nélküle az Intézet nem tudta volna pénzügyi egyensúlyát megtartani, hiszen mint az a 8. fejezet 2. táblázatából látható, volt olyan időszak, amikor az MTA-költségvetési támogatás az éves bevételeknek mindössze 30%-át érte el.

Műszaki részlegek

1955-ben *Pál Andor* kapta a feladatot, hogy alkalmas helyet találjon az építendő Központi Kémiai Kutatóintézet számára és irányítsa a KKKI beruházási programját. Később ő lett a felépült Intézet műszaki vezetője. A 60-as években elsősorban a laboratóriumok kialakítása, felszerelése, valamint a kutatásokhoz szükséges eszközök előállítása volt az elsődleges feladat.

A műszaki dolgozók kiváló szaktudása mindig nagy segítséget nyújtott a kutatási részlegeknek, pl. speciális mérőberendezések építésével, különleges üvegtechnikai eljárásokat igénylő laboratóriumi eszközök előállításával, ill. spektroszkópiai és más célú részegységek, alkatrészek elkészítésével. Később az épületek állagának, működőképességének fenntartása lett a legfontosabb feladat. Az elmúlt ötven év alatt a műszaki részlegekben sokan dolgoztak. Itt csak néhányuk neve említhető meg, akik különösen hosszú időn át járultak hozzá az Intézet műszaki feladatainak megoldásához: *Szűcs Géza*, villanyszerelő csoportvezető, *Visi János*, a karbantartók vezetője, *Pataki József*, az üvegtechnika vezetője, *Szombati János*, műhelyvezető.

Megemlítendő, hogy a műszerész és a lakatosműhely, továbbá a víz- és a villanyszerelő, ill. a karbantartó részlegek létszáma a 70-es, 80-as években 35-40 fő volt, míg jelenleg mindössze 26 fő látja el a jelentős részben megváltozott feladatokat.

A Műszaki osztály vezetését *Pál Andor* nyugdíjba vonulása után *Magyar József* vette át; jelenleg *Kiss Zoltán* látja el ezt a feladatot.

Személyzeti ügyek

Az Intézet Személyzeti osztályának vezetését, ill. *humánpolitikai* feladatait több éven keresztül *Fekete Béláné*, majd *Király János*, öt követően pedig *Kéri Imréné* látta, illetve látja el.

6. Az Intézet részvétele a kutatók továbbképzésében és a felsőoktatásban

Az MTA kutatóintézeteinek alapvető feladata: *nemzetközi színvonalú tudományos kutatások végzése*. Az Intézet vezetői azonban mindig is hangsúlyozták a felsőoktatásban és a post graduális képzésben való részvétel szükségességét.

A KKKI vezető kutatói közül többen is érkeztek a Szegedi Tudományegyetem kiváló iskoláiból: a nemzetközi hírű Szabó Zoltán professzor által vezetett Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszékről, valamint a Fodor Gábor professzor által irányított Szerves Kémiai Intézetből. Erős hatást gyakoroltak a KKKI-ba került tanítványaikra Csűrös Zoltán, Schay Géza és Zemplén Géza a Budapesti Műszaki Egyetem, továbbá Bruckner Győző, Gerecs Árpád, Erdey-Grúz Tibor, Lengyel Béla, Buzágh Aladár és Müller Sándor az Eötvös Loránd Tudományegyetem nemzetközi hírnevű professzorai is, akik közül többen tagjai voltak az Intézet Tudományos Testületeinek az 50-es, 60-as, 70-es években. Az Intézetben dolgozó tanítványok igyekeztek, hogy szoros kapcsolatokat építsenek ki az alma mater-rel.

A kutatói utánpótlás biztosításának érdekében a KKKI 1971-ben az elsők között vezette be azt a "disszertáns rendszert", amely a végzett diplomások felvételét szigorú felvételi vizsgához kötötte, és folyamatos szakmai, továbbá nyelvi továbbképzést írt elő. A disszertánsok eredményeiről, munkájukról évente beszámoltak az Igazgatóságnak. Ez a rendszer csak az 1980-as évek elejéig működött, mivel a továbbiakban már nem volt elegendő pénz új állások létesítésére.

A 80-as évektől kezdve az Intézet egyre több és több kutatója vezetett fő és speciális kollégiumokat, laboratóriumi gyakorlatokat az egyetemeken, kutatói részt vettek a BME mérnök-továbbképzési programjaiban. Nőtt a diplomamunkát készítő egyetemi hallgatók száma is az Intézetben. Elsősorban a Budapesti Műszaki Egyetemmel, valamint az ELTE-vel jöttek létre szoros kapcsolatok, amelyeket már 1976-ban szerződéssel intézményesítettek. Számos közös publikáció (évente mintegy 30-50) mutatja ma is, hogy nemcsak az oktatás, de a kutatás területén is eredményes az együttműködés. Az 1990-es évek közepén az Intézet megújította szerződéseit a BME-vel és az ELTE-vel, ezáltal intézményesítette együttműködéseit az oktatómunka, a doktoranduszképzés és a kutatás területén. Az Intézet több kutatója tagja lett az egyetemek doktori tanácsainak.

Az Intézet a BME-vel és az ELTE-vel öt *közös kutatólaboratóriumot* hozott létre. Ezek a fizikai kémia, a műanyagkémia, az ESR-kutatások és a neurokémia területén működnek. Igen eredményesek voltak a Veszprémi Vegyipari Egyetemmel létrehozott kapcsolatok is mind az oktatás, mind a közös kutatások területén. Az Intézet kutatói közül számosan (általában 30-40 fő) oktattak és oktatnak egyetemeken. Többen közülük felsőoktatási intézmények habilitált doktori. Az MTA fiatal kutatói programjának és saját anyagi áldozatoknak köszönhetően az 1990-es évek végétől az Intézetben évente átlagban 40 PhD-ösztöndíjas dolgozott. 1997-től kezdődően indította el az Intézet *post doc programját*, amely évente 5-6 tehetséges fiatal kutatónak biztosított további lehetőségeket a tudományos pályán. Mindezekre jelentős összegeket fordítottak.

Az Intézet eredményes iskolateremtő munkáját bizonyítja, hogy pl. a Borsodi Vegyi Kombinát, továbbá az EGIS Gyógyszergyár Rt. kutatási igazgatója, a Béres Rt. és az MTA Növényvédelmi Kutatóintézet igazgatója, valamint számos vállalat vezető szakembere korábban a KKKI-ben dolgozott. De nemcsak hazánk, hanem az USA és Németország több egyetemének professzorai, vállalatának vezető kutatói közül is többen korábban az Intézetben sajátították el a szakma alapjait.

A Kutatóközpont fiatal kutatóinak éves seregszemléje, a *Kálmán Erika* kezdeményezésére létrehozott DOKI SULI rendezvénye, amelyen a doktori (PhD) képzésben résztvevők számolnak be kutatásaikról. Az esemény jól segíti a fiataloknak a Központ életébe történő beilleszkedését, az előadói rutin megszerzését, egymás munkájának megismerését s így a szakmai kooperációk kialakulását.

7. Az Intézet nemzetközi kapcsolatai

A tudományos kutatás – kivéve a hadiipari munkákat – nemzetközi. Ennek ellenére az 50-es években – ismert okok miatt – az Intézetnek csupán a Szovjetunióval és a kelet-európai országokkal lehettek rendszeres tudományos kapcsolatai. Több kutató, akik a Szovjetunióban jártak egyetemre vagy ott készítették kandidátusi disszertációjukat, került az ötvenes évek végén a KKKI-ba. 1956 eseményei a KKKI-t is megrázták. Az Intézet több jeles kutatója külföldre távozott és ott folytatta pályafutását. Így pl. a szerves kémiai kutatásokért felelős igazgatóhelyettes, későbbi kémiai Nobel-díjas Oláh György, valamint Pavláth Attila, akit 2000-ben az American Chemical Society elnökévé választottak. Mindketten az MTA tiszteleti tagjai.

A 60-as években kezdett kiépülni az együttműködés a nyugati országokkal. Többen töltöttek ösztöndíjasként hosszabb időt az USA, Anglia, valamint a Német Szövetségi Köztársaság egyetemén. Az Intézet vállalati szerződéses árbevételekből erőteljesen támogatta a nemzetközi konferenciákon való részvételt. Mindezeknek köszönhetően a tudományos kapcsolatok a 60-as évek végétől rohamosan bővültek. A kutatási együttműködések mind a kelet-európai, mind a nyugati intézetekkel egyaránt intenzívek voltak. A hetvenes évek közepétől pl. az Intézetben működött a szocialista országok oxidációs folyamatok vizsgálatára létesített bázislaboratóriuma Gál Dezső vezetésével. Számos tudományos közlemény került ki erről a kutatóhelyről, amely a tudományos kapcsolatok kiépítésének és folytatásának akkor egyik legjobb lehetősége volt. Sok közös publikációt eredményeztek a gyakori kölcsönös tanulmányutak révén megvalósuló, szocialista országok (Szovjetunió, Csehszlovákia, Lengyelország, Bulgária, NDK, Románia) akadémiai közötti együttműködések is.

Az Intézet kiváló nemzetközi kapcsolatainak is köszönhető, hogy a 80-as, 90-es évek gazdaságilag igen nehéz idején tudományos kutatásai nemzetközi színvonalának megőrzésével, sőt bizonyos fokú emelésével vészelhette át.

Az Intézet igazgatósága mindig is nagy súlyt helyezett arra, hogy kutatói az országot megfelelően képviseljék a különböző nemzetközi tudományos fórumokon. Számos nemzetközi szervezetben töltenek be vezető pozíciókat az Intézet munkatársai. Így pl. a következőkben: International Society of Electrochemistry; International Committee on Natural Zeolites; European Molecular Liquide Society; International Society for the Study of Xenobiotics; IUPAC Commission on Chemical Kinetics; IUPAC Task Group on Selected Free Radicals and Critical Intermediates; European Society for Photobiology; European Federation of Corrosion; European Society for Mass Spectrometry; Combustion Institute; POLYCHAR World Forum on Polymer Application and Theory; International Union of Crystallography; International Society of Heterocyclic Chemistry; International Corrosion Council; International Geothermal Association; European Federation of Catalysis Societies; több más IUPAC és COST Bizottság stb. Jelenleg nemzetközi tudományos társaság vezetőségének tagja, ill. tisztségviselője 14 kutató, akik összesen 24 tisztséget töltenek be.

A 80-as évektől kezdődően a KKKI kutatói mintegy 50-60 együttműködési témán dolgoztak külföldi kollégákkal közösen. Számos közösen megjelentetett publikációt eredményeztek például az *oldatszerkezetkutatás* területén a mainz-i Max Planck Intézettel (Németország), a Kaliforniai Egyetemmel (USA) és japán kutatókkal; a *makromolekuláris* kémiában az Akroni Egyetemmel (USA); a *spektroszkópia* területén a Rudjer Bosković Intézettel (Zágráb, Horvátország), a Bolgár Tudományos Akadémia Szerves Kémiai Intézetével; *zeolitkutatásokban* a belgiumi (Leuven) Katolikus Egyetemmel és az Edinburghi Egyetemmel (UK); az *olefinek metatézisének vizsgálata* c. témában a Millwaukee Egyetemmel (USA); a *kémiai szerkezetvizsgálatok és a természetes vegyületek szintézise* témákban a CNRS Természetes Szerves Anyagok Intézetével (Gif-sur-Yvette, Franciaország);

a heterociklusos vegyületek kutatásában az Innsbrucki Egyetemmel (Ausztria); az elméleti kémiában a North Western Egyetemmel (USA); a kinetika és katalíziskutatásban a CNRS Molekuláris Anyagok Laboratóriumával (Thiais, Franciaország) és a Kémiai Fizikai Intézettel (Moszkva, Oroszország); a fémorganikus kémiai kutatások területén a Texasi Egyetemmel (USA); a koronaéter kutatásokban a Regensburg-i Egyetemmel; a korróziós kutatásokban és a nanotudományok területén a belgiumi (Leuven) Katolikus Egyetemmel, a Párizsi Egyetemmel (Franciaország), a Hamburgi Egyetemmel (Németország); az elemi és az atmoszférában lejátszódó reakciók kutatásában a Lillei Tudományos és Műszaki Egyetemmel (Franciaország) folytatott együttműködések.

A KKKI-nek a nemzetközi tudományban betöltött jelentős szerepét igazolja, hogy összes közleményeinek 40-60 %-a nemzetközi kooperációban jelent és jelenik meg.

A tanulmányutakra és konferenciákra történő kiutazások évenkénti száma (250-300) mindig meghaladta a kutatók számát. Érdekes megjegyezni, hogy korábban hozzávetőleg ugyanennyi vendég érkezett külföldről, ami a kapcsolatok kölcsönösségét mutatta. A 90-es évektől kezdődően a kelet-európai országokból érkező kutatók, ill. az oda történő utazások száma drámaian lecsökkent. Ezt elsősorban a pénzügyi nehézségek okozták. A külföldi vendégek száma jelenleg évente mintegy 150. Jellemző adat, hogy 1986-ban mindössze 8 fiatal kutató dolgozott egy évet meghaladóan külföldön – elsősorban az USA-ban – 1990-re ez a szám 19-re nőtt. Az Intézet szakmai presztízsét jellemzi, hogy számos kutatóját kéri fel plenáris előadások tartására nemzetközi konferenciákon és hívnak meg ilyen céllal egyetemekre, intézetekbe.

A 90-es évek elejétől az Intézet egyre gyakrabban szerepel a nemzetközi tudományos és kutatási alapítványok pályázatain. Évente mintegy 3-4 új, nemzetközi projektnek voltak résztvevői az Intézet kutatói (pl. a COST, PHARE, INCO-COPERNICUS, EU-4, EU-5 Framework, ACCORD stb. programokban).

E projektek jelentőségét az Intézet szempontjából a következőkben foglalhatjuk össze:

- korszerű, az európai trendekhez illeszkedő kutatásokat indítanak el, ill. szélesítene ki,
- élénkítik és erősítik a nemzetközi tudományos együttműködést,
- segítségükkel az Intézet témái beépülnek az európai kutatási térség tematikájába,
- hozzájárulnak a fiatal kutatók szakmai fejlődéséhez,
- jelentős anyagi támogatást adnak a résztvevőknek.

A következőkben néhány fontosabb 1998-2002 között indult nemzetközi projekt címe és témafelelősének neve olvasható:

A projekt címe	Intézeti témafelelős
Center of Excellence on Biomolecular Chemistry Hungarian Network of Excellent Centers on Nanosciences Threat to European maize production by the invasive quarantine pest. Western corn root worm (<i>Diabrotica virgifera virgifera</i>): a new sustainable crop management approach	Hajós György Kálmán Erika Jablonkai István
Reversal of antibiotic resistance Heparanase inhibitors against cancer metastasis UTP and Ca ²⁺ ion homeostasis. Nucleotides as a novel class of signalling substances in the nervous system Calcium and NO: effects on metabolic activity and nerve cell injury in epilepsy	Hajós György Fügedi Péter Kardos Julianna Kardos Julianna, Kovács Richárd
INCO strategic action on training and excellence Metalloenzymes and chemical biomimetics. Biomimetic catalytic activation of dioxygen species (O ₂ , H ₂ O ₂ and superoxide ion) by metalloenzymes and models	Kardos Julianna Simándi László
Stereochemical effects on self-assembly and switching at the nanometer scale	Kálmán Erika
Expanding the durability of stainless steels in water systems under microbiological corrosion conditions	Kálmán Erika
Research on nanostructured coatings Carbon nanotubes for future industrial composites: theoretical potential versus immediate application (CNT-Net)	Kálmán Erika Kálmán Erika
Enrichment of oxygen in lean gases for the application in block type thermal power units	Valyon József
Upgrade kit for improving treatment efficiency and capacity of new and existing waste water treatment systems (ZeoReactor)	Valyon József
O ₂ enrichment for bio-membrane reactors for improving treatment efficiency and capacity of new and existing waste water treatment systems	Valyon József
Structure-activity relationships for reactions in the degradation of biogenic volatile organic compounds Atmospheric fate of carbonyl radicals Reduction of tropospheric ozone formation in Europe by the employment of alternative industrial solvents	Dóbbé Sándor Dóbbé Sándor Dóbbé Sándor
Development and applications of theoretical models on catalysis to support the design of improved catalysts	Pápai Imre
Accurate calculations of detailed reactive properties of polyatomic molecules	Lendvay György

Külön kiemelendő a biomolekuláris kémiai tudományterület kutatói által benyújtott pályázat, amelynek révén 2002-ben az Intézet *Európai Biomolekuláris Kiválósági Központ* címet és jelentős mértékű támogatást nyert el. Hasonlóképpen, a *Nanoszerkezetű Anyagok Kutatásában* is megkapta az Intézet az említett kitüntető címet.

Az Intézet jelenlegi igen jó nemzetközi kapcsolataira jellemző, hogy pl. 2003-ban a következő nemzetközi rendezvényeket szervezte meg, ill. vett részt a szervezésben:

- Eurocorr 2003, Budapest,
- 28. International Conference on Solution Chemistry (Debrecen) (a Debreceni Egyetemmel közösen),
- Advances in Chromatography and Electrophoresis – Conferentia Chemometrica, 2003 (a Szegedi Tudományegyetemmel közösen),
- Osztrák-Magyar Szénhidrát Konferencia (a Grazi Műszaki Egyetemmel),
- NATO Advanced Research Workshop on the Theory of the Dynamics of Elementary Chemical Reactions.

A Center of Excellence on Biomolecular Chemistry projekt keretében:

- Bioorganic Chemistry Meeting,
- Epilepsy Workshop,
- Modern Synthetic Methodologies in Heterocyclic Chemistry.

Megemlítendő, hogy az Intézet rendszeres szervezője az „Informal Meeting of Mass Spectroscopy” és a „Blue Danube Symposium on Heterocyclic Chemistry” konferenciáknak.

A legutóbbi évtizedben megfigyelhető, hogy az Intézet igyekszik egyre aktívabban részt venni külföldi székhelyű gyógyszeripari és vegyipari vállalatok fejlesztési problémáinak megoldásában. Mind szakmai, mind pénzügyi vonatkozásokat tekintve különösen jelentősek voltak, ill. részben még ma is élnek a következőkben felsorolt vállalatokhoz fűződő kapcsolatok: Höchst AG, Fluntera AG (Németország), Clariant GmbH (Franciaország, Svájc, Németország), Air Products Co. (US), W. R. Grace Co. (US), General Electric Co. (US), DuPont Co. (US) Borealis Ltd. (Ausztria), Sigma-Aldrich Co. (UK), Shell Co. (Hollandia), stb.

Az Intézetben dolgozó kutatók szakmai elismertségét jól jellemzi, hogy jelenleg 15-en tevékenykednek 21 nemzetközi folyóirat szerkesztőbizottságában, közülük hárman szerkesztőként, ill. főszerkesztőként. (Így pl. a következő folyóiratoknál: Heterocyclic Communication, Arkivoc, Acta Chromatographica, Reviews in Analytical Chemistry, Journal of Macromolecular Science – Pure and Applied Chemistry, Journal of Coordination Chemistry, Corrosion Reviews, Vibrational Spectroscopy, Polymers & Polymer Composites, Reaction Kinetics and Catalysis Letters, Enantiomer, European Journal of Drug Metabolism and Pharmacokinetics, Drug Metabolism Reviews, Journal of Mass Spectrometry, Mass Spectrometry Reviews, Photochemical & Photobiological Sciences.)

Az Intézetet az elmúlt ötven év alatt számos világhírű tudós, valamint több nemzetközi tudományos szervezet tisztségviselője is felkereste. Közülük itt csak a Nobel-díjasok nevét soroljuk fel: A. Butenandt, M. Perutz, D.C. Hodgkin, D.H.R. Barton, J. Karle, J.M. Lehn, H. Hauptman, G. Oláh, H. KROTO.

2000-ben alakult meg az MTA Kémiai Kutatóközpont Nemzetközi Tudományos Tanácsadó Testülete, amelynek tagjai nemzetközileg kiemelkedő jelentőségű tudósok.

Elnök:

Gabor Somorjai

Professor of Chemistry, University of California, Berkeley and Program Director of Surface Science and Catalysis in the Materials Science Division of the Lawrence Berkeley National Laboratory

Tagok:

Povl Krogsgaard-Larsen

Professor of Chemistry, Royal Danish School of Medicine, Denmark

Istvan Markó

Professor of Organic Chemistry, The Catholic University of Louvain, Belgium

Dr. Jule Rabo

Consultant to UOP and Union Carbide in the fields of catalysis, science and technology, USA

Peter Stang

Professor of Organic Chemistry, University of Utah, USA

Sandor Suhai

Professor of Molecular Bioinformation and Molecular Biosciences, University of Heidelberg, Germany

A testület évente ülészik. Az ülészakon a Központ kutatói beszámolnak legújabb eredményeikről. A testület a különböző, rendelkezésére bocsátott dokumentumok és a személyes tapasztalatok alapján értékeli az eredményeket, továbbá ajánlásokat fogalmaz meg a kutatási tematika súlyponti feladatainak kijelölésére.

A KKKI – folytatva hagyományait, immár a Kémiai Kutatóközpont keretében – továbbra is regionális központ kíván maradni a kémia tudományában és számottevő résztvevő a nemzetközi tudományos életben.

8. A tudományos kutatások finanszírozása és a kutatási eredmények ipari alkalmazása

A KKKI alapításakor a hangsúlyt a tudományos alap kutatásokra helyezték. Nyilvánvaló, hogy az alap kutatások finanszírozása meghatározó részben állami feladat. A hatvanas évek közepéig az állam szerény mértékű, de kelet-európai viszonylatban elegendő mennyiségű pénzt tudott az akadémiai kutatások támogatására fordítani. Akkor azonban egyértelművé vált, hogy a nemzetközi szintű kutatómunkához ezek a források nem megfelelőek, s a költségvetés nem képes több támogatást adni. Fokozottan jelentkezett ez a KKKI-nél, ahol az új, laboratóriumi épületek átadásával erőteljesen nőtt a kutatók száma. Az 1968-ban megjelent Tudománypolitikai Irányelvek a kutatási eredmények gyakorlati hasznosítását – s ezzel a vállalati források nagyobb mértékű bevonását – szorgalmazták.

2. táblázat

Az MTA Központi Kémiai Kutatóintézet működési összbevételei és a források százalékos megoszlása néhány kiválasztott évben

Év	A bevételek százalékos aránya					Bevételek összesen (M Ft)
	MTA támogatás	OTKA szerződések	Minisztériumi és OMFB szerződések	Vállalati szerződések	Külföldi pályázatok	
1954	100,0	-	-	-	-	1,298
1959	100,0	-	-	-	-	7,867
1964	94,2	-	-	5,8	-	30,221
1975	60,1	-	-	39,9	-	54,846
1981	45,6	-	4,6	49,6	-	118,445
1986	29,9	8,3	9,1	45,6	-	195,388
1991	36,1	9,9	3,2	50,7	-	418,116
1995	42,2	7,5	6,8	32,9	8,9	612,037
2002	55,0	5,2	14,6	15,7	1,4	1542,750

Megjegyzés: a 2002. évi adatok a Központ Kémiai Intézetére vonatkoznak.

A 2. táblázatból kitűnik, hogy az Intézet a 60-as évek közepétől kezdett aktívan részt vállalni az ipar és a mezőgazdaság részére végzett K+F-tevékenységből. Akkortájt – a fejlesztési alap kötelezően előírt képzése, valamint az extenzív vegyipari fejlesztések miatt, viszonylag könnyen lehetett vállalati árbevételekhez jutni. Ezt a lehetőséget az Intézet ki is aknáztta, ami jól nyomon követhető a szerződéses megbízások bevételeinek növekvő arányai révén. A nagy gyógyszergyárakkal (EGIS, Chinoin, Richter G.) több évre szóló keretszerződéseket sikerült kötniük, ami hosszú távon biztos háttérrel nyújtott. A gyógyszergyárak kutatóival igen jó kooperációk, közös kutatócsoportok alakultak ki, amelyek eredményesen dolgoztak. Számos új, magyar gyógyszerkészítmény kidolgozásához járultak hozzá a KKKI kutatói. A vegyipar más vállalataival (Tiszai Vegyiművek, Borsodi Vegyi Kombinát, Fűzfői Nitrokémia Ipartelepek, Reanal stb.) is igen hasznos szakmai együttműködések folytak.

A 70-es 80-as években néhány vegyipari, gyógyszeripari termék kidolgozása szinte teljes egészében a KKKI-ben történt, részben saját kezdeményezésű kutatásokra építve.

A 80-as évek végétől igen nehezzé vált az Intézet anyagi helyzete. A vállalatok magánosításával a 90-es években tovább csökkentek az ipari K+F-ben való részvételi lehetőségek. A kieső bevételeket részben a létszám leépítésével – ami később az MTA konszolidációs programjához illeszkedett – részben külföldi vállalatoktól szerzett megbízások, részben pedig a hazai és külföldi pályázatok kihasználása révén igyekezett az Intézet pótolni.

A 90-es évek végétől 2002-ig a hazai (pl. Széchenyi-program) és a külföldi (EU) pályázatok, valamint a költségvetési támogatás növekedése lehetővé tette a kutatás működési feltételeinek és az infrastruktúrának jelentős mértékű javítását, amit a 2. táblázatban lévő adatok és a 3. fejezetben olvasható műszerbeszerzések is alátámasztanak.

A költségvetési támogatások csökkentése 2003-ban és 2004-ben a szépen megindult kutatóközponti témakorszerűsítési és műszerbeszerzési törekvéseket lefékezte. Az országos K+F-politika koncepciótlansága, a költségvetési és a pályázati támogatások bizonytalansága, a már odaítélt költségvetésből történő elvonások, a pályázati feladatok teljesítése után járó összegek nehézkes kifizetése és általában a finanszírozás bürokratikus nehézségei a kutatóintézetek gazdálkodását oly nehezzé teszik, hogy az a tudományos kutatások mértékét csökkenti, színvonalát rontja. A stratégiai tudományos kutatásokat végző természettudományi MTA-intézetek alapellátásának (beleértve a bérek és járulékaik, továbbá a rezsiköltségek kifizetését) a teljes intézeti költségvetés 75-80%-át kellene elérnie ahhoz, hogy feladataikat megfelelően elláthassák. Ennek a részhányadnak az odaítélését pedig hosszú távra is biztosítani kellene.

Az Intézet a 70-es és a 80-as években évente mintegy 10-20 *saját tulajdonú* szabadalmat jelentett be Magyarországon. Ez a szám fokozatosan csökkent a 90-es években. Jelenleg csupán 1-2 bejelentés születik évente. A csökkenés oka részben az, hogy kevesebb a vállalati szerződés, részben a megbízók ragaszkodása a szerződéses kutatások eredményeként létrejövő szellemi tulajdon kizárólagos birtoklásához.

A KKKI-ben létrehozott szellemi termékek jelentős hasznot eredményeztek mind az iparban, mind a mezőgazdaságban. Példaként csak néhány eredményt említünk meg.

Termékelőállítás

- *Növényvédőszer-antidotumok kidolgozása*
A *kukorica növényvédelmében* kiválóan hasznosítható, a megfelelő gyomirtó szer antidotumaként ható, MG-191 számú vegyület szabadalmát a MONSANTO Co. (USA) vásárolta meg.
- *Zeoflocc szennyvíztisztító eljárás*
A zeolittartalmú kőzetekből nyert töltettel működő, *szennyvizek tisztítására* kidolgozott ZEOFLOCC eljárást Ausztriában, Svájcban, Svédországban, Németországban és Ausztráliában is alkalmazzák.
- *Gázolajok katalitikus paraffinmentesítésére szolgáló eljárás és motorhajtó anyagok előállításához szükséges katalizátoradalekok kidolgozása*
Zeolitok katalitikus hatásának vizsgálati eredményeire építve, sikerült megoldaniuk az alacsony dermedéspontú gázolajok kedvező hozammal történő előállítását.
A MOL Rt.-nél egy 300000 t/év teljesítményű üzemben 1993 óta folyamatosan gyártják a kutatócsoport által kidolgozott krakk-katalizátor adalekok segítségével nyerhető termékeket.

- *Korróziós inhibitorok előállítása*
A vegyületek elektronszerkezete és korróziós inhibitor képessége közötti kapcsolatok feltárására irányuló kutatásaik korábban olyan vízkezelőszerek kifejlesztésére vezettek, amelyek hatékonyan meggátolják ipari hűtő- és fűtővízkörök korróziós folyamatait. Újabban a biokorrózió megakadályozására és a termálvizek hasznosítását (gyógyászat, fűtés, szárítás) gátló korróziós problémák megoldására dolgoztak ki kezelési eljárásokat az Intézet kutatói. A terméket a Chemobil Kft. forgalmazza mintegy 20 hazai és néhány külföldi vállalat részére.
Az alkalmazáshoz szükséges vízanalitikai eljárásokat az Intézet fejlesztette ki és végzi jelenleg is.
- *Herpesvírus-ellenes kenőcskészítmény kidolgozása*
A HEVIZOS márkanévű, Herpesvírus elleni kenőcskészítményt a nukleozidok szerkezete és fiziológiai hatása közötti összefüggések feltárása eredményeként dolgozták ki az Intézet kutatói. A készítmény hatóanyagát az Intézet résztulajdonában lévő ERCOM Kft. gyártja, a gyógyszert a Biogal Gyógyszergyár Rt. forgalmazza 1986 óta mind Magyarországon, mind külföldön.
- *FERROCOMP márkanévű, vérszegénység elleni, gyógyhatású készítmény kidolgozása*
Természetes hordozóhoz (pektinhez) kötve tartalmazza a vasat és az ennek hasznosulásához szükséges mikroelemeket, vitaminokat. Alkalmazásának nincsenek mellékhatásai. A készítmény forgalmazásához szükséges analitikai méréseket az Intézet végzi.
A tablettát az In Vitro Kft. forgalmazza 1996 óta.

Szolgáltatások

- *Gyógyszerek, gyógyszerjelöltek kémiai szerkezetvizsgálata és farmako-biokémiai hatásvizsgálata*
A KKKI nagyműszeres kutatócsoportjai számos, a gyógyszerfejlesztésben jelentős molekula szerkezetét vizsgálták és vizsgálják rendszeresen a hazai gyógyszergyárak (EGIS, Chinoin, Richter, Biogal) részére. Az anyagok farmako-biokémiai hatását, hatásmechanizmusát a MediChem NKFP-keretében tanulmányozzák. Ezek a munkák jelentősen elősegítik az új gyógyszer-molekulák piacra kerülését. A 70-es 80-as években a magyar gyógyszervállalatok által forgalomba hozott új hatóanyagok csaknem mindegyikének kidolgozásában részt vettek az Intézet kutatói.
- *Vízanalitikai vizsgálatok*
1998-ban az Intézet egy komplex környezetvédelmi és korrózióvédelmi laboratóriumot hozott létre, amelyet 2001-ben akkreditáltak. Az akkreditált laboratórium rendszeresen végez analíziseket különböző hazai iparvállalatok részére.

Az említett, ill. további megvalósított szabadalmak, know-how-k révén előállított termékek becsült forgalma éves szinten átlagosan mintegy 1,5 milliárd Ft. Az Intézet a kutatási szerződések keretében kidolgozott és a vállalatok által bejelentett szellemi tulajdon védelme alá tartozó termékek, eljárások létrehozatalában is fontos szerepet játszik, bár ez jelenleg már csak 1-2 szabadalmat jelent évente.

9. Az Intézet kutatási tevékenységének értékelése

Az MTA KKKI igazgatóságának *szervezetirányítási politikája* mindig is a tudományos értékeknek igyekezett prioritást adni. Ezt szolgálta az 1977-ben bevezetett Intézeti Működési Rend is. Az említett irányítási rendszernek legfontosabb kezdeményezése az volt, hogy a tudományos szervezeti egységeket a kutatások eredményeit felmutató publikációk számának, a megjelenés helyének, valamint a közlemények visszhangjának (az idézeteknek) a figyelembevételével értékelje, és az akadémiai támogatás egy jelentős részét az említettek alapján ossza szét. A támogatási rendszer számos változtatáson ment keresztül, így pl. a 90-es években a tudományos minősítések számának is fontos szerepe lett. A Működési Rendnek is köszönhető, hogy a kutatók publikációs stratégiája jelentős mértékben javult az évek folyamán. Ez azt jelenti, hogy eredményeiket egyre többen az illető szakterület legjobb folyóirataiban igyekeznek megjelentetni. 2002-ben világossá vált, hogy a gazdasági helyzet romlása, a Kutatóközpont szervezeti átalakítása, új csoportok létrejötte miatt a Működési Rend eredeti formájában már nem érvényesíthető. A publikációkról és az idézetekről azonban továbbra is kimutatás készül osztályonként, amit az igazgatóság az éves beszámoltatások alkalmával értékel.

A tudományos kutatás információelőállító tevékenység. A természettudományi információk mintegy 70-80 %-ban folyóiratcikkekben jelennek meg, az információk kisebb hányadát könyvfejezetekben, konferenciakiadványokban, könyvekben hozzák nyilvánosságra.

Az Intézet mindig kiemelten, fontosságának megfelelően kezelte a publikálás ügyét. A 3. táblázat csak olyan tudományos közleményeket tartalmaz, amelyeket lektoráltak, és amelyeket tudományos kiadással foglalkozó, ismert kiadó jelentetett meg. Nem szerepelnek az adatok között tehát a konferenciaelőadások rövid összefoglalói s a nem kifejezetten tudományos művek. Az Intézetben Publikációs Bizottság működik, amely kétséges esetekben dönt a dokumentumnak az adattárba való felvételéről.

A KKKI tudományos eredményeinek 87-90 %-a folyóiratokban kapott nyilvánosságot (lásd a 3. táblázatot). Korábban a cikkek 66-80 %-a, 1982-től viszont 80-92 %-a idegen nyelven jelenik meg. Az idegen nyelvű cikkek jelentős részét (50-80 %-át) az *Acta Chimica Hungarica*-ban közölték 1982. előtt. Ennek oka az volt, hogy az Akadémia a magyar kiadású (bár angol nyelvű) folyóiratokban való közlést erőteljesen szorgalmazta. Később ez a részesedés alig néhány százaléknnyira esett vissza. A 90-es évektől a szakmailag legjelentősebbnek számító folyóiratok (amelyeket a Science Citation Index is referál) a KKKI cikkeit publikáló periodikáknak mintegy 85-90 %-át teszik ki. A szakmai nyelv ápolása, a tudomány újabb eredményeihez való széles körű hozzájárás lehetősége szükségessé teszi azonban a magyar nyelven történő publikálást is.

A tudományos információtermelés produktivitását az összes publikáció kutatónkénti számával mérhetjük. Ez az adat a kezdeti néhány éves felfutó időszakot követően 1,20-1,60 között ingadozik, ami igen kedvező, különösen ha figyelembe vesszük, hogy az összes kutató száma: 100-200 közötti volt.

Megjegyzendő, hogy az Intézet kutatói számos tudományos ismeretterjesztő publikációt jelentettek meg a *Természet Világa*, az *Élet és Tudomány* és a *Magyar Tudomány* c. kiadványokban.

Az MTA Központi Kémiai Kutatóintézetében született tudományos publikációk száma
néhány kiválasztott évben

Év	Összes tudományos publikáció száma	Folyóiratcikkek összesen	Folyóiratcikkek		Könyvek, könyvfejezetek, konferencia-kiadványok	Kutatók száma	Összes publikáció kutatónként
			idegen nyelven	magyar nyelven			
1958	30	29	23	6	1	41	0,73
1962	53	48	35	13	5	54	0,98
1966	102	83	56	27	19	77	1,32
1976	219	210	140	60	9	171	1,28
1982	245	218	175	43	27	204	1,20
1986	217	196	174	22	21	212	1,02
1991	248	217	195	22	33	189	1,31
1996	252	219	201	18	33	159	1,58
2002	251	226	202	24	25	170	1,48

Megjegyzés: A publikációk száma mindig az adott évben megjelentekre vonatkozik. A 2002. évben megjelent közlemények a Kémiai Kutatóközpont Kémiai Intézetének adatai.

A közölt tudományos információnak a nemzetközi tudományra gyakorolt hatását többféleképpen is számba vehetjük.

A KKKI és a Kémiai Kutatóközpont kutatói több jelentős, nemzetközi tudományos testületben viselnek különböző tisztségeket (lásd a 7. fejezetet); évente 8-10 alkalommal kérnek fel vezető kutatókat meghívott, ill. plenáris előadások tartására. Számos kutató tartott, ill. tart felkérésre rövidebb-hosszabb kurzusokat külföldi egyetemeken. Gyakran jönnek a Kutatóközpontba neves külföldi kutatók, akikkel igen sok, részben egyezményben is rögzített, tudományos együttműködés jön létre. Időről-időre meghívják a Kutatóközpontból egy-egy, az ipar számára érdekes témában fontos eredményeket elért kutatót (így pl. petrokémiai, szerves vegyipari, gyógyszeripari témákban) nagy iparvállalatokhoz előadás tartása céljából.

A tudománypolitikusok és az adott témában nem szakértők számára a publikált tudományos eredmények nemzetközi hatása a legátláthatóbb, ha az *idézetek* összes vagy kutatónkénti, ill. cikkenkénti számát állapítjuk meg. Az alkalmazott időtartamoktól függően – az idézetek számára vonatkozóan – számos mutatót adhatunk meg. Így pl. a KKKI 1992-1994. évek közötti kutatónkénti átlagos idézettsége: 7,22 idézet/kutató/év, a korábbi 10 évben megjelent cikkekre vonatkozóan, míg 1991-1993 között évente átlagosan 1160 idézet érkezett az Intézet korábbi tíz évben megjelent publikációira; az 1976-1983 között publikált cikkekre 1983-ban 781 idézetet regisztráltak (4,11 idézet/kutató); az 1996-ban publikált folyóiratcikkekre 1234 idézet érkezett 1996-2002 között (7,50 idézet/kutató; 5,63 idézet/cikk). (Az adatok természetesen csak a független, nem a szerzők saját publikációira vonatkoznak.)

Az idézeteknek az előzőekben bemutatott viszonylag nagy abszolút és relatív száma is azt igazolja, hogy a kutatóhely eredményeit ismerik és alkalmazzák a világ hasonló területeken dolgozó kutatói.

A kutatóintézetnek a hazai tudományos életben játszott fontos szerepét jól mutatja, hogy átlagban 40-50-en dolgoztak, ill. dolgoznak az MTA különböző munkabizottságaiban, 10-15-en pedig különböző tudományos bizottságaiban, valamint kutatásirányító szervezeteiben (Akadémiai Kutatóhelyek Tanácsa, Matematikai és Természettudományi

Kuratórium stb.). Többen egyéb hazai tudományos és szakmai egyesületek életében is tevékeny részt vállaltak (így pl. Magyar Kémikusok Egyesülete és annak különböző szakosztályai, MTE Sz, Magyar Mérnöki Kamara Vegyész-mérnöki Tagozat, Országos Tudományos Kutatási Alapprogramok különböző bizottságai, Magyar Akkreditációs Bizottság).

Érdemes megemlíteni, hogy az Intézetben a belső szakmai fórumok (korábban Intézeti Tudományos Bizottságok, majd Szakmai Tudományos Testületek (SzTT) igen sikeresen működtek tudományterületenként (szerves és bioorganikus kémia, fizikai kémia (kinetika és katalízis), kémiai szerkezetkutatás, makromolekuláris kémia). Az üléseken időről-időre minden kutató köteles volt beszámolni munkájáról. A disszertációk házi védését is ezeken a fórumokon tartották meg. A szakmai vitákban rendszeresen részt vettek az egyetemi kutatók és a gyógyszergyári, vegyipari szakemberek is.

Jelenleg az Intézet belső tudományos életében meghatározó az 1995 óta évente megrendezésre kerülő Kutatóközponti (korábban: Intézeti) Tudományos Napok rendezvénye. A kétnapos ülészakon 25-30 előadás hangzik el. Az előadások jó áttekintését adják a legújabb tudományos eredményeknek. Az előadottakat és a vitát egy külön zsűri (melynek tagjai nagy részben egyetemi professzorok) értékeli. A díjazottak kutatásai jelentős anyagi támogatásban részesülnek.

A Kémiai Kutatóközpont Igazgatótanácsa 2002-ben egy „*Pro Arte Chemica*” elnevezésű díjat alapított. Az érem a Kutatóközpontban, ill. annak jogelőd intézményeiben a kémia tudománya hosszú időn át történő, kiemelkedően eredményes művelésének, ill. az intézmény érdekében kifejtett jelentős hatású tevékenységnek az elismerését fejezi ki. A díjat minden évben egyszer, a Kutatóközponti Tudományos Napok alkalmából adja át a Központ főigazgatója. Eddig a következők kapták meg a rangos elismerést: Beyer Hermann, Bérces Tibor, Gucci László, Holly Sándor, Lakosi László, Márta Ferenc, Ötvös László, Szántay Csaba, Tétényi Pál, Veres Árpád.

1992-ben az MTA felkérésére az International Council of Scientific Unions (ICSU) által kiküldött bizottság vizsgálta felül az Intézet tevékenységét. A Bizottság a következő személyekből állt: P. Müller, University of Geneva, Svájc, C. N. R. Rao, Indian Institute of Science, Bangalore, India, J. F. G. Vliegthart, University of Utrecht, Hollandia.

A bizottság jelentése megállapítja:

„Az Intézetben folytatott kutatások átlagos színvonala igen jó. A legtöbb csoport nemzetközileg jegyzett folyóiratokban publikál, és az idézettségi hatás mutatószáma is magas.”

„A Kutatóközpontban sok produktív, tehetséges és nemzetközileg elismert kutató érdekes problémákon dolgozik.”

A jelentés megemlíti, hogy az Intézet több vezető kutatója egyetemeken is tanít. Ez mind az országnak, mind az illető egyetemnek, mind a kutatóhelynek előnyös. Az ipari megbízások segítették az Intézet költségvetését. Célszerű azonban, hogy a szerződéses munkák és a tudományos kutatások közötti egyensúlyt továbbra is biztosítsák. Ennek érdekében szükség lenne egy hosszútávú, nemzeti kutatási programra.

Jelentésüket végül így fejezik be:

„Arra a következtetésre jutottunk, hogy a Központ egésze valóban jó teljesítményt nyújtott.”

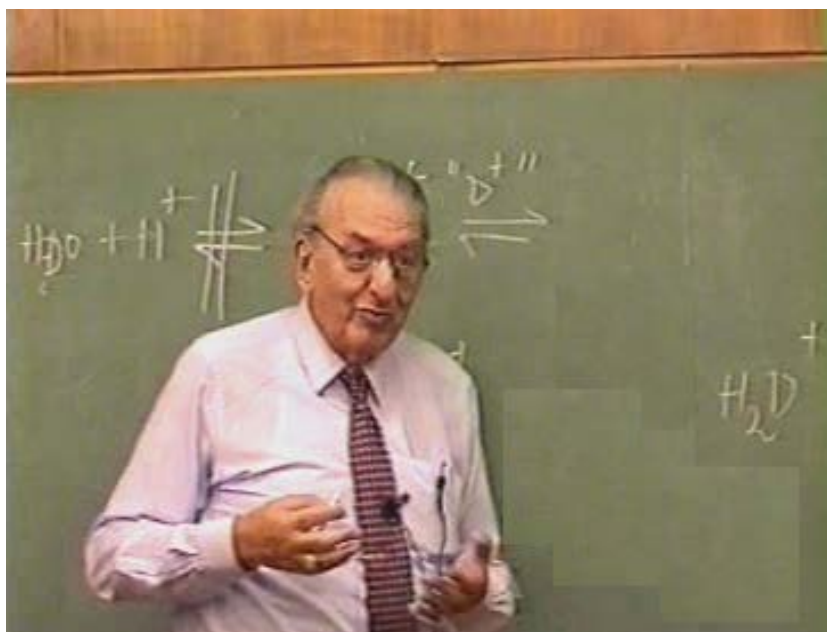
A Kutatóközpont Nemzetközi Tudományos Tanácsadó Testületének 2003. évi jelentésében a következőket olvashatjuk: "Magyarországnak kiváló tudósai vannak és az MTA intézetei, beleértve a Kémiai Kutatóközpontot, nemzeti értékek. Ezek az intézetek jelentősen hozzájárulhatnak ahhoz, hogy az emberek egészségesebben éljenek és gazdagságot teremtsenek az ország számára ..."

A Testület a továbbiakban megállapítja: "A Kémiai Kutatóközpont átszervezése azzal a céllal történt meg, hogy az ott folyó kémiai kutatások kihasználhassák a Központban meglévő energiákat világszínvonalú teljesítmények elérésére a következő területeken:

- *biotudományok* kémiája – hangsúlyozva a gyógyszertervezést, a gyógyszerek felszívódásával és hasznosulásával kapcsolatos vizsgálatokat, valamint a szervezetbarát anyagok kutatását;
- *nanotudományi* kutatások – kiemelve a katalízist, a bevonatok, a határfelületek, a nanorészecskék és a mikropórusos anyagok vizsgálatát;
- *polimerek* kutatása és *környezetvédelmi* kutatások."

Áttekintve az Intézet 50 évének tevékenységét a kutatóhelynek a hazai és a nemzetközi tudományos, illetve a társadalmi-gazdasági életben betöltött szerepére vonatkozóan, egyet kell értenünk az említett bizottságok és az Intézet tevékenységét a 90-es években felmérő akadémiai különbizottság által megfogalmazott következtetéssel, amely szerint az Intézet nemzetközi mércével mérve is jó teljesítményt nyújt, s fenntartása nemzeti érdek.

„Az MTA Kémiai Kutatóközpont megújult kutatási tematikával és műszeres infrastruktúrával, továbbá a tapasztalt kutatói gárdát jól kiegészítő tehetséges fiatal kutatókkal kezdi meg működésének második 50 évét. Biztosak lehetünk abban, hogy a kutatóhely mind a tudomány, mind az ország társadalmi-gazdasági fejlődéséhez a jövőben is jelentős mértékben hozzá tud majd járulni.”– mondta Pálinkás Gábor főigazgató a KKKI alapításának 50. évfordulója alkalmából megrendezett ünnepi ülésen.



Oláh György, Nobel-díjas kémikus előadást tart a Kutatóközpontban (2001. május 23.).

10. Publikációk jegyzéke (1954-2004)

Könyvek

Bor Gy, *Holly S*: Az Infravörös Spektroszkópia Alapjai, Mérnök Továbbképző Intézet Kiadványa, Tankönyvkiadó, Budapest, 1965, p. 147

Cserhádi T, Valkó K: Chromatographic Determination of Molecular Interactions: Applications in Biochemistry, Chemistry and Biophysics, CRC Press, Boca Raton, 1994, p. 341

Cserhádi T, Forgács E: Chromatography in Food Science and Technology, Technomic Publishing, Lancaster, Pennsylvania, 1999, p. 552

Cserhádi T, Forgács E: Chromatography in Environmental Protection (Vol. 3), Harwood Academic Publishers, Australia, 2001, p. 305

Emanuel NM, *Gál D*: Okiszlennie Etilbenzola, Modelnaja Reakcija, Nauka, Moszkva 1984, p. 436

Emanuel NM, *Gál D*: Modelling of Oxidation Processes, Prototype: The Oxidation of Ethylbenzene, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1986, p. 436

Fábián P, Fodorné-Csányi P, *Horányi Gy*, Nyitrai J: A Kémiai Elnevezés és Helyesírás Alapjai, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1977, p. 333

Fodorné-Csányi P, *Simándi L*: Szervetlen Kémiai Nevezéktan, Magyar Kémikusok Egyesülete, Budapest, 1995, p. 246

Forgács E, Cserhádi T: Molecular Basis of Chromatographic Separation, CRC Press, Boca Raton, 1997, p. 243

Guczi L, *Margitfalvi J*, Schay Z: A szén-monoxid katalitikus aktiválása, In: A Kémia Újabb Eredményei 68. kötet, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1988, p. 180

Hargittai M, Hargittai I: Koordinációs vegyületek gőzfázisú molekulageometriája, In: A Kémia Újabb Eredményei 23. kötet, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1974, p. 284

Holly S, Sohár P: Infravörös Spektroszkópia, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1968, p. 223

Holly S, Sohár P: Absorption Spectra in the Infrared Region. Theoretical and Technical Introduction, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1975, p. 183

Horányi Gy: Elektrokatalízis, In: A Kémia Újabb Eredményei 71. kötet, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1990, p. 179

Kalló D: Katalitikus Eljárások a Környezetvédelemben (egyetemi tankönyv) Veszprémi Egyetem VE 25/2000, Veszprém 1999, p. 162

Kálmán A: Kémiai Krisztallográfia I. (egyetemi jegyzet) (Szerk: Kubovics I, Arató T) ELTE, Budapest, 1981, p. 231

Kántor T, Sohár P, Holly S, Inczédy J: Válogatott Fejezetek a Fizikai Kémiából (egyetemi jegyzet), Tankönyvkiadó, Budapest, 1967, p. 300

Kennedy JP, Iván B: Designed Polymers by Carbocationic Macromolecular Engineering: Theory and Practice, Hanser Publishers, Munich, 1992, p. 240

Ladik J: Some New Results in the Quantum Mechanical Investigation of DNA, Electronic Aspects of Biochemistry (Ed: Pullman B) Academic Press, New York, 1964, p. 203

Ladik J: Kvantumkémia (Felsőfokú szakkönyv), Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1969, p. 410

Ladik J: Quantenbiochemie für Chemiker und Biologen, Enke Verlag, Stuttgart, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1972, p. 252

Láng L, Holly S, Sohár P: Absorption Spectra in the Infrared Region, Vol. 1-5, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1974, p. 520; 1976, p. 318; 1977, p. 319; 1978, p. 317; 1980, p. 318

Mayer I: Fejezetek a Kvantumkémiaiából, Budapesti Műszaki Egyetem Mérnök Továbbképző Intézet, Budapest, 1987, p. 172

Mayer I: Simple Theorems, Proofs and Derivations in Quantum Chemistry, Kluwer Academic, Plenum Publishers, New York, 2003, p. 352

Náray-Szabó I: Szervetlen Kémia II. kötet, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1957, p. 715

Náray-Szabó I: Szervetlen Kémia III. kötet, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1958, p. 588

Náray-Szabó I: Rövid Szervetlen Kémia, Műszaki Kiadó, Budapest, 1960, p. 354

Náray-Szabó I: Anorganische Chemie, Bd. I., Akadémiai Kiadó, Budapest - Akademie Verlag, Berlin, 1960, p. 664

Náray-Szabó I: Anorganische Chemie, Bd. II., Akadémiai Kiadó, Budapest - Akademie Verlag, Berlin, 1962, p. 813

Náray-Szabó I: Anorganische Chemie, Bd. III., Akadémiai Kiadó, Budapest - Akademie Verlag, Berlin, 1963, p. 669

Náray-Szabó I: A Szilikátüvegek Fizikai Tulajdonságai, Akadémiai Kiadó, Budapest 1963, p. 110

Náray-Szabó I, Zsoldos L, Kálmán A: Bevezetés a Röntgendiffrakciós Szerkezetkutatásba, Magyar Kémikus Egyesület, Budapest, 1965, p. 296

Náray-Szabó I: Kristálykémia, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1965, p. 514

Náray-Szabó I: Röntgenanalízis, Mérnök Továbbképző Intézet, Veszprémi Vegyipari Egyetem, Tankönyvkiadó, 1965, p. 64

Náray-Szabó I: Kémia, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1967, p. 1032; 2. kiadás: 1969, p. 1032

Náray-Szabó I: Inorganic Crystal Chemistry, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1969, p. 479

Náray-Szabó I: Neorganicheskaia Kristallohimiia, Nauka, Moskva, 1969, p. 503

Neiman MB, *Gál D:* Primennenie Radioaktivnykh Izotopov v Khimicheskoi Kinetike, Nauka, Moszkva, 1970, p. 239

Neiman MB, *Gál D:* The Kinetic Isotope Method and its Application, Elsevier Science Publishers, Amsterdam és Akadémiai Kiadó, Budapest, 1971, p. 311

Nemes L: A molekulageometria meghatározása forgási spektroszkópiával, In: A Kémia Újabb Eredményei 51. kötet, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1981, p. 256

Neszmélyi A, Radics L: A Magrezonancia Spektroszkópia Alapjai, Tankönyvkiadó, Budapest, 1968, p. 102

Poppe L, Novák L: Selective Biocatalysis. A Synthetic Approach, John Wiley & Sons, New York, 1992, p. 319

Schay G: A Gumi Fizikája, Közoktatásügyi Jegyzetellátó, Budapest, 1952, p. 32

Schay G: A II. Fő Tétel Statisztikus Értelmezése. Gázok Adszorpciójának Statisztikus Vizsgálata, Tankönyvkiadó, Budapest, 1952, p. 31

Schay G: Theoretische Grundlagen der Gaschromatographie, Physikalische-chemische Trenn- und Messmethoden, Band 3, Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin, 1960, p. 275

Schay G: A Gázkromatográfia Alapjai, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1961, p. 270

Simándi LI: Catalytic Activation of Dioxygen by Metal Complexes, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1992, p. 400

Varsányi Gy, Szőke S: Vibrational Spectra of Benzene Derivatives, Academic Press, New York - Akadémiai Kiadó, Budapest, 1969, p. 430

Varsányi Gy: Assignments for Vibrational Spectra of 700 Benzene Derivatives, Vols. I-II, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1973, p. 668

Vilkov LV, Khaikin LS, Nazarenko II, Tarasenko NA, *Hargittai I:* Nitrogén- és Oxigénvegyületek Néhány Sztereo-kémiai Kérdésének Vizsgálata Elektron-diffrakciós Módszerrel. (Oroszul) Szovremennije Problemi Fiziceszkoj Himii, VII. kötet, MGU, Moszkva, 1973, p. 521

Szerkesztett művek

Barnes AJ, *Jalovszky G, Keresztury G, Mink J* (Eds): Molecular Spectroscopy and Molecular Structure (Proceedings of the 23rd European Congress on Molecular Spectroscopy, Balatonfüred, Hungary, 25-30 August 1996), Parts A and B, Special Issue: Journal of Molecular Structure, 408-411, 1997, p. 622

Bergman J, van der Plas HC, *Simonyi M* (Eds): Heterocycles in Bio-Organic Chemistry, Royal Society of Chemistry, London, 1991, p. 239

Beyer HK, Karge HG, Kiricsi I, Nagy JB (Eds): Catalysis by Microporous Materials, Special Issue: Studies in Surface Science and Catalysis 94, 1995, p. 792

Chretien J, *Héberger K* (Eds): Chemometrics 2003: Boosting Chemometrics in Europe, In: Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, Vol. 67 (1) 2003, pp 1-78

Cornides I, Horváth Gy, *Vékey K* (Eds): Advances in Mass Spectrometry, John Wiley & Sons, New York, 1995, p. 645

Dogonadze RR, *Kálmán E, Kornyshev AA, Ulstrup J* (Eds): Studies in Physical and Theoretical Chemistry 38, The Chemical Physics of Solvation, Part A, Theory of Solvation, Elsevier Science Publishers, Amsterdam, 1985

Dogonadze RR, *Kálmán E, Kornyshev AA, Ulstrup J* (Eds): Studies in Physical and Theoretical Chemistry 38, The Chemical Physics of Solvation, Part B, Spectroscopy of Solvation 10, Elsevier Science Publishers, Amsterdam, 1986

Flack HD, *Párkányi L, Simon K* (Eds): Crystallographic Computing, 6 (A Window on Modern Crystallography) International Union of Crystallography - Oxford University Press, 1993, p. 310

Guczi L, *Göbölös S, Pályi G* (Eds): Proceedings of 8th International Symposium on Relations between Homogeneous and Heterogeneous Catalysis, Special Volume: Journal of Molecular Catalysis A: Chemical 107 (1-2) 1996

Hargittai I, *Vidóczy T* (Eds): Combustion Efficiency and Air Quality, Plenum Press, New York, 1995, p. 289

Héberger K (Ed) Advances in Chromatography and Electrophoresis - Conferentia Chemometrica 2003, Budapest, In: Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, Vol. 72 (2) 2004, pp 113-284

Horányi Gy (Ed): Radiotracer Studies of Interfaces, In: Interface Science and Technology, Vol. 3, Elsevier, Amsterdam, 2004, p. 435

Kalló D, Minatchev KhM (Eds): Catalysis on Zeolites, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1988, p. 583

Kalló D, Sherry HS (Eds): Occurrence, Properties and Utilization of Natural Zeolites, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1988, p. 857

Kármán FH, Lorberer A, Pátzay G, Rybach L (Eds): Geothermics, Vol. 32 (4-6) Selected Papers from the European Geothermal Conference 2003, Pergamon, 2003, p. 389

Keresztury G (Ed): Prominent Young Vibrational Spectroscopists - 2004 (Special issue), Vibrational Spectroscopy, Vol. 34 (1) Elsevier Science Publishers, Amsterdam, 2004, p. 186

Kiricsi I, Pál-Borbély G, Nagy JB, Karge HG (Eds): Porous Materials in Environmentally Friendly Processes, (Proceedings of the 1st International FEZA Conference, Eger 1999, Hungary), Special Issue: Studies in Surface Science and Catalysis 125, 1999, p. 824

Laganà A, Lendvay G (Eds): Theory of Chemical Reaction Dynamics, NATO Science Series Vol. 145, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 2004, p. 504

Márta F, Kalló D (Eds): Mechanism of Hydrocarbon Reactions, Akadémiai Kiadó, Budapest, Elsevier Science Publishers, Amsterdam, 1975, p. 812

Mink J, Jalsovszky G, Keresztury G (Eds): Proceedings of XVIIIth International Conference on Raman Spectroscopy, 25-30 August, 2002 Budapest, Hungary, John Wiley & Sons, New York, 2002, p. 959

Mink J, Keresztury G, Kellner R (Eds): Progress in Fourier Transform Spectroscopy, (Proceedings of the 10th International Conference, August 27 - September 1, 1995, Budapest, Hungary), Microchimica Acta Supplement 14, Springer-Verlag, Wien, 1997, p. 838

Nemes L, Kovács I, Mink J (Eds): Advances in Spectroscopy in Hungary, In: Spectrochimica Acta 48A (1) 1992, pp 1-132

Rockenbauer A, Pilbrow JR (Eds): Computer simulations in EPR spectroscopy, In: Molecular Physics Reports, Vol. 26, Institute of Molecular Physics, Polish Academy of Sciences, Poznan, 1999, p. 150

Schubert AP, Vasvári L, Nemes L (Eds): Dynamical Information from Molecular Spectra by Statistical and Related Methods, In: ACH Models in Chemistry, Vol. 134 (5), Akadémiai Kiadó, Budapest, 1997, pp 539-679

Simándi LI (Ed): Dioxygen Activation and Homogeneous Catalytic Oxidation, Studies in Surface Science and Catalysis, 66, Elsevier Science Publishers, Amsterdam, 1991, p. 700

Simándi LI (Ed): Advances in Catalytic Activation of Dioxygen by Metal Complexes (Catalysis by Metal Complexes, Vol. 26), Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 2002, p. 352

Simonyi M (Ed): Problems and Wonders of Chiral Molecules. Akadémiai Kiadó, Budapest, 1990, p. 400

Szabó ZG, Kalló D (Szerk): Kontakt Katalízis, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1966, p. 870

Szabó ZG, Kalló D (Eds): Contact Catalysis, Vol. I. II., Elsevier Science Publishers, Amsterdam, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1976, p. 1020

Ujváry I (Ed): Pest Management Research in Hungary at the Turn of the New Millennium: Evolving with Changes, In: Pest Management Science, Special Issue: Pest Management Research in Hungary, 2003, 59 (4), pp 375-497

van der Plas HC, *Ötvös L, Simonyi M* (Eds): Studies in Organic Chemistry 18, Bio-Organic Heterocycles, Synthetic, Physical Organic and Pharmacological Aspects, Akadémiai Kiadó - Elsevier Science Publishers, Budapest, Amsterdam, 1984, p. 407

van der Plas HC, *Simonyi M, Alderweireldt FC, Lepoivre JA* (Eds): Studies in Organic Chemistry 27, Bio-Organic Heterocycles 1986. Synthesis, Mechanisms and Bioactivity, Elsevier Science Publishers, Amsterdam, 1986, p. 325

Könyvfejezetek

Bérces T, Márta F: Activation energies for metathesis reactions of radicals, In: Chemical Kinetics of Small Organic Radicals II. Correlation and Calculation Methods (Ed: Alfassi ZB) CRC Press, Boca Raton, 1988, pp 75-147

Bérces T: A gyökreakciók sokszínű világa: A reakciók kinetikája és termokémiája, In: Székfoglalók a Magyar Tudományos Akadémián 1995-1998, V. kötet (Szerk: Glatz F) Magyar Tudományos Akadémia, 2000, pp 1-35

Beyer H: Dealumination techniques for zeolites, In: Post Synthesis Modification I. (Molecular Sieves, Science and Technology, Vol. 3) (Eds: Karge HG, Weitkamp J) Springer Verlag, Berlin, 2002, pp 203-255

Billes F, *Jalšovszky Gy*: Többatomos molekulák rezgési spektroszkópiája, In: Molekulaspektroszkópia, 3. (Szerk: Kovács I, Szőke J) Akadémiai Kiadó, Budapest, 1987, pp 196-285

Blaskó G, Kerekes P, Makleit S: Reissert synthesis of isoquinoline and indole alkaloids, In: The Alkaloids, 31, Academic Press, New York, 1987, pp 1-28

Blaskó G, Cordell GA: Recent developments in the chemistry of plant-derived anticancer agents, In: Economic and Medicine Plant Research, Vol. 2, Academic Press, New York, 1988, pp 120-191

Blaskó G, Cordell GA: Proton and carbon-13 NMR assignments of biologically active natural products, In: Studies in Natural Products Chemistry 5. Structure Elucidation (Part B) (Ed: Atta-ur-Rahman) Elsevier Science Publishers, Amsterdam, 1989, pp 3-67

Blaskó G, Cordell GA: Isolation, structure elucidation, and biosynthesis of the bisindole alkaloids of *Catharanthus roseus*, In: The Alkaloids Chemistry and Pharmacology 36, 37 (Eds: Brossi A, Suffnes M) Academic Press, New York, 1989, pp 1-76

Cordell GA, *Blaskó G*: NMR techniques for the structure elucidation and conformational analysis of natural products, In: Natural Products Chemistry III (Eds: Atta-ur-Rahman, Le Quesne PW) Springer Verlag, Berlin, 1988, pp 19-42

Dénes G: Chemical structure and biochemical transformation of pyrimidine derivatives, In: *Studies in Organic Chemistry*, 18, Bio-Organic Heterocycles, Synthetic, Physical Organic and Pharmacological Aspects (Eds: van der Plas HC, Ötvös L, Simonyi M) Elsevier Science Publishers, Amsterdam, 1984, pp 115-140

Dóbe S, Bérces T: Isomerization of radicals, In: *Chemical Kinetics of Small Organic Radicals* (Ed: Alfassi ZB) CRC Press, Boca Raton, 1988, pp 89-128

Erdey-Grúz T, *Horányi Gy*, Szetey Zné: A platinaanódok felületének állapota és az oxigénelektrod kinetikája, In: *A Kémia Újabb Eredményei* 35. kötet, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1977, pp. 171-215

Fejes P: Adszorpció, In: *Kontakt Katalízis* (Szerk: Szabó ZG, Kalló D) Akadémiai Kiadó, Budapest, 1966, pp 141-274

Gács I, Dombi S, Mlinkó S, Dobis E, Vargay Z, Ötvös L: Automatic sample combustion methods for the determination of soft beta emitting isotopes in dual labelled organic compounds and biological materials by liquid scintillation counting, In: *Liquid Scintillation Counting, Recent Applications and Development*, Vol. II, Academic Press, New York, 1980, pp 1-31

Gál D, Paál-Lukács J, Vasvári G: Is modeling of the homogeneous catalytic oxidation of hydrocarbons possible? In: *Fundamental Research in Homogeneous Catalysis, Proceedings, 4th International Symposium on Homogeneous Catalysis*, 1, Gordon and Breach Science Publishers, New York, 1986, pp 119-152

Ganzler K, Warne NW, Hancock WS: Analysis of RDNA-derived proteins and their posttranslational modifications, In: *Capillary Electrophoresis in Analytical Biotechnology* (Ed: Righetti PG) CRC Press, Boca Raton, 1996, pp 185-234

Gero SD, Cleophax J, Dubreuil D, Sire B, Mercier D, Vass G, *Neszmélyi A*: Biology and chemistry of phosphoinositides: past, present and future, In: *Trends in Medicinal Chemistry '88* (Eds: van der Goot H, Domány G, Pallos L, Timmerman H) Elsevier Science Publishers, Amsterdam, 1989, pp 217-238

Hajós Gy: Bicyclic 5-6 systems with one ring junction nitrogen atom: Three extra heteroatoms 3:0, In: *Comprehensive Heterocyclic Chemistry*, Vol. 8 (Chapters 8.15-8.22) (Eds: Katritzky AR, Rees CW, Scriven EFV) Elsevier Science Publishers, Amsterdam, 1996, pp 465-506

Hajós Gy, Riedl Zs: Synthesis and reactivity of linearly fused isoquinolines and isoquinolinium salts with bridge-head nitrogen atom, In: *Targets in Heterocyclic Systems, Chemistry and Properties* (Eds: Attanas A, Spinelli D) Italian Society of Chemistry, Roma, 1999, pp 439-465

Hajós Gy: A heterociklusos vegyületek kémiájának újabb irányai (Gyűrűzárási és gyűrűfelnyílási reakciók), In: *A Kémia Újabb Eredményei* 85. kötet, 2000, pp 7-61

Hajós Gy, Riedl Zs: Azaindolizines with two nitrogen atoms in the five-membered ring, In: Science of Synthesis: Houben-Weyl Methods of Molecular Transformations, Vol. 12 (Ed: Neier R) Georg Thieme Verlag, Stuttgart, 2002, pp 613-678

Hamza A, Mayer I: Novel energy decomposition schemes for intermolecular interactions, In: Recent Research Developments in Quantum Chemistry Vol. 3, Transworld Research Network, Kerala, India, 2002, pp 25-49

Hargittai I: Az elektrondiffrakciós atomtávolság, In: A Kémia Újabb Eredményei 21. kötet, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1974, pp 7-174

Haszpra L, *Szilágyi I*: Roadway tunnel measurements and their applications, In: Urban Air Pollution 2 (Eds: Power H, Moussiopoulos N) Computational Mechanics Publications, Southampton, 1996, pp 185-207

Heinzinger K, *Pálinkás G*: Computer simulation of ion-solvent systems, In: Studies in Physical and Theoretical Chemistry 38, The Chemical Physics of Solvation, Part A, Theory of Solvation (Eds: Dogonadze RR, Kálmán E, Kornyshev A, Ulstrup J) Elsevier Science Publishers, Amsterdam, 1985, pp 313-353

Heinzinger K, *Pálinkás G*: Interactions of water in ionic hydrates, In: Interactions of Water in Ionic and Non-ionic Hydrates (Ed: Kleeberg K) Springer, Berlin-Heidelberg, 1987, pp 1-22

Héberger K: Discrimination between linear and non-linear models describing retention data of alkylbenzenes in CGC, In: Tenth International Symposium on Capillary Chromatography 1 (Eds: Sandra P, Redant G) Huethig, Belgium, 1989, pp 121-150

Héberger K, Rajkó R, Kolossváry I: Modellépítés a regressziós számítások során, korrelált változók esetén, In: Sokváltozós Adatelemzés (Kemometria) (Szerk: Horvai Gy) Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, 2001, pp 177-214

Héberger K, Rajkó R: Faktoranalízis, főkomponens-elemzés és változataik, In: Sokváltozós Adatelemzés (Kemometria) (Szerk: Horvai Gy) Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, 2001, pp 71-106

Holly S: Infravörös Abszorpciós Spektroszkópia, In: Kontakt Katalízis, 2 (Eds: Szabó ZG, Kalló D), Akadémiai Kiadó, Budapest, 1966, pp 263-330

Holly S: Infrared absorption spectroscopy, In: Contact Catalysis, Vol. I. II. (Eds: Szabó ZG, Kalló D) Elsevier Science Publishers, Amsterdam és Akadémiai Kiadó, Budapest, 1976, pp 263-289

Horányi Gy: Electrosorption studies in electrocatalysis, In: A Specialist Periodical Report, Catalysis 12, The Royal Society of Chemistry, 1996, pp 254-301

Horányi Gy, Láng Gy: Zsákutcák, tévutak és csapdák a jelenkori elektrokémia elméletében és kutatásában, In: A Kémia Újabb Eredményei 90. kötet, Akadémiai Kiadó, Budapest, 2001, pp 7-120

Horányi Gy: 3. Specific Adsorption, 3.2 State of Art: Present knowledge and understanding, In: Encyclopedia of Electrochemistry, Vol. 1, Thermodynamics and Electrified Interfaces (Eds: Gileadi E, Urbakh M) WILEY-VCH Verlag GmbH & Co., Weinheim, 2002, pp 349-382

Horányi Gy: Radiotracer studies of adsorption at electrode and dispersed oxide surfaces, In: Encyclopedia of Surface and Colloid Science (Ed: Hubbard AT) Marcel Dekker, New York, 2002, pp 1-20

Horányi Gy: Electrocatalysis – Heterogeneous, In: Encyclopedia of Catalysis, Vol. 3 (Ed: Horváth IT) Wiley-Interscience, John Wiley & Sons, Inc. Hoboken, New Jersey, 2003, pp 115-155

Horányi Gy, Láng Gy: Perklórát-szennyezés biológiai, egészségügyi következményei, In: A Kémia Újabb Eredményei 93. kötet, 2004 pp 185-234

Horányi Gy: Studies of electrified solid/liquid interfaces, In: Radiotracer Studies of Interfaces, Interface Science and Technology, Vol. 3 (Ed: Horányi Gy) Elsevier Science Publishers, Amsterdam, 2004, pp 39-97

Horányi Gy: Study of liquid/fluid interfaces, In: Radiotracer Studies of Interfaces, Interface Science and Technology, Vol. 3 (Ed: Horányi Gy) Elsevier Science Publishers, Amsterdam, 2004, pp 141-161

Iván B, Kelen T, Tüdős F: Degradation and stabilization of poly(vinyl chloride), In: Degradation and Stabilization of Polymers, Vol. 2 (Ed: Jellinek HHG), Elsevier Science Publishers, London, 1989, pp 483-714

Iván B, Kennedy JP: Macromolecular engineering by carbocationic polymerization, In: Macromolecular Design of Polymeric Materials (Plastics Engineering 40) (Eds: Hatada T, Kitayama T, Vogl O) Marcel Dekker, New York, 1997, pp 51-84

Kabisch G, Kálmán E: Spectroscopic approaches to the study of ionic solvation, X-ray, electron, and neutron diffraction studies of ionic solvation, In: Studies in Physical and Theoretical Chemistry 38, The Chemical Physics of Solvation, Part B, Spectroscopy of Solvation 10 (Eds: Dogonadze RR, Kálmán E, Kornyshev AA, Ulstrup J) Elsevier Science Publishers, Amsterdam, 1986, pp 1-20

Kalaus Gy, Greiner I, Szántay Cs: Synthesis of some aspidosperma and related alkaloids, In: Natural Products Chemistry Vol. 19 (Ed: Atta-ur-Rahman) Elsevier, Amsterdam, 1997, pp 89-116

Kalló D: Anyagtranszport a katalizátor szemcsén belül, In: Kontakt Katalízis (Eds: Szabó Z, Kalló D), Akadémiai Kiadó, Budapest, 1966, pp 398-427

Kalló D: Katalizátorok hatásmechanizmusa, In: Kontakt Katalízis (Szerk: Szabó Z, Kalló D), Akadémiai Kiadó, Budapest, 1966, pp 277-358

Kalló D: Mass transport within the catalyst grain, In: Contact Catalysis, Vol. I. II. (Szerk: Szabó ZG, Kalló D) Elsevier Science Publishers, Amsterdam, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1976, pp 449-470

Kalló D: Structure and activity of catalysts, In: Contact Catalysis, Vol. I. II. (Eds: Szabó ZG, Kalló D) Elsevier Science Publishers, Amsterdam, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1976, pp 305-394, 415-435

Kalló D, Papp J, Detrekőy E: Catalytic properties of clinoptilolite, In: Catalysis on Zeolites (Eds: Kalló D, Minatchev KhM) Akadémiai Kiadó, Budapest, 1988, pp 413-445

Kalló D: Catalysts from Hungarian natural clinoptilolite and mordenite, In: Occurrence, Properties and Utilization of Natural Zeolites (Eds: Kalló D, Sherry HS) Akadémiai Kiadó, Budapest, 1988, pp 601-624

Kalló D: Utilization of zeolites in environmental protection, In: Geochemical and Mineralogical Approach to Environmental Protection (Eds: Memmi I, Hunziker JC, Panichi C) ISEPS, Siena, Italy, 2000, pp 33-58.

Kalló D: Applications of natural zeolites in water and wastewater treatment, In: Natural Zeolites: Occurrence, Properties, Applications, Reviews in Mineralogy and Geochemistry, Vol. 45 (Eds: Bish DL, Ming DW) Mineralogical Society of America, Washington D.C., 2001, pp 519-550

Kálmán A, Párkányi L: Isostructurality of organic crystals: A tool to estimate the complementarity of homo- and heteromolecular associates, In: Advances in Molecular Structure Research, 3 (Eds: Hargittai M, Hargittai I) Jai Press, Greenwich, 1997, pp 189-226

Kálmán A: Talajok röntgendiffrakciós fázisanalízise, In: Talaj és Agrokémiai Vizsgálati Módszerkönyv 1. A Talaj Fizikai, Vízgazdálkodási és Ásványtani Vizsgálata (Szerk: Buzás I) INDA 4231 Kiadó, Budapest, 1993, pp 293-315

Kálmán E, Pálinkás G: X-ray, electron, and neutron diffraction studies of ionic solvation, In: Studies in Physical and Theoretical Chemistry 38, The Chemical Physics of Solvation, Part B, Spectroscopy of Solvation 10. (Eds: Dogonadze RR, Kálmán E, Kornyshev AA, Ulstrup J) Elsevier Science Publishers, Amsterdam, 1986, pp 501-539

Kálmán E, Felhősi I, Kármán FH, Lukovits I, Telegdi J, Pálinkás G: Environmentally friendly corrosion inhibitors, In: Corrosion and Environmental Degradation (Ed: Schütze M) Wiley-VCH Verlag, Weinheim, 1999, pp 471-573

Kálmán E, Nagy P: Pásztázó tűszondás mikroszkópia (SPM), In: Műszaki Felülettudomány és Orvosbiológiai Alkalmazásai (Eds: Bertóti I, Marosi Gy, Tóth A) B+V Lap- és Könyvkiadó Kft., Budapest, 2003, pp 187-218

Kardos J: Sorption (binding) and transport phenomena in biomembranes, In: Radiotracer Studies of Interfaces (Ed: Horányi Gy) Elsevier Science Publishers, 2004, pp 215-278

Karge HG, *Beyer HK*: Introduction of cations into zeolites by solid-state reaction, In: Zeolite Chemistry and Catalysis, Proceedings of an International Symposium (Eds: Jakobs PA, Jaeger NI, Kubelková L, Wichterlová B) Elsevier Science Publishers, Amsterdam, 1991, pp 43-64

Karge HG, Hunger M, *Beyer HK*: Characterization of zeolites - infrared and nuclear magnetic resonance spectroscopy and X-ray diffraction, In: Catalysis and Zeolites (Eds: Weitkamp J, Puppe L) Springer Verlag, Berlin, 1998, pp 198-326

Karge HG, *Beyer HK*: Solid-state ion exchange in microporous and mesoporous materials, In: Post Synthesis Modification I. (Molecular Sieves. Science and Technology, Vol. 3) (Eds: Karge HG, Weitkamp J) Springer Verlag, Berlin, 2002, pp 43-201

Kazarinov VE, *Horányi Gy*, Vasilev YuB, Andreev VN: Rol benzolnogo koltsa i zamestitelei v adsorpcii i elektrokhimicheskikh prevratchseniyakh aromatcheskikh soedinenii na platine In: Itogi Nauki i Tekhniki Ser. Elektrokimiya Tom. 22 (Ed: Mihajlov AI) Viniti, Moskva, 1985, pp 97-140

Kazarinov VE, *Horányi Gy*, Vasilev YuB, Andreev VN: Elektrokhimicheskoe i adsorpcionnoe povedenie etilenglikolya i produktov ego nerolnogo okisleniya na platinovom elektrode, In: Itogi Nauki i Tehniki Elektrokimiya Tom. 22 (Ed: Mihajlov AI) Viniti, Moskva 1985, pp 62-97

Keresztury G: Emission Spectroscopy, Infrared, In: Encyclopedia of Analytical Chemistry, Instrumentation and Applications (Ed: Meyers RA) John Wiley & Sons, Chichester, 2000, pp 10750-10777

Keresztury G: Rezgési spektroszkópiai módszerek, In: Műszaki Felülettudomány és Orvosbiológiai Alkalmazásai (Szerk: Bertóti I, Marosi Gy, Tóth A) B+V Lap- és Könyvkiadó, Budapest, 2003, pp 166-186

Kertész M, Koller J, Ažman A: Ab initio techniques for ground state calculations in polymers, In: Recent Advances in the Quantum Theory of Polymers, Proceedings, Namur (1979), Lecture Notes in Physics, Vol. 113, (Eds: André JM, Bredas, JL, Delhalle J, Ladik J, Leroy G, Moser C) Springer Verlag, Berlin, 1980, pp 56-79

Kertész M: Electronic structure of polymers, In: Advances in Quantum Chemistry, Vol. 15, Elsevier Science Publishers, Amsterdam, 1982, pp 161-213

Király J: Adszorpciós vizsgálatok, In: Kontakt Katalízis (Szerk: Szabó ZG, Kalló D) Akadémiai Kiadó, Budapest, 1966, pp 655-701

Király J: Experimental methods for adsorption studies, In: Contact Catalysis, Vol. I. II. (Eds: Szabó ZG, Kalló D, Schay G) Elsevier Science Publishers, Amsterdam és Akadémiai Kiadó, Budapest, 1976, pp 217-262

Ladik J: Fémek és félvezetők elektronszerkezete, In: Kontakt Katalízis (Szerk: Szabó ZG, Kalló D) Akadémiai Kiadó, Budapest, 1966, pp 35-70, pp 85-105

Ladik J: Electronic structure of metals and semiconductors, In: Contact Catalysis, Vol. I. II. (Eds: Szabó ZG, Kalló D, Schay G) Elsevier Science Publishers, Amsterdam, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1976, pp 15-48, pp 63-84

Lakatos B: Magnéziumpótlás savas poliszacharidokkal, In: A magnézium forrásai és jelentősége az élővilágban (Szerk.: Fazekas T, Selmeczi B, Stefanovits P) Akadémia Kiadó, Budapest, 1992, pp 282-291

Lakatos B: Magnesium supplementation with acidic polysaccharides, In: Magnesium in biological systems (Eds: Fazekas, T. Selmeczi B, Stefanovits P) Akadémia Kiadó, Budapest, 1994, pp 291-305

Lendvay G, Schatz GC: Classical trajectory methods for studying energy transfer from highly vibrationally excited molecules, In: Vibrational Energy Transfer Involving Large and Small Molecules Vol. 2B (Ed: Barker JR), JAI Press Inc., Greenwich, 1995, pp 481-513

Lengyel S, Conway BE: Proton solvation and proton transfer in chemical and electrochemical processes, In: Comprehensive Treatise of Electrochemistry, 5 (Eds: Conway BE, Bockris JOM, Yeager E) Plenum Publishing Corporation, 1983, pp 339-398

Löwdin P-O, *Mayer I*: Some studies of the general Hartree-Fock method, In: Advances in Quantum Chemistry Vol. 24, 1992, pp 79-114

Margitfalvi JL, Szabó S, Nagy F: Supported bimetallic catalysts prepared by controlled surface reactions, Studies in Surface Science and Catalysis, Vol. 27, Catalytic Hydrogenation (Ed: Cervený L) Elsevier Science Publishers, Amsterdam, 1986, pp 373-409

Margitfalvi JL: Amination reactions, In: Catalyst Modification. Selective Hydrogenation (Eds: Horsley JA, Wroblewski JT) Catalytica Studies Division, California, 1992, pp 185-208

Margitfalvi JL: Hydrogenation technologies to produce fine chemicals, In: Catalysis for Cleaner Industrial Technologies. A Survey International Centre for Science and High Technology (Eds: Miertus S, Trifiró F) United Nations Industrial Development Organization, Trieste, 2001, pp 105-129

Margitfalvi JL, Gőbölös S: Role of "metalion - metal nanocluster" ensemble sites in activity and selectivity control, In: Catalysis, Science and Technology, Specialist Chemistry Reports (Eds: Spivey JJ, Roberts GW) Royal Society of Chemistry, London, Vol.17, 2004, pp 1-104

Mayer I: The spin projected Extended Hartree-Fock method, In: Advances in Quantum Chemistry Vol. 12, Elsevier Science Publishers, Amsterdam, 1980, pp 189-262

Mink J, *Keresztury G*: Spectroscopy, emission, In: Encyclopedia of Pharmaceutical Technology (Eds: Swarbrick J, Boylan JC) Marcel Dekker, New York, 1996, pp 123-179

Nagy F: Kontakt katalitikus reakciók kinetikája, In: Kontakt Katalízis (Szerk: Szabó ZG, Kalló D) Akadémiai Kiadó, Budapest, 1966, pp 385-398, pp 417-488

Nagy F, Horányi Gy: A vizesfázisú kontakt katalitikus hidrogénezés mechanizmusa, In: A Kémia Újabb Eredményei 6. kötet, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1971, pp 73-100

Nagy F: Kinetic of heterogeneous catalytic reactions, In: Contact Catalysis, Vol. I. II. (Eds: Szabó ZG, Kalló D, Schay G) Elsevier Science Publishers, Amsterdam, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1976, pp 437-448, pp 467-540

Nemes L: Sum rules for vibration-rotation interaction coefficients, In: *Vibrational Spectra and Structure* Vol. 10 (Ed: Durig JR) Elsevier, New York, 1981, pp 395-462

Nemes L: Vibrational effects in spectroscopic geometries, vibrational, In: *Spectra and Structure* Vol. 13 (Ed: Durig JR) Elsevier, New York, 1984, pp 161-221

Nemes L: Többatomos molekulák forgási spektroszkópiája, In: *Molekula-spektroszkópia* (Szerk: Kovács I, Szőke J) Akadémiai Kiadó, Budapest, 1987, pp 149-195

Ötvös L, Elekes I, Kraicsovits F, Moravcsik E: Explanation of steric substituent effects in relation of biopolymers, In: *Steric Effects in Biomolecules* (Ed: Náray-Szabó G) Akadémiai Kiadó, Budapest, 1982, pp 305-325

Pálinkás G, Kálmán E: Diffraction investigation of aqueous electrolyte solutions, In: *Studies in Physical and Theoretical Chemistry 13, Diffraction Studies of Non-Crystalline Substances* (Eds: Hargittai I, Orville WJ-Thomas) Elsevier Science Publishers, Amsterdam, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1981, pp 293-375

Pálinkás G, Heizinger K: Simulation of liquid mixtures, In: *Hydrogen Bond Networks* (Eds: Bellissent Mc-Funel, Dore JC) Kluwer Academic Publishers, 1994, pp 281-304

Pálinkás G: Simulation of liquid mixtures, In: *Hydrogen Bond Networks. Proceedings of the NATO Advanced Research Workshop, Cargese, France (NATO Science Series: C: Mathematical and Physical Sciences (continued within NATO Science Series II: Mathematics, Physics and Chemistry) 435)* (Eds: Bellissent-Funel MC, Dore JC) Kluwer Academic Publishers, Netherlands, 1994, pp 281-304

Pukánszky B: Particulate filled polypropylene: structure and properties, In: *Polypropylene: Structure, Blends and Composites. Composites. Vol. 3* (Ed: Karger-Kocsis J) Chapman & Hall, London, 1995, pp 1-70

Pukánszky B: Polyolefin composites: Interfacial phenomena and properties, In: *Handbook of Polyolefins* (Ed: Vasile C) Marcel Dekker, New York, 1999, pp 689-722

Radics L: Elektron paramágneses rezonancia-spektroszkópia, In: *Kontakt Katalízis* (Szerk: Szabó ZG, Kalló D) Akadémiai Kiadó, Budapest, 1966, pp 711-733

Radics L: Electron paramagnetic resonance spectroscopy, In: *Contact Catalysis, Vol. I. II.* (Eds: Szabó ZG, Kalló D, Schay G) Elsevier Science Publishers, Amsterdam és Akadémiai Kiadó, Budapest, 1976, pp 290-329

Rockenbauer A: ESR-spektroszkópia, In: *Molekulaspektroszkópia, 7* (Szerk: Kovács I, Szőke J) Akadémiai Kiadó, Budapest, 1987, pp 556-656

Rockenbauer A, Győr M, Hankovszky HO, Hideg K: ESR of the conformation of 5- and 6-membered cyclic nitroxide (aminoxyl) radicals, In: *Electron Spin Resonance, 11* (Ed: Symons MCR) Royal Society of Chemistry, London, 1988, pp 145-182

Rockenbauer A: Magnetic memory effects in high temperature superconductors, In: *Proceedings of the International Workshop on Electron Magnetic Resonance of Disordered Systems (Emardis-89)* (Ed: Yordanov ND) World Scientific, Singapore, 1989, pp 241-270

Sápi J, Massiot G: The strychnos alkaloids, In: Monoterpenoid Indole Alkaloids, Supplement to Part 4 (Ed: Saxton JE) John Wiley & Sons, New York, 1994, pp 279-355

Sápi J, Massiot G: Bisindole alkaloids, In: Monoterpenoid Indole Alkaloids, Supplement to Part 4 (Ed: Saxton JE) John Wiley & Sons, New York, 1994, pp 524-646

Sasvári K: Röntgendiffrakciós vizsgálatok, In: Kontakt Katalízis (Szerk: Szabó ZG, Kalló D) Akadémiai Kiadó, Budapest, 1966, pp 553-588

Sasvári K: X-ray diffraction studies, In: Contact Catalysis, Vol. I. II. (Eds: Szabó ZG, Kalló D, Schay G) Elsevier Science Publishers, Amsterdam, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1976, pp 105-138

Schay G, Nagy LGy: Elegyadszorpció folyadék/szilárd és folyadék/gőz határfelületen, In: A Kémia Újabb Eredményei 18. kötet, 1974, pp 7-180

Simándi LI, Bazsa Gy: Gyors oldatreakciók kinetikai vizsgálatának módszere, In: A Kémia Újabb Eredményei 43. kötet, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1978, pp 107-237

Simándi LI: Oxidation of triple-bonded groups, In: The Chemistry of Functional Groups, Supplement C (Eds: Patai S, Rappoport Z) John Wiley and Sons, New York, 1983, pp 513-570

Simándi LI: Catalytic oxidations using cobalt(II) complexes, In: Advances in Catalytic Activation of Dioxygen by Metal Complexes (Catalysis by Metal Complexes, Vol. 26) (Ed: Simándi LI) Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 2002, pp 265-328

Simonyi M, Tüdős F: The hydrogen atom abstraction reaction from O-H bonds, In: Advances in Physical Organic Chemistry, Vol. 9 (Ed: Gold V) Academic Press, London, 1971, pp 127-183

Simonyi M, Tüdős F: Az O-H kötés felszakítása gyökös reakciókban, In: A Kémia Újabb Eredményei 12. kötet, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1973, pp 45-138

Simonyi M, Fitos I: Hidrogén-izotópeffektus kémiai reakciókban, In: A Kémia Újabb Eredményei 46. kötet, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1980, pp 7-129

Simonyi M, Maksay G: Stereochemical aspects of drug action II. Optical isomerism, In: The Practice of Medicinal Chemistry (Ed: Wermuth CG), Academic Press, London, 1996, pp 413-435

Simonyi M: The concept of chiral conformers and its significance in molecular pharmacology, In: Advances in Drug Research, Vol. 30 (Eds: Testa B, Meyer UA), Academic Press, London, 1997, pp 73-110

Siró B, Lakatos B, Szelekovszky S, Szatmári E: Multifaceted role of trace elements in the pathogenesis of chronic arthritis, In: Radicals, Ions and Tissue Damage (Eds: Matkovic B, Karmazsin L, Kalász H) Akadémiai Kiadó, Budapest, 1990, pp 237-256

Szántay Cs, Blaskó G, Honty K, Dörnyei G: Corynantheine, yohimbine, and related alkaloids, In: The Alkaloids, Vol. 27 (Ed: Brossi A), Academic Press, Orlando, 1986, pp 131-410

Szántay Cs, Dörnyei G, Blaskó G: The morphine alkaloids, In: *The Alkaloids, Vol. 45: Chemistry & Pharmacology* (Ed: Cordell GA) Academic Press, San Diego, 1994, pp 128-232

Szántay Cs, Honty K: The yohimbine group, In: *Monoterpenoid Indole Alkaloids. Supplement to Part 4* (Ed: Saxton JE) John Wiley & Sons, New York, 1994, pp 161-216

Szántay Cs, Nemes A: The eburnamine-vincamine group, In: *Monoterpenoid Indole Alkaloids, Supplement to Part 4* (Ed: Saxton JE) John Wiley & Sons, New York, 1994, pp 437-486

Szántay Cs, Kardos-Balogh Zs, Szántay CsJr: Epibatidine, In: *The Alkaloids, Vol. 46*, Academic Press, New York, 1995, pp 95-125

Szántay Cs: Synthetic studies in alkaloid chemistry, In: *The Alkaloids, Vol. 50*, Academic Press, New-York, 1997, pp 377-414

Székely T: Termogravimetriás módszerek alkalmazása polimerek hőbomlási reakcióinak kinetikai leírásában, In: *A Kémia Újabb Eredményei 12. kötet*, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1973, pp 139-218

Szilágyi L, Sándor P: NMR-spektroszkópia, In: *Molekulaspektroszkópia, 8.* (Eds: Kovács I, Szőke J) Akadémiai Kiadó, Budapest, 1987, pp 658-718

Tüdős F: A forró gyök hipotéziséről, In: *A Kémia Újabb Eredményei 12. kötet*, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1972, pp 7-44

Tüdős F, Kelen T, Nagy TT: Thermo-oxidative degradation of poly(vinyl-chloride), In: *Developments in Polymer Degradation, Vol. 2* (Ed: Grassie N) Applied Science Publishers, London, 1979, pp 187-210

Tüdős F, Iván B, Kennedy JP: Controlled degradation and modification of some chlorine containing polymers, In: *International Conference on Advances in the Stabilization and Controlled Degradation of Polymers*, Luzern, 1982, pp 1-34

Tüdős F, Bálint G, Kelen T: Effect of various photostabilisers on the photo-oxidation of polypropylene, In: *Developments in Polymer Stabilization* (Ed: Scott G) Applied Science Publishers, Essex, England, 1983, pp 121-172

Tüdős F, Iván B, Kelen T, Kennedy JP: Degradation of virgin and modified chlorine containing polymers, In: *Developments in Polymer Degradation, Vol. 6* (Ed: Grassie N) Elsevier Science Publishers, London, 1985, pp 147-189

Tüdős F, Fodor Zs, Iring M: Kinetics and mechanism of inhibited autoxidation, In: *Oxidation Inhibition in Organic Materials Vol. II, 5* (Eds: Pospíšil J, Klemchuk PP) CRC Press, Boca Raton, 1990, pp 219-247

Ujváry I: Pest control agents from natural products, In: *Handbook of Pesticide Toxicology* (Ed: Krieger EI) Academic Press, New York, 2001, pp 109-179

Valkó K: Biopolymers, In: HPLC in Pharmaceutical Analysis Vol. II. Practical Applications (Ed: Szepesi G) CRC Press, Boca Raton, 1990, pp 65-116

Vinkler P: Bibliometric analysis of publication activity of a scientific research institute, In: Informetrics 89/90 (Eds: Egghe L, Rousseau R) Elsevier Science Publishers, Amsterdam, 1990, pp 309-334

Vinkler P: Az értékelő tudománymetria alkalmazásának néhány példája Magyarországon, In: Kis Tudománymetria, Nagy Tudománymetria... és Azon Túl (Szerk: Glänzel W, Schubert A, Vasvári L) Magyar Tudományos Akadémia Könyvtára, Budapest, 2001, 129-148

Weber E, Czugler M: Functional group assisted clathrate formation - Scissor-like and roof-shaped host molecules, In: Topics in Current Chemistry 149, Springer Verlag, Berlin, 1988, pp 45-135

Áttekintő (review) közlemények

Horányi Gy: Radiochemical studies of processes at electrodes, Reviews in Analytical Chemistry, 1-58 (1995)

Medzihradzsky K: The bio-organic chemistry of alpha-melanotropin, Medicinal Research Reviews 2, 247-270 (1982)

Ohtaki H, Radnai T: Structure and dynamics of hydrated ions, Chemical Reviews, 93, 1157-1204 (1993)

Simándi LI: Transition metal dioxygen complexes as intermediates in homogeneous catalytic oxidations, International Reviews in Physical Chemistry, 8, 21-40 (1989)

Szabó S: Underpotential deposition of metals on foreign metal substrates, International Reviews in Physical Chemistry, 10, 207-248 (1991)

Vékey K: Multiply charged ions, Mass Spectrometry Reviews, 14, 195-225 (1995)

Megjegyzések

- A KKKI-ben, ill. a Kémiai Kutatóközpontban alkalmazásban állt vagy álló kutatók azon publikációi szerepelnek a jegyzékekben, amelyek abban az időszakban jelentek meg, amikor az illető a kutatóhely alkalmazásában volt.
- A nagyszámú közlemény miatt csak a 20 oldalt elérő vagy azt meghaladó terjedelmű könyvfejezetek és áttekintő (review) cikkek szerepelnek a jegyzékekben.
- Az összeállítás teljességre törekedett, de ez a nagy időtáv miatt nem sikerülhetett maradéktalanul, főként az Intézet életének korai időszakában keletkezett publikációk közül hiányozhat néhány, illetve azokban az esetekben, ha maga a szerző vagy szerzőtársai ma már nem dolgoznak a Kutatóközpontban.
- Az Intézet kutatóit dőlt betűvel jeleztük.

Kiadja:
az MTA Kémiai Kutatóközpont
1025 Budapest, Pusztaszeri út 59-67.
Honlap: www.chemres.hu
Felelős kiadó: Pálinkás Gábor
Felelős szerkesztő: Vinkler Péter
Készítette: MTA KK Házinyomda
Példányszám: 20
ISBN 963 7067 11 6