

Beszámoló a Kutatóközponti Tudományos Napokról

2011.

Az MTA Kémiai Kutatóközpont 2011. november 22-24 napokon, 16. alkalommal rendezte meg a *Kutatóközponti Tudományos Napok* című előadásorozatát. A megnyitót Pálinkás Gábor, az MTA Kémiai Kutatóközpont főigazgatója tartotta, ezt követte Tőke Orsolya '*Szerkezet, dinamika és funkció összefüggései a lipidkötő fehérjékben*' című plenáris előadása. A három napos tudományos ülésen összesen 39 előadás hangzott el tematikailag négy szekcióba /szerkezeti kémia; biomolekuláris kémiai; nanokémiai és katalíziskutatási; anyag- és környezetkémiai/ csoportosítva. A 35 életév alatti előadók száma összesen 19 fő volt.



Pálinkás Gábor, főigazgató



Tőke Orsolya, főelőadó

A zsűri felkért elnöke Pokol György (dékán, Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar), tagjai pedig Beck Mihály (az MTA rendes tagja) Gráf László (az MTA rendes tagja), Huszthy Péter (egyetemi tanár, tanszékvezető-helyettes, Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Szerves Kémia és Technológia Tanszék), Medzihradszky Kálmán (az MTA rendes tagja), Nyulászi László (egyetemi tanár, tudományos dékánhelyettes, Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék és Szántay Csaba (az MTA rendes tagja) volt. A tudományos rendezvényen elhangzott előadások alapján a zsűri két kutatói díjat, három fiatal kutatói díjat, egy külön dicséretet, valamint egy kiváló poszter díjat javasolt és további két posztert pedig külön dicséretben részesített.



Pokol György



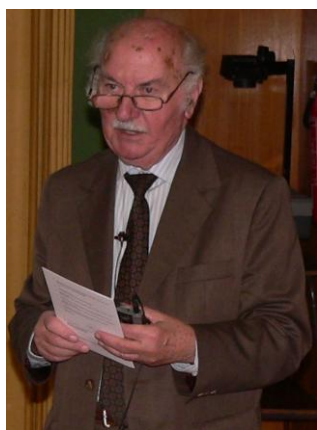
Beck Mihály



Gráf László



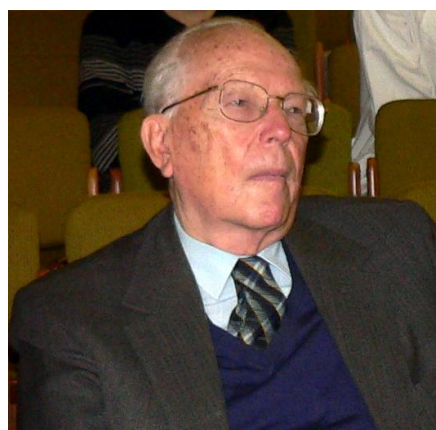
Huszthy Péter



Medzihradszky Kálmán



Nyulászi László



Szántay Csaba

Kutatói díjban részesült



Bombicz Petra 'Kalixarén szabászat'

Vékey Károly, a Drahos László, Ozohanics Olivér, Turiák Lilla, Mercedes de Frutos, Vékey Károly szerzők által jegyzett 'Glikozilációs mintázatok meghatározása és ezek biokémiai jelentősége' című előadásáért.

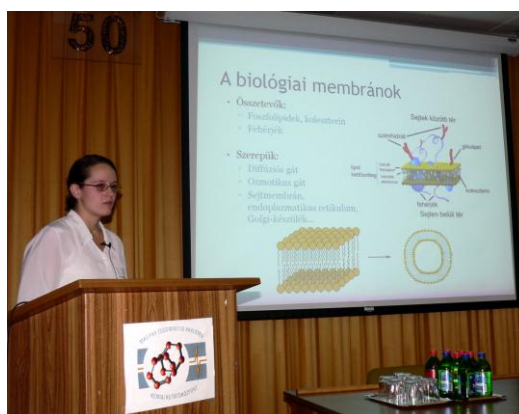


Fiatal kutatói díjban részesült



Horváth Dániel Vajk, a Horváth Dániel Vajk, Ferenczi-Palkó Roberta, Soós Tibor 'Tri- és tetraszubsztituált benzolszarmazékok organokatalitikus szintézise'

Karácsony Zsuzsanna, a Karácsony Zsuzsanna, Mihály Judith, Bóta Attila 'A Tris puffer-rendszer hatása DPPC/víz modellmembrán szerkezetére' és



a



Tátraaljai Dóra, a Tátraaljai Dóra, Kirschweng Balázs, Kovács János, Földes Enikő, Pukánszky Béla 'A kurkumin hatása a polietilén feldolgozási stabilitására' című előadásáért.

Külön dicséretben részesült

Illés Ádám és Petri Balázs, a Farkas Mária, Illés Ádám, Petri Balázs és Dóbe Sándor szerzők által bemutatott 'A levulinsav-etilészter és a γ -valerolakton reakciókinetikai és fotokémiai vizsgálata' című előadásukért.



A Kutatóközpont 2011. évi poszter kiállításán szereplő poszterek közül **Kiváló Poszter díj**ban részesült az alábbi poszter:

Szabó L. Sándor, Iván Béla: *'Hőmérséklet-érzékeny, intelligens amfifil polimer kotérhálók'*, amelyet a MKE 1. Nemzeti Konferencián mutattak be (Sopron, 2011. május 22-25).

Külön dicséretben részesültek a következő poszterek:

Stirling András, Pápai Imre: *'H₂CO₃ forms via HCO₃⁻ in water'* (XV International Workshop On Computational Physics and Materials Science: Total Energy and Force Methods, Trieste, Italy, 2011. január 13-15.)

Szabó Mónika, Veres Zsuzsa, Vereczkey László, Jemnitz Katalin: *'Bozentán és ciklosporin A hatása a taurokolát hepatobiliáris transzportjára patkány és humán hepatocitákban'* (TOX 2011 Konferencia, Sümeg, 2011. október 12-14.)

A Tudományos Napok lezárásaként tartott fogadáson adta át Pálincás Gábor főigazgató a Kutatóközpont érdekében hosszú időn keresztül végzett munkájuk és kiemelkedő tudományos eredményeik elismeréseképpen a 2011. évi **Pro Arte Chemica** érmeiket: Lengyel Béla, az MTA doktora, Vereczkey László, az MTA doktora és Vinkler Péter, az MTA doktora részére.

A Kutatóközpont Intézetek rövid bemutatása

Szerkezeti Kémiai Intézetet



Az Intézetet 2004-ben alapították, az MTA Kémiai Kutatóközpont részeként. A szerkezeti kémiai laboratóriumok feladatai:

- önálló kutatásokat végezni a szerkezeti kémia területén,
- elősegíteni az egyetemeken és az akadémiai kutatóintézetekben folyó kutatásokat szerkezeti kémiai vizsgálatokkal,
- részt venni az egyetemi képzésben,
- szerkezeti kémiai méréseket végezni és módszereket fejleszteni vállalati partnereink részére.

A szerkezeti kémiai laboratóriumok saját kutatási területei:

- a kémiai szintézisben, az anyagtudományban és a biológiában alkalmazható funkcionális vegyületek (organokatalizátorok, mágneses szerkezetek, ionos folyadékok, fluoreszcens próbák, fotokróm anyagok, szenzorokban alkalmazható mesterséges receptorok) tulajdonságainak vizsgálata;
- kristály-mérnökség ('crystal engineering') (OLED-hatóanyagként, szenzor-hatóanyagként érdekes) arany-arany és más fém-fém kötést tartalmazó kristályok tervezése; szintézise, vizsgálata; üreges kristályok létrehozása makrociklusos vegyületekből; a kristályon belüli szupramolekuláris struktúrák és a kristály makroszkopikus tulajdonságainak összefüggése;
- szerkezeti biológia: speciális peptid- és fehérjecsaldok (epesavkötő fehérjék, glikoproteinek) szerkezete és dinamikája;
- orvosi analitikai kémia: orvosi kutatócsoportokkal közös biomarker-fejlesztések
- gyógyszeripari vállalatok K+F tevékenységének támogatása szerkezeti kémiai és analitikai vizsgálatokkal.

E feladatok elvégzéséhez alapvetően fontos a korszerű műszeres infrastruktúra.

Az Intézet fontosabb műszerei: korszerű NMR-spektrométerek (köztük szilárdfázisú mérésre alkalmas műszer), ESR-spektrométer, kromatográf-tömegspektrométer rendszerek, por és egykristály diffraktométerek és folyadékkdiffrakciós készülék, fotofizikai és fotokémiai műszerek, köztük időfelbontásos spektrofluoriméter.

Biomokuláris Kémiai Intézet

Az Intézet alapvetően kétféle irányból közelíti meg az élettanilag jelentős vegyületek kutatását: szintetikus vizsgálatokat folytat, valamint biokémiai alapokon nyugvó diagnosztikai értékű kutatásokat végez.

A szerves kémiai szintézisek főként heterociklusos és szénhidrát molekulák létrehozására, azok reakciókészségének feltárására irányulnak. Kiemelendő eredmény a számos, korábban nem ismert, főként nitrogén- és kéntartalmú gyűrűváz első szintézise, mellyel alapvetően új származékok előállítása vált lehetővé, valamint jelentős eredmények elérése egy új védőcsoport-stratégia, az ún. ortogonális védőcsoportok használata területén, ami főként a poliszacharidok szintézise során jelent forradalmi újítást. Az Intézet kiemelt erőforrást biztosít továbbá az ún. organokatalitikus átalakítások kidolgozására. Ez az új, néhány év óta ismert közelítés mind a sztereoselektív reakciók megvalósítása, mind a fémmentes körülmények között véghez vihető katalitikus hidrogénezés terén tár fel alapvető szintetikus megoldást a korábbi évekhez viszonyítva.

A biokémiai kutatások három területre csoportosulnak. Egyrészt hatékony (pl. kinázgátló) molekulák szérumfehérjén történő kötődéséből a gyógyszerek farmakokinetikájára nyernek fontos új információkat. Egy másik munkacsoport tevékenysége transzportereken lejátszódó interakciókat tár fel, ehhez humán és patkány hepatocita szendvicskultúra áll rendelkezésre. Diagnosztikai eljárást dolgoznak ki továbbá a szervezet gyógyszerlebontó képességének meghatározására, ami lehetővé teszi az egyénre szabott gyógyszeres terápia kialakítását. Az Intézet Neurokémiai Osztálya ugyanakkor transzport-célfehérjék által szabályozott idegi folyamatok mechanizmusának jobb megértését tűzte ki célul, s ehhez *in vitro* nyomjelzéses, képalkotó és elektrofiziológiai eljárásokat, valamint *in vivo* mikrodialízis technikát alkalmaznak.

Az Intézet szerves kémiai és biokémiai laboratóriumai számos projektben együttműködnek, így pl. a jelenleg futó „Nanotransport” pályázat keretében közösen dolgoznak ki speciális nanomolekulát a szervezetben lejátszódó ionfluxus kimutatására.



Nanokémiai és Katalízis Intézet



Az Intézet új nanoanyagok előállításával, a nanoméretből fakadó sajátos tulajdonságok megismerésével, módosításával foglalkozik valamint a nanoanyagok hasznosításának tudományos megalapozásával az iparban, mezőgazdaságban, környezet- és egészségvédelemben, valamint diagnosztikában. Munkánk részben új, anyag- és energiatakarékos, hulladékmentes technológiák kifejlesztését segíti, továbbá a környezetkárosító kibocsátások hatékonyabb ártalmatlanítását, a víz-, a levegőtisztaság és a klíma védelmét célozza.

Az Intézet jelenlegi és távlati tervei az energiahatékonyság javítására, a napenergia és a biomassza energetikai és vegyipari hasznosítására vonatkoznak. Utóbbi területeket összekapcsolja, hogy heterogén nanokatalizátorok fejlesztésétől várunk jelentős eredményeket. Célunk a napenergia illetve a kémiai energia ismertnél hatékonyabb átalakítása elektromos energiává. Kulcsszerepe van a hidrogénelőállításnak és a hidrogénnel vagy metanollal üzemelő polimer elektrolit (protoncserélő) membrán típusú tüzelőanyag-elemek (PEMFC illetve DMFC) fejlesztésének. Fotokatalizátor kutatásával foglalkozunk, mely a látható fény energiájának hasznosításával képes a vizet hidrogénnel és oxigénnel elbontani. Az tüzelőanyag-elemek szélesebb körű alkalmazásához nemesfém-mentes vagy nemesfémekben szegény, szén-monoxid-toleráns, aktív elektrokatalizátort kívánunk előállítani. A biomassza jobban hasznosul, ha a biomasszát nem egyszerűen elégetjük, hanem több lépésben feldolgozva vegyi termékeket és energia hordozót (pl. hidrogént, cseppfolyós motorhajtó anyagot) állítunk belőle elő. A növényolajok és zsírok átalakítása viszonylag egyszerű, de kihívást jelent a növényi és állati eredetű melléktermékek hatékony feldolgozása. Elsődleges, részleges lebontásukat, ami történhet kémiai, biológiai vagy termikus eljárással, célszerűen az elsődleges termékek további átalakítása, elgázosítása vagy heteroatom tartalmának csökkentése kell követnie. Kutatjuk az átalakítások aktív és szelektív nanokatalizátorait és a katalitikus átalakulások folyamatait modell és reális reakciók alkalmazásával. Kutatásunk egy további területe az elektromos energia hatékony tárolásának megoldása ún. szuperkondenzátor fejlesztésével, a nanotechnológia módszereinek alkalmazásával. A nanoszerkezetek vizsgálatára alkalmas sajátos módszerek ismert műszaki megoldások mélyrehatóbb megismerését teszik lehetővé, ezáltal megnyitják a megoldások tovább fejlesztésének lehetőségét is. Intézetünk kutatói pásztázó elektrokémiai mikroszkópiát illetve a felületerősített Raman-spektroszkópiát alkalmazva öngyógyító korrózióvédő bevonatot fejlesztenek, illetve eljárást a hatóanyag eloszlás vizsgálatára gyógyszer tablettákban.



Az utóbbi néhány évben az Intézetünkben egyre nagyobb teret nyertek az orvosbiológiai nanokémiai kutatások, ezen belül a nanorészecskékhez kötött gyógyhatású készítmények előállításának szerkezetének és hatásmechanizmusának tanulmányozása. Megkülönböztetett figyelmet kapnak a nagy biotechnológiai jelentőségű két és háromdimenziós lipid szerveződések, melyek, azonkívül, hogy gyógyszerhordozó anyagok lehetnek, hordozós lipid réteggént is sokféle funkciót betölthetnek, például specifikus bioszenzorok felületi rétegeit alkotják. Mono- és kettős lipidrétegek vizsgálatával közelebb jutottunk a sejtmembrán szerkezetének és működésének megértéséhez.

Anyag- és Környezetkémiai Intézet

Az intézet tevékenysége és közeljövőbeli tervei a művelt témák interdiszciplináris természetével és a két fő területnek, az anyagkémianak és a környezetkémianak az összefonódásával jellemezhető.

A kémia és a biológia határterületén a biokémiai és gyógyászati alkalmazás irányába mutató kutatások közé tartozik például egyes gyógyszerhordozók, társított gyógyszerkészítmények előállítása, gyógyszer-csomagolásra alkalmas nedvesség- és oxigénzáró, valamint biokompatibilis műanyagok előállítása, továbbá biológiailag aktív molekuláknak különböző felületekhez kötése kovalens kötéssel.

Az anyagok és a kémiai átalakulások vizsgálatában, folyamatok irányításában jelentős szerepet játszanak a fizikai módszerek. Ilyenek például fotokémiai és légkörkémiai folyamatok követése lézertechnikával, elektrokémiai vizsgálatok alkalmazása határfelületi jelenségek tanulmányozására, elektronikai eszközök kifejlesztése molekuláris vezetés mérésére, műanyagok terhelés hatására végbemenő deformációjának követése akusztikus úton, és valamennyi fontosabb műszeres mérés-technika.

A számítástechnika a folyamatszabályozásban, a kísérleti eredmények kiértékelésében, modellszámításokban és elméleti kutatásokban játszik szerepet. Korszerű analitikai technikákkal (XRF és ICP) még olyan távoli tudományterület, mint az archeológia számára is nyújtanak információt.

Jellemző továbbá a két fő kutatási terület összefonódása. Az anyagkémiai témák szinte mindegyikében érvényesülnek környezetvédelmi és energiagazdálkodási szempontok. Új polimerek előállításakor lehetőleg alacsony hőmérsékleten, oldószermentesen vagy a környezetet nem károsító oldószerben, melléktermékek képződése nélkül lezajló folyamatokat választanak. Társított polimer rendszerek kifejlesztésekor előnyben részesítik a biológiailag lebomló polimerek (politejsav) és különböző természetes töltőanyagok (faliszt, len-szál, rétegszilikát) alkalmazását.

A környezetkémiai problémák megoldása lehetőség szerint nem fejeződik be a kármentesítéssel, hanem arra törekszenek, hogy a hulladékot hasznos anyagokká alakítsák át, vagy abból értékes alkotóelemeket kapjanak. Például műanyag-hulladékokból katalizátor jelenlétében végzett pirolízissel alternatív üzemanyagként használható olajok, illetve új polimer alapanyagok nyerhetők. Eljárást dolgoztak ki, amivel használt gumiabroncsok pirolízisekor képződő szilárd maradékból, valamint kvarclisztből termikus plazmareaktorban különleges tulajdonságú kerámiaporok állíthatók elő.



Előadások az elhangzás sorrendjében

Szerkezeti kémiai szekció

Mayer István, Pedro Salvador, Bakó Imre, Stirling András: Vannak-e atompályák a molekulákban?

Tárkányi Gábor, Király Péter: Asszociátumok szerepe a Takemoto-katalizátor működésében

Király Péter, Tárkányi Gábor: ^1H - ^{19}F és ^1H - ^2H kettősrezonancia NMR-módszerek

Domján Attila, Mezey Péter, Varga Jenő: Nanofázis-szeperált kotérhálók fázishatárának vizsgálata szilárd fázisú NMR-módszerekkel

Drahos László, Ozohanics Olivér, Turiák Lilla, Mercedes de Frutos, Vékey Károly: Glikozilációs mintázatok meghatározása és ezek biokémiai jelentősége

Palló Anna, Gráczer Éva, Angelo Merli, Závodszy Péter, Vas Mária, Manfred S. Weiss: Az izopropilmalát dehidrogenáz aktív enzimet mintázó kvaterner komplexének szerkezete

Miskolczi Zsombor, Biczók László: Fotokromizmus kukurbit[8]uril makrociklus üregében

Varga Olívia, Kubinyi Miklós, Vidóczy Tamás, Baranyai Péter, Kállay Mihály, Károlyházy Gyula: Spiropiránok fémkomplexeinek egyensúlyi és kinetikai jellemzése

Klencsár Zoltán, Korecz László, Sajó István, Osán János, Németh Péter, Kuzmann Ernő, Mészáros Sándor, Tolnai Gyula: Az EPR/FMR spektroszkópia alkalmazása mágneses nanorészecskék vizsgálatára

Korecz László, Bóta Attila, Varga Zoltán: Rézionok és foszfolipid vezikulák kölcsönhatásának vizsgálata ESR-spektroszkópiával

Kristyán Sándor: Korrelációs energia és bázis készlet hiba becslése Hartree Fock–SCF számításokban léptékmódosítással (finom szabályozással) az SCF-algoritmus alatt néhány programsor beírásával és analitikus integrálással, de a számítási idő és merevlemez szükséglet növelése nélkül

Biomolekuláris kémiai szekció

Héja László, Kékesi Orsolya, Szabó Pál, Nyitrai Gabriella, Kardos Julianna: Putrescinből képződő gliális GABA szerepe az idegsejtek aktivitásának szabályozásában

Simon Ágnes, Bencsura Ákos, Kardos Julianna: Gamma-aminovajsav transzporter funkció modellezése

Pál Ildikó, Nyitrai Gabriella, Kardos Julianna: Új módszer idegi sejtek aktivitásfüggő optikai jelének jellemzésére

Horváth Dániel Vajk, Ferenczi-Palkó Roberta, Soós Tibor: Tri- és tetraszubsztituált benzolszármazékok organokatalitikus szintézise

Fegyverneki Dániel, Soós Tibor: Szelektív hidroszililezési módszer fejlesztése

Héberger Károly: Mintázatfelismerés és osztályozás az élelmiszerkémiában

Nanokémiai és katalíziskutatási szekció

Pilbáth Aranka, Szabó Tamás, Telegdi Judit, Nyikos Lajos: Öngyógyító bevonatok vizsgálata pásztázó elektrokémiai mikroszkóppal

Badari Andrea Cecília, Kollár Márton, Pölczmann György, Valyon József: Cseppfolyós motorhajtóanyag és kenőolaj alapanyag előállítása Fischer-Tropsch viasz katalitikus hidrokonzverziójával

Barthos Róbert, Valyon József: A Wacker-reakció heterogenizálása Pd/V₂O₅ katalizátorokon

Onyestyák György, Harnos Szabolcs, Kalló Dénes: Új In₂Ni/Al₂O₃ katalizátor biomassza eredetű karbonsavak szelektív hidrogénezésére alkoholokká

Keszthelyi Tamás, Holló Gábor: Kétdimenziós lipid szerveződések előállítása, jellemzése és biomembrán modellként történő alkalmazása

Karácsony Zsuzsanna, Mihály Judith, Bóta Attila: A Tris puffer-rendszer hatása a DPPC/víz modellmembrán szerkezetére

Kremmer Tibor, Bóta Attila, Varga Zoltán, Wacha András, Mihály Judith, Szigyártó Imola Csilla, Pálmai Marcell, Illyés János, Forrai Erika: A hialuronsav vizsgálata

Szigyártó Imola Csilla, Szabó László, Simándi László: Mangántartalmú komplex enzimutánczó tulajdonságainak vizsgálata

Szijaártóné Majrik Katalin, Tompos András: Metanol fotokatalitikus reformálása átmeneti fémekkel módosított TiO₂ katalizátorokon

Gubán Dorottya, Tompos András: PEM tüzelőanyag-cellák CO-toleráns anód elektrokatalizátorainak tervezése

Pászti Zoltán, Hakkel Orsolya, Keszthelyi Tamás, Tompos András, Gucci László: Szén-monoxid és víz kölcsönhatása ionbombázással módosított Au(111) felületen

Firkala Tamás, Vajna Balázs, Farkas István: Ezüst nanorészecskék alkalmazása felületerősített Raman-térképezésben

Mohai Miklós, Bertóti Imre: Nanocsövek felületén lévő rétegek vastagságának meghatározása XPS intenzitásokból

Bozi János, Blaszó Marianne: Nitrogéntartalmú polimerek katalitikus hőbomlása zeolitok jelenlétében

Farkas Mária, Illés Ádám, Petri Balázs és Dóbé Sándor: A levulinsav-etilészter és a γ -valerolakton reakciókinetikai és fotokémiai vizsgálata

Demeter Attila: Mérések és kérdések: a kvantumhasznosítási tényezők meghatározásának aktuális problémái

Verebélyi Klára, Iván Béla: A benzotrifluorid mint új, alternatív polimerizációs reakcióközeg

Szanka István, Iván Béla: Funkciós csillag és hiperelágazásos polimerek előállítása kvázielő atomátadásos gyökös polimerizációval

Fodor Csaba, Kali Gergely, Domján Attila, Németh Péter, Bánfi Renáta, Zihné Perényi Katalin, Ralf Thomann, Yi Thomann, Rolf Mülhaupt, Iván Béla: Nanoszerkezetű polimer kotérhálók és nanohibridjeik

Fekete Erika, Csiszár Emília: Inverz gázkromatográfia alkalmazása cellulóz alapú szubsztrátumok felületi tulajdonságainak jellemzésében

Tátraaljai Dóra, Kirschweng Balázs, Kovács János, Földes Enikő, Pukánszky Béla: A kurkumin hatása a polietilén feldolgozási stabilitására

Bombicz Petra: Kalixarén szabászat