

# Beszámoló a 2010. évi tudományos tevékenységről





## TARTALOM

<b>Anyag- és Környezatkémiai Intézet .....</b>	<b>5</b>
<b>Biomolekuláris Kémiai Intézet.....</b>	<b>21</b>
<b>Nanokémiai és Katalízis Intézet .....</b>	<b>33</b>
<b>Szerkezeti Kémiai Intézet .....</b>	<b>47</b>



## **I. A kutatóhely fő feladatai 2010-ben**

Az intézetben 2010-ben művelt kutatási témáknál kiemelt figyelmet fordítottak a tudományos újszerűsége, a kutatási feladatok gyakorlati vonatkozásaira, és a társadalom aktuális igényeire.

Témáikban az anyagtudományi és a környezetkémiai vonatkozások komplex módon, egymást kiegészítve jelentek meg. Az anyagtudományi témák szinte mindegyikénél érvényesültek közvetlenül vagy közvetve környezetvédelmi szempontok, mint például: környezetkímélő előállítási technológiák kifejlesztése, alkalmazása; szerkezeti anyagok élettartamának növelését célzó kutatások; biológiailag lebomló komponensek alkalmazása. Az elsődlegesen környezetkémiai témáik művelése pedig sok esetben nem fejeződött be a kárenyhítésnél, hanem kiterjedt arra is, hogy a hulladékokat hasznos alapanyaggá lehessen átalakítani.

## **II. A 2010-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények**

### **a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények**

#### *Szilícium-karbid nanopor előállítása rádiófrekvenciás termikus plazmában*

Szilícium-karbid (SiC) nanoporokat állítottak elő rádiófrekvenciás termikus plazma reaktorban különböző szilícium- és szénforrások felhasználásával. A kutatás nagy hozzáadott értékű kerámia alapanyag előállítására irányult hulladék anyagok felhasználásával. Kiterjedt kísérleteket folytattak pl. használt gumiabroncsok elgázosítási maradékából képződött szénforrással, valamint pernyékkel, kvarclisztekkel, mint szilíciumforrásokkal. A kísérleteket megelőzően termodinamikai számításokat végeztek a karbotermikus redukció és a karbidképződés optimális hőmérsékleti viszonyainak, és a képződő termékek koncentrációjának meghatározására. Nagy fajlagos felületű,  $\beta$  fázisú SiC porokat állítottak elő, amelyek szemcseméret eloszlása két modulusú volt: nagyobb részt egy nagyon finom, 100-300 nm szemcseméretű, gőzfázisból levált frakcióból, kisebb részt egy 5-50  $\mu$ m-es, porózus frakcióból állt. A plazmatechnológiával előállított anyag jellegzetessége, hogy kevés maradék szenet, és elemi szilíciumot is tartalmaz, ezért a további feldolgozás során ún. reakció kötésű szinterelődés is lejátszódik, ami az előállított kerámia test mechanikai tulajdonságait javítja.

A laboratóriumi kísérletekkel megalapoztak egy félüzemi plazmaberendezést, amely részét fogja képezni egy gyártósornak, amit nemzetközi együttműködés keretében, EU finanszírozással a közeljövőben állítanak fel.

#### *Funkcionális szemcsés anyagok előállítása, formálása és elemzése*

Funkcionális anyagok mikrokapszulázási lehetőségeit kutatták, és biokompatibilis és biodegradábilis politejsav-glikolsav – bovin szérum albumin (modellfehérje) kompozit nanokapszulákat hoztak létre. A kifejlesztett fehérje típusú anyagokat tartalmazó kompozit gyógyszerformáknak az a különlegességük, hogy mágneses vas-oxid nanorészecskéket is

tartalmaznak, ezáltal a szabályozott hatóanyag-leadás mellett egyúttal célzott gyógyszerbevitelre is alkalmassá válnak.

A Maribori Egyetem Textil Tanszékével együttműködésben fotokróm festékeket nanokapszulákba zártak, hogy ezáltal az élettartamukat és színváltó képességüket megnöveljék. A kapszulázás további előnye, hogy ezek a festékek vizes fázisban szuszpendálhatóvá váltak. A keletkező nanorészecskéket textilanyagok bevonásához használt keverékben diszpergálták. A textilanyagra felvitt bevonatok vizsgálata folyamatban van.

Természetes eredetű hidrokolloid szárítási technológiáját dolgozták ki gejzír típusú szárítóban. Vizsgálták a műveleti paraméterek hatását a termék tulajdonságaira, mint a szemcseméret, a viszkozitás, az optikai forgatóképesség. A laboratóriumi kísérleteket üzemi méretű berendezésre adaptálták, és mára a BUSZESZ Élelmiszeripari Zrt-ben már ezen eljárás alapján folyik a termelés.

#### *Nanorétegek előállítása és vizsgálata*

Az iparban (például a mikromechanikában vagy bioanyagként) széleskörűen alkalmazott politetrafluoretilén (PTFE, Teflon) felületét kezelték nitrogén plazma-alapú ionimplantációval, és megvizsgálták az olyan felületi tulajdonságokban előállt változásokat, mint kémiai összetétel, érdesség, abráziós kopás, nedvesedés és felületi elektromos ellenállás. A kutatásaikban az alábbi eredményeket kapták: A kezelés hatására a felület fluortartalma erősen lecsökkent, a felületi fluor/szén (F/C) atomarány fordítottan korrelált az iongyorsító feszültséggel. A felületi átlagérdesség megnőtt, korrelálva a felületi részecskedózással és fordítottan korrelálva az iongyorsító feszültséggel. A kopási térfogat nőtt, elsősorban az érdesség növekedése és a felületi utóoxidáció miatt. A vízzel mért peremszög nőtt kis gyorsítófeszültség és nagy iondózis alkalmazásakor (az érdesség növekedése miatt), de csökkent nagy gyorsítófeszültség és kis iondózis hatására (a fluortartalom csökkenése és az oxigén és a nitrogén atomok beépülése miatt). A felületi elektromos ellenállás kb. öt nagyságrenddel csökkent, fordítottan korrelálva az iondózással. A feltárt összefüggések lehetőséget nyújtanak a PTFE felületi tulajdonságainak célirányos megváltoztatására.

Rendszereztek a korábban előállított króm, szilícium és volfrám (Cr-, Si- és W) tartalmú gyémántszerű (DLC) szénrétegek tulajdonságait, és a témában összefoglaló közleményt készítettek a Surface and Coatings Technology c. folyóirat speciális kötetéhez.

#### *Nanoszerkezetű amfifil polimer kotérhálók*

Különböző fém nanorészecskék előállításához templátként szolgáló nanofázisú amfifil kotérhálókat, poli(N,N-dimetil-akrilamid)-l-poliizobutilént valamint poli(N-vinil-imidazol)-l-politetrahidrofuránt alkalmaztak. Vizsgálták a kapott fémtartalmú nanohibridek katalitikus aktivitását és antibakteriális tulajdonságait.

Jól definiált szerkezetű amfifil polimer kotérhálókat állítottak elő kvázielő atomátadásos gyökös polimerizáció és click-kémia kombinálásával. Ennek során propargil telekelikus makromolekulák és azid-csoportot tartalmazó csillag polimerek click-kapcsolásával hoztak létre jól szabályozott szerkezetű kotérhálókat.

Poli(poli(etilén-oxid)-metakrilát)-poliizobutilén triblokk-kopolimer makroiniciátorok-kal elvégezték bifunkciós etilenglikol-dimetakrilát polimerizációját, melynek révén amfifil kotérhálókat állítottak elő. Tanulmányozták ezen új anyagok duzzadási viselkedését és fázistulajdonságait. Előállítottak továbbá újfajta szerkezetű, lineáris poliizobutilén és elágazásos poli(di(etilén-oxid)-metakrilát) szegmenseket tartalmazó amfifil kotérhálókat is.

Előállítottak N-izopropil-akrilamid alapú, intelligens viselkedést mutató kotérhálókat poliizobutilén dimetakrilát és poli(etilén glikol)-dimetakrilát keresztkötőkkel. Vizsgálták ezen

anyagok termikus viselkedését, amfifil és hőérzékeny duzzadási viselkedését. Poli(N,N-dietil-akrilamid) mint hidrofil és poli(dimetil-sziloxán), illetve poliizobutilén mint hidrofób komponensek felhasználásával előállított amfifil kotérhálóknál alsó kritikus szételegyedési hőmérsékletet figyeltek meg. Ezekben az újszerű intelligens anyagokban a testhőmérséklethez közeli hőmérsékleteken figyelhető meg a pillanatszerű és reverzibilis átmenet.

#### *Új típusú polimerek kvázielő atomátadásos gyökös polimerizációval*

Kedvező fizikai és kémiai tulajdonságokkal rendelkező kopolimereket állítottak elő többféle, gazdaságos és környezetileg előnyös módon, kvázielő atomátadásos gyökös polimerizációs eljárásokkal. Kereskedelmi forgalomban kapható monomerek (sztirol és (met)akrilátok) polimerizációjával csillag és hiperelágazásos polimereket állítottak elő többféle katalizátorrendszerrel (a katalizátor-koncentrációcsökkentése fontos szempont volt), környezetileg előnyös oldószerben (benzotrifluoridban). Az így előállított multifunkciós polimerek jól alkalmazhatók környezetileg előnyös lakkokban és festékekben, valamint jól definiált szerkezetű és tulajdonságú térhálós polimerek kiinduló anyagai lehetnek. Kidolgozták az ilyen polimerek fotopolimerizációval térhálósítható csoportját is, amelyek újszerű fogtömő anyagokként kerülhetnek alkalmazásra.

Poli(poli(etilén-oxid)-metakrilát)-poliizobutilén triblokk-kopolimerekhez kvázielő atomátadásos gyökös polimerizációval poli(metil-metakrilát) blokkokat kapcsoltak, ezzel számottevően megjavították a korábban vizsgált anyagok mechanikai tulajdonságait. Ily módon rugalmas filmeket állítottak elő.

#### *Funkciós polimerek kationos polimerizációval*

A karbokationos polimerizációhoz kapcsolódó kutatások során szabályozott szerkezettel és tulajdonságokkal rendelkező poliizobutiléne és polisztirolon alapuló újszerű makromolekuláris szerkezetek előállítására tettek kísérleteket. Funkciós polimerek előállítása során a láncvégi kettőskötéssel rendelkező poliizobutilének és különböző tiolok reakcióját tanulmányozták, és többféle láncvégi funkciós csoporttal rendelkező polimert kaptak.

Poliizobutilén-poli(para-metilsztirol) blokk-kopolimereket állítottak elő kvázielő karbokationos polimerizációval a monomerek szekvenciális adagolása révén. Ezek az anyagok a poli(para-metilsztirol) blokkok kémiai módosítása révén különleges szerkezetű polimerek szintézise előtt nyithatják meg az utat.

Sztirol és divinilbenzol kopolimerizációjával sikeresen állítottak elő hiperelágazásos polimert egy környezetbarát oldószerben, szobahőmérsékleten és csökkentett katalizátorkoncentráció alkalmazásával. Az előállítás során úgy választották meg a körülményeket, hogy a képződött hiperelágazásos szerkezetű polimerben kettős kötések is maradjanak a beépült bifunkciós monomerből. Ezáltal egy további reakciókba vihető multifunkciós hiperelágazásos makromolekulát kaptak.

#### *Polimerek környezetileg előnyös lebontása és átalakítása*

A világon harmadik legnagyobb mennyiségben gyártott polimer, a poli(vinil-klorid) (PVC) degradatív lebontásával és polimer analóg reakciókkal kapcsolatos kutatásaikkal olyan új eljárásokat dolgoztak ki, amelyek bővíthetik egyrészt a PVC újrahasznosítási lehetőségeit, másrészt egészségi és környezeti szempontokból előnyösebb PVC termékekhez vezethetnek. Sikerrel elegyítették termooxidatív lebontással nyert PVC-t és biológiailag lebomló politejsavat, és így biológiailag részlegesen lebomló polimer keverékek előállítását alapozták meg.

A PVC feldolgozása során elkerülhetetlen termikus degradációval konjugált kettőskötésű szekvenciákat (poliéneket) tartalmazó PVC-t állítottak elő, majd tanulmányozták ennek módosítását tiol-polién click-reakcióval. Eredményeik alapján ez alkalmas lehet reaktív kettős kötéseket tartalmazó, erősen elszíneződött PVC-ben a kettős kötések telítésére, ezáltal új szerkezetű, módosított PVC termékek előállítására. Kidolgozták a PVC hatékony azidálását is, amely jelentősen kibővítheti ennek a polimernek click-kémiai eljárásokkal történő módosítási lehetőségeit.

#### *Poliolefinék szerkezet-tulajdonság összefüggéseinek feltárása és tulajdonságainak módosítása*

A poliolefinekkel kapcsolatos munka tovább bővült tudományos, de még inkább ipari partnerekkel. A Tiszai Vegyi Kombináttal (TVK) közös kutatásban a polimerizációs folyamattól az adalékok kölcsönhatásáig több területen vizsgálták a szerkezet-tulajdonság összefüggéseket és a tulajdonságaik módosításának kérdéseit, és javaslatot tettek a jelenlegi megoldások módosítására. A kutatás eredményei közvetlenül hasznosulnak a különböző poliolefinék katalizátorainak és adalékrendszerének kidolgozásában, ezzel javítják a TVK versenyképességét. Megállapították, hogy a foszfortartalmú stabilizátorok hatásmechanizmusa függ a vegyület kémiai szerkezetétől, és a foszfinok nagy hatékonysága az oxigéntartalmú gyökök elfogása mellett az oxigénnel való direkt reakció eredménye. Figyelembe véve a társadalmi elvárásokat az egészséges élelmiszerekkel és csomagolóanyagokkal szemben, új kutatást indítottak a jelenleg alkalmazott szintetikus adalékok helyettesítésére természetes antioxidánsokkal. A kutatást az OTKA támogatásával végzik. A Borealis multinacionális céggel folytatott együttműködésben összefüggést állapítottak meg polipropilén és a göcképzők szerkezete és a termék tulajdonságai között. Megállapították, hogy bizonyos kopolimerek ütésállósága háromszorosára növelhető megfelelő típusú és mennyiségű göcképző adagolásával. Megállapították egy új oldódó göcképző hatásmechanizmusát.

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

Hagyományos töltőanyagot tartalmazó kompozitok vizsgálata újabb információkat eredményezett az ilyen anyagok deformációs folyamatairól. Új módszert dolgoztak ki a határfelületi kölcsönhatások erősségének mennyiségi meghatározására erős adhézió esetén. A természetes erősítőanyagot tartalmazó polipropilén/fa kompozitok deformációs és tönkremeneteli mechanizmusának vizsgálata során megállapították, hogy a tulajdonságokat elsősorban az erősítőanyag szemcsemérete és alakja tényezője befolyásolja. A termék tönkremenetele bekövetkezhet a szálak kereszt- és hosszirányú törése, a szemcsék elválása vagy kihúzódása következtében. Megmutatták, hogy a természetes erősítőanyag felületi jellemzői módosításának hatása függ a kezelés jellegétől, az összes tulajdonság egyidejű javítása lehetetlen. Poliamid6/montmorillonit kompozitok vizsgálata rámutatott, hogy bár a deformációs folyamatok függenek a rétegszilikát jelenlététől, ezekben a kompozitokban a mátrix deformációja dominál. A rétegszilikát nanokompozitok kutatásában szerzett tapasztalataikat több könyvfejezetben foglalták össze. Egyre jobban előtérbe kerül a biológiailag lebontható polimerek és társított rendszereik kutatása is. Sikeresen állítottak elő termoplasztikus keményítő nanokompozit filmeket, amelyek szilárdsága többszörösére nőtt az erősítés hatására. A kutatások egy jelentős része hazai vagy nemzetközi együttműködéshez, illetve pályázathoz kapcsolódik.

#### *Biomassza anyagok hasznosítását valamint műanyagok újrahasznosítását megalapozó kutatások*

Műanyagok pirolízisoldajának katalitikus halogénmentesítési lehetőségeit kutatták, ezen belül tanulmányozták, hogy miképpen alakulnak át egyes halogéntartalmú polimerek



hőbomlástermékei zeolit katalizátorokon. Megállapították, hogy az aromás gyűrűhöz kapcsolódó alkil szénatomhoz kötött klórt maradéktalanul el lehet távolítani a molekuláról nátrium zeolitok segítségével. Alkenilklorid azonban csak abban az esetben veszíti el a klór szubsztituensét nátrium zeolit katalizátoron, ha molekula-környezetében könnyen elvonható hidrogén atomok vannak. Az aromás gyűrűhöz kapcsolt klóratom a vizsgált katalizátorok közül csak - az erős krakkoló hatású - Na $\beta$  zeoliton cserélődik hidrogén atomra. A brómatomok viszont már a kisebb aktivitású NaY zeoliton is részben eltávolíthatók az aromás szénhidrogének molekuláiról.

Az ipari kender lúgos előkezelésével a rostok fellazítását lehet elősegíteni, amely így többféle alkalmazást nyerhet. Használhatják például kompozitokban szálerősítő anyagként, valamint a második generációs bioetanolgyártás alapanyagaként. Különböző körülmények között lúggal (NaOH, KOH) előkezelt kender minták összetételét és hőstabilitását vizsgálták termogravimetria-tömegspektrometria segítségével. Megállapították, hogy a lúgos kezelés egyrészt eltávolítja a hemicellulóz bizonyos funkciós csoportjait, másrészt a maradék alkálifém-ion tartalom befolyásolja a hőbomlás mechanizmusát. Összefüggést állapítottak meg a hőbomlás paramétereit, a kender összetételének változása, valamint az alkálifém-tartalom között főkomponens-analízis segítségével.

Energetikai célokra alkalmazható mezőgazdasági melléktermékek hőbomlási tulajdonságait vizsgálták. Olyan reakciókinetikai leírasmódot dolgoztak ki, amellyel az alkalmazott modellek képesek „megjósolni”, miképpen viselkedne a rendszer a mérések tartományán kívül.

### *Légkörkémiiai kutatások*

Elsőként határozták meg a metil-etil-ke-ton fotobomlási kvantumhatásfokát ( $\Phi$ ) impulzus-lézer fotolízissel 248- és 308 nm hullámhosszon, légköri körülmények között. Megállapították, hogy  $\Phi$  csökken a hőmérséklet csökkenésekor és ugyancsak csökken a nyomás növelésekor. A kvantumhatásfok adatok reakciókinetikai elemzése alapján megadták a gátmagasságot az első gerjesztett szingulett állapot ( $S_1$ ) potenciálfelületen, ami  $E_{S_1} = 398 \pm 9 \text{ kJ mol}^{-1}$  értéknek adódott. A szerzők, a témában együttműködő Japán kutatók magas szintű kvantumkémiiai számításai alapján egy szokatlan új mechanizmust javasoltak a fotobomlás mechanizmusára, amely egy hidrogén atom vándorlással valósul meg az  $S_1$  felületen. Az eredmények légkörkémiiai fontosságát mutatja, hogy azok a ChemPhysChem folyóirat légkörkémiiai különszámának címlapjára kerültek.

A 2010. évben megjelent közleményeikben beszámoltak arról, hogy a N-(4-cianofenil)-karbazol molekula - ellentétben az N-fenil-karbazollal – DMABN4-(dimetilamino)benzonitril (DMABN) típusú kettős lumineszcenciát mutat, ahol a két gerjesztett állapot közötti reakció a femtoszekundum időskálán játszódik le. A triplett gerjesztett specieszerekre vezető reakció mindkét származék esetében fontos energiavesztő folyamatnak bizonyult. Megállapították, hogy a pentaciano-(N,N-dimetil)-anilin molekula, ellentétben a várakozásokkal, nem mutat kettős lumineszcenciát, ezzel szemben a szingulett gerjesztett állapot gyors eltűnését egy rendkívül hatékony belső konverzió okozza.

### *Környezeti elektrokémia*

A már szobahőmérsékleten is folyékony szerves sóknak, az ún. ionos folyadékoknak nagy jövőt ígérnek a modern, környezetbarát elektrokémiai technológiák terén. Ezek kidolgozásához alapadatok hiányoznak, melyek meghatározására alap-elektrokémiai méréseket végeztek a következő eredményekkel.

Voltammetriás és elektrokémiai impedanciamérésekkel jellemezték az Au(100) egykristály elektródot 1-butil-3-metil-imodazólium hexafluorofoszfát (BMImPF<sub>6</sub>) elektrolitban. Meghatározták a rendszer töltésmentes potenciálját. Hőmérsékletfüggő impedanciamérésekkel a kettősréteg átrendeződésére jellemző kinetikai adatokat kaptak. Megállapították, hogy a ténylegesen mérhető effektusok nem írhatók le az ilyen rendszerek határréteg-dinamikáját értelmező kurrens elméletekkel.

Arany nanorészecskékből kialakított elektroaktív filmek kvantált elektromos feltöltésének/kisütésének kinetikáját vizsgálták négyféle ionos folyadékban, amelyek két-két anion és kation permutációjával állnak elő. Megállapították, hogy az ionos folyadék összetételétől függően a kinetikai gátlás kb. egy nagyságrendnyit változik, ami annak tulajdonítható, hogy az egyes ionos folyadékokban az ionok különböző kémiai állapotban vannak jelen.

Elektrokémiai méréseikhez mérés technikai fejlesztéseket végeztek: Három különböző, femtoamperes felbontású bipotenciosztátot fejlesztettek ki, melyeket osztrák és svájci laboratóriumokban használt pásztázó elektrokémiai mikroszkóphoz, ill. elektrokémiai atomerőmikroszkóphoz illesztettek.

#### *Poliklórozott aromások roncsolása hőhasznosítással*

Megtervezték és elkészítették a "Folyamatos üzemű technológia kifejlesztése poliklórozott aromások dehalogénezése" című NKTH projektben foglalt prototípus üzem kiviteli terveit. Ez a tevékenység magába foglalta a szerkezeti anyagok kiválasztását és azok hőállóságának és korrózióállóságának ellenőrzését a reakció körülményei között; a teljes rendszer fluid-mechanikai jellemzőinek meghatározását elméleti számítások és nagylaboratóriumi modellkísérletek útján; valamint a reakcióhők meghatározását termodinamikai számításokkal különböző típusú és klórtartalmú anyagok betáplálása esetére. A teljesen automatizált, a bruttó reakció exoterm hőjétől függően 100-200 t/év névleges kapacitású prototípus építése jelenleg már a befejezéshez közeledik. A teljes reakció hőjét két gáz-gáz és egy víz-gáz hőcserélőben fogják hasznosítani. A prototípust 2011. márciusában - áprilisában fogják tüzetesten bevizsgálni és optimalizálni. A munka a konzorciumi tagokkal együttműködésben történt.

### **b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között**

#### *Részvétel a vörösiszap-katasztrófával kapcsolatos szakértői munkában*

Az intézet kiemelkedő feladatot vállalt, és hónapokon keresztül jelentős munkát végzett a 2010. október 4-i vörösiszap-katasztrófa következtében kialakult környezeti károk felmérésében és a lakosság tájékoztatásában.

Az Országos Katasztrófavédelmi Főigazgatóság kérésére a Magyar Tudományos Akadémia szakértői csoportjának tagjaiként a Kormányzati Koordinációs Bizottság Tudományos Tanácsának munkájában, mint a munkacsoport vezetője és annak tagja vettek rész az intézet kutatói. A katasztrófa másnapján a Kolontár- és Devecser-környéki gátszakadás területén vett minták gyors elemzése alapján jelentést készítettek a helyzetről, és javaslatot tettek a legsürgősebb teendőkről: A legfontosabb lépés a lúgos hatás csökkentése volt savas jellegű anyagok kijuttatásával, például gipsz, vas-szulfát, magnézium-szulfát, esetleg kis területen ecetsav és sósav használatával. A kiterített gipsz további jótékony hatása, hogy védőréteggel vonja be a nagyon apró, mindössze néhány mikrométer szemcseátmérőjű vörösiszapot, ami ezzel megakadályozza, hogy a kiszáradt iszapot a szél elhordja.

A katasztrófa után következő hetekben-hónapokban szisztematikus analitikai mérésekkel követték a lúgosság és a toxikus nehézfém-tartalom időbeli, helytől függő és mélység szerinti

változását. Ezekbe a munkákba az intézet több laboratóriuma is bekapcsolódott. Megállapították, hogy a katasztrófa környezetében a termőterületek toxikus nehézfémekkel nem szennyeződtek, a talaj felső kb. tíz centiméteres rétegének pH-ja általában három egységgel emelkedett, de a talaj lúgossága az idő előrehaladtával (már négy hét után) természetes folyamatoknak (karbonátosodás) köszönhetően csökkent, és megközelítette az eredeti talajra jellemző pH értéket. A vörösiszappal kapcsolatos korábbi kutatásaik során kidolgozott feldolgozási technológiával a vörösiszap értékes alkotóelemeit külön-külön kinyerve azt gazdaságosan lehetne feldolgozni.

A vörösiszap-katasztrófa első napjaitól kezdődően a kárenyhítés időszakán át az intézet vezető kutatói kb. harminc alkalommal nyilatkoztak a sajtóorgánumoknak, riportokat készített velük Magyarország minden jelentősebb televízió- és rádióhálózata. Újságcikkek nagy száma közölte véleményüket, eredményeiket. Az MTA honlapján folyamatosan frissítették a témával kapcsolatos információt, az MTI részére adott közleményüket pedig a világháló sok honlapja vette át. A Science és a Nature folyóiratokban közölt riportok által pedig az ország határain túl is hallatták hangjukat. Az intézet vezető kutatóinak nagyszámú médiaszereplésével sikerült elérni, hogy a széles közvélemény hiteles forrásból tájékozódhatott az egész országot érintő és a világot érdeklő katasztrófa következményeiről és a kárenyhítés lehetőségeiről.

#### *Középiskolás diákok érdeklődésének felkeltése a kémia iránt*

Felsőoktatási intézmények felvételi statisztikáiból ismert, hogy a természettudományos tantárgyak iránti érdeklődés jelentősen csökkent az utóbbi években. Ennek a negatív tendenciának a fékezése érdekében az intézet különböző programokban vett részt.

Az intézet hét kutatója hat budapesti középiskolába látogatott el, ahol népszerűsítő előadásokat tartottak a kémia néhány új területéről a következő témákban: a szén allotróp módosulatai, a biomassa anyagok, a műanyagok újrahasznosítása, a régészeti kutatásokat segítő kémiai eszközök, a legkorszerűbb fogtömő anyagok.

Rendhagyó kémiaórát tartottak egy középiskolai osztálynak. A tanulók ellátogattak az intézet egyik analitikai laboratóriumába, ahol saját kezűleg határozhatták meg a csapvíz összetevőit. Nyílt nap keretében „Tanultunk az elektronszerkezetről. És az mire jó?” címmel egy gimnáziumi osztály diákjainak spektroszkópiai módszereket mutattak be méréseken keresztül.

Az Eötvös Loránd Tudományegyetem középiskolások részére rendezett „Alkímia ma” sorozatán az intézet egyik vezető kutatójától a „Polimer korszakban élünk: a műanyagoktól a számítógépes chipig, az eldobható napelemekig, a nanotechnológiáig, a génebézészetig, gyógyszerekig és a környezetvédelemig” című előadást hallhatták. A Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem nyílt napján az "Anyagtudomány: a polimer kompozitok rejtett világa" címmel tartottak előadást a BSc, illetve MSc képzésre jelentkező tanulók és hallgatók számára.

#### *Tehetséggondozás*

2010-ben második alkalommal szervezte meg az intézet az „AKI kíváncsi kémikus” kutatótábort, melyen a 25 hazai és a 2 határon túli településről 35 diák vett részt. A kutatótáborba pályázattal jelentkezők közül kiválasztott legtehetségesebb diákok 19 modern kutatási témán dolgozhattak egy héten keresztül témavezetőik irányításával. A kutatótáborhoz az MTA Kémiai Kutatóközpontnak mind a négy intézete hozzájárult témáival és témavezetőivel. A Kémiai Kutatóközpont Anyag- és Környezetkémiai Intézetében 12 diák kutatott az alábbi tématerületeken: reakciósebességek vizsgálata lézerekkel, a világító molekulák világa, archeometriai vizsgálatok, biomassa anyagok, fullerének, lebontható polimer kompozitok, hiperelágazásos és lineáris polimerek előállítása, biokompatibilis polimerek.

### *Ismeretterjesztés, az intézet népszerűsítése*

Az intézet munkatársai egy könyvet és 11 ismeretterjesztő folyóiratcikket jelentettek meg. Az utóbbiak közül három a Magyar Tudományban, egy a Környezetvédelemben, egy az OTKA Magazinban, hat pedig a Kémiai Panoráma című folyóiratban jelent meg.

Az MTV1 Delta című műsorában a polimerek környezeti hatásairól és újrahasznosításáról esett szó az intézet kutatóinak közreműködésével.

Közvetve az intézet ismertségéhez járult hozzá az a 7 cikk is, ami a 2009. évi „AKI kíváncsi kémikus” diákrésztvevőinek tollából született 2010-ben az Élet és Tudomány, a Műanyag és Gumi című folyóiratokban és a Magyar Kémikusok Lapjában.

### **III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2010-ben**

#### *Hazai kapcsolatok*

Az intézet hazai kapcsolatrendszerének legfontosabb pillére az egyetemekkel való közös kutatómunka. Két egyetemmél, a Pannon Egyetemmél funkcionális nanorészecskék témában és a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetemmél (BME) műanyagok szerkezet – tulajdonság összefüggéseinek vizsgálatában több éve tart és évenként megújul a kapcsolat. Az intézet Alkalmazott Polimer Fizikai Kémiai Osztálya a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék közös szervezeti egysége, a Pannon Egyetem Műszaki Informatikai Karának Műszaki Kémiai Intézetével pedig közös professzori laboratóriumot működtetnek. A 2010-ben kötött szerződés alapján ebbe a sorba lépett az intézet és az Eötvös Loránd Tudományegyetem új közös laboratóriuma, a Környezeti Kémiai-Fizikai Laboratórium. Nem formális együttműködésben a Semmelweis Egyetemmél sokkomponensű biológiai rendszerekben végeztek analitikai vizsgálatokat a táplálkozásunk és az egészségi állapotunk összefüggéséről. A BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszékkel közös OTKA projekten dolgoznak, amelyben a cellulóz alapú bioetanol gyártás hatékonyabbá tételéhez szereznek ismereteket.

Az intézet munkatársai magas óraszámokban vettek részt az egyetemi oktatásban. Graduális és posztgraduális előadásokat tartottak, szemináriumokat és laborgyakorlatokat vezettek, továbbá BSc, MSc és PhD hallgatók munkáit irányították a BME Vegyész- és Biomérnöki Karán és az Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Karán. A Semmelweis Egyetemen két PhD hallgató témáját vezetik.

Az egyetemek mellett ugyancsak fontosak a kapcsolatok az MTA kutatóhálózatán belüli intézetekkel, különösen a Kémiai Kutatóközpont intézeteivel.

Tíz magyarországi kis- és középvállalat megbízásából az intézet kutatási és fejlesztési feladatokat, méréseket végzett, többen közülük igénybe vették az intézet akkreditált laboratóriumának szolgáltatásait. Nyolc nagyvállalattal - melyek közül kettő külföldi, kettő pedig multinacionális - áll kapcsolatban az intézet. Jellemzően a tőlük kapott feladatok nagyobb volumenűek és gyakran tudományos igényűek. A megbízási szerződések teljesítésekor az anyagi bevétel mellett esetenként közös publikációkban megmutatkozó tudományos eredmény is elérhető.

#### *Nemzetközi kapcsolatok*

Az előző években megkötött és 2010-re áthúzódó kétoldalú egyezmények keretében végzett munkán felül, és a több éve folyó nem formális együttműködéseiken túl 2010-ben az alábbi újonnan indult projekteken dolgoztak az intézet kutatói.

MTA kétoldalú egyezmény keretében szabad gyökök és elemek szerepét vizsgálták gyulladásoos betegségekben és tumorokban a rigai (Lettország) Stradins University Biokémiai laboratóriumával közösen.

A kristályos szerkezet és a tulajdonságok kapcsolata polipropilénben témakörön belül módszert dolgoztak ki a göcképzők hatékonyságának megállapítására polipropilénben az osztrák Borealis GmbH megbízásából. Oldható göcképző hatásmechanizmusát vizsgálták polipropilénben a svájci Ciba céggel együttműködve.

Polimerek stabilizátorainak hatásmechanizmusát határozták meg a francia Clariant Huningue S.A. vállalattal és a Tiszai Vegyi Kombináttal (TVK) közös munkában.

A társított polimerek közül a töltőanyagot tartalmazó polipropilénben vizsgálták a mikromechanikai deformációs folyamatokat a Leobeni Egyetem (Ausztria) kutatóival. A poliamid6/montmorillonit rétegszilikát nanokompozitok deformációs mechanizmusát a Liege-i Egyetemmel (Belgium) közösen tanulmányozták.

Egy szimpóziomot és egy műhelybeszélgetést szerveztek az intézet kutatói 2010-ben. A „Szabad gyökök és mikroelemek” című miniszimpóziom 59 aktív résztvevője 23 előadásban számolt be a témában elért legújabb eredményeiről. A termikus szórással kialakított kerámia bevonatok volt a tárgya a Magyar-román Tudományos Műhelynek.

A Marie Curie Akció jóvoltából két fiatal kutató vett részt a „Nanoszerkezetű anyagok és membránok az egészségügyben és az ivóvíz ellátásban” témájú iskolán, melyet a Twentei Egyetem szervezett. Fotokróm festék kapszulázása és textilhez rögzítésével foglalkozott az a munkatárs, aki a Maribori Egyetem vendégkutatója volt. Az intézet egyik vezető kutatója a nanofázisú kotérhálók témájú közös munkájuk miatt utazott a Freiburgi Egyetemre (Németország), egy fiatal kutató pedig biomolekulakkal kapcsolatos irányított polimerizációval foglalkozott a Bázeli Egyetemen (Svájc). Kettős lumineszcenciát mutató rendszerek fotofizikáját kutatta egy munkatárs a Göttingeni Egyetemen (Németország). Hosszú évek óta eredményes munkát folytat az intézet két kutatója az Ulmi Egyetemen (Németország) és a Berni Egyetemen (Svájc), ahol elektrokémiai méréseket végeznek, illetve nagyérzékenyséjú műszereket fejlesztenek.

Magnézium-titán (Mg-Ti) ötvözet plazmatermikus előállítására és jellemzése céljából érkezett az intézethez egy török kutató a Közeli-Keleti Műszaki Egyetemről. Az intézet vendége volt a Román Akadémia Makromolekuláris Kémiai Intézetének a kutatója, aki nagy hőstabilitású poliimidekkel foglalkozott. A Hawaii Egyetem (USA) professzora a biomassa hasznosítás kutatása témával rendszeresen visszatérő vendége az intézetnek. A troposzféra halogénkémiaiájában fontos szerepet játszó elemi reakciók kinetikáját és mechanizmusát vizsgálta intézetünkben a Wroclawi Orvosi Egyetem (Lengyelország) munkatársa.

#### **IV. A 2010-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása**

Fotokróm festék kapszulázása és textilhez rögzítése témájú OTKA pályázatban ez ideig fotokróm festékekből etil-cellulóz és poli(metil-metakrilát) polimerek felhasználásával nanokapszulákat állítottak elő, melyek segítségével jelentősen megnövelték a festékek ultraibolya (UV) abszorbanciájának változását, és fáradással szembeni ellenállását. A projekt ezt követő szakaszában egyszerű eljárással textilekhez fogják rögzíteni a kapszulákat. A projektre 2010-ben 10 millió forintot költöttek, a teljes szerződésállomány 22,3 M Ft.

OTKA pályázat keretében olyan amfifil polimer kotérhálókát állítanak elő, melyek nanohibrid anyagok templátjai és egyben komponensei lesznek. A teljes szerződésállomány 23,8 M Ft, 2010-ben ebből 7,5 M Ft-ot használtak el.

Fizikai és kémiai előkezelések hatását vizsgálják lignocellulózok összetételére és termikus tulajdonságaira. Az OTKA projektre az első évben 0,7 M Ft-ot költöttek, a teljes támogatási keret 7 M Ft.

A Baross Gábor Program 57,5 M Ft-tal támogatta egy plazma szinterelő berendezés beszerzését. A berendezéssel nanoszerkezetű műszaki kerámiákat állíthatnak elő újszerű szinterelési módszerekkel.

#### V. A 2010-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Feczkó T, Kokol V, Voncina B: Preparation and characterization of ethylcellulose-based microcapsules for sustaining release of a model fragrance. *Macromolecular Research*, 18 (7): 636-640 (2010)
2. Cakmak G, Károly Z, Mohai I, Öztürk T, Szépölggyi J: The processing of Mg-Ti for hydrogen storage; mechanical milling and plasma synthesis. *International Journal of Hydrogen Energy*, 35: 10412-10418 (2010)
3. Jerabek M, Major Z, Renner K, Móczó J, Pukánszky B, Lang RW: Filler/matrix-debonding and micro-mechanisms of deformation in particulate filled polypropylene composites under tension. *Polymer*, 51: 2040-2048 (2010)
4. Renner K, Móczó J, Suba P, Pukánszky B: Micromechanical deformations in PP/lignocellulose filler composites: Effect of matrix properties. *Composites Sciences and Technology*, 70: 1141-1147 (2010)
5. Jakab E, Mészáros E, Borsa J: Effect of slight chemical modification on the pyrolysis behavior of cellulose fibers. *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*, 87: 117-123 (2010)
6. Nádasdi R, Zügner GL, Farkas M, Dóbbé S, Maeda S, Morokuma K: Photochemistry of methyl ethyl ketone: Quantum yields and S1/S0-diradical mechanism of photodissociation. *Chemphyschem: a European Journal of Chemical Physics and Physical Chemistry*, 11: 3883-3895 (2010)
7. Mertens SFL, Mészáros G, Wandlowski T: Dynamics of ionic liquid mediated quantised charging of monolayer-protected clusters. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 12: 5417-5424 (2010)

**Az MTA KK Anyag- és Környezetkémiai Intézetének  
kiemelten sikeres kutatási területei 2010-ben**

*Egyedi molekulák elektromos vezetőképességének vizsgálata szobahőmérsékleten elektrokémiai közegben*

Az utóbbi években fontos kutatási terület az egyedi, jellemzően szerves molekulák elektromos vezetőképességének vizsgálata. A téma az elektronikai eszközök méretének további csökkentését, illetve újfajta – elsősorban az önszerveződésen alapuló – gyártási eljárások kifejlesztését célozza meg, a szilícium és egyéb félvezető anyagok kiváltása útján. A szerves molekulák szénláncai összetett térbeli struktúrák kialakítását teszik lehetővé, amihez különféle funkciós csoportokat illesztve „testreszabott” tulajdonságok érhetők el. Az önszerveződés jelensége, vagyis amikor a molekulák maguktól bizonyos szabályos sík- vagy térbeli alakzatokat vesznek föl, fölhasználható szabályosan ismétlődő egységekből álló elektronikus eszközök, pl. memóriacellák, képérzékelők, stb. előállítására.

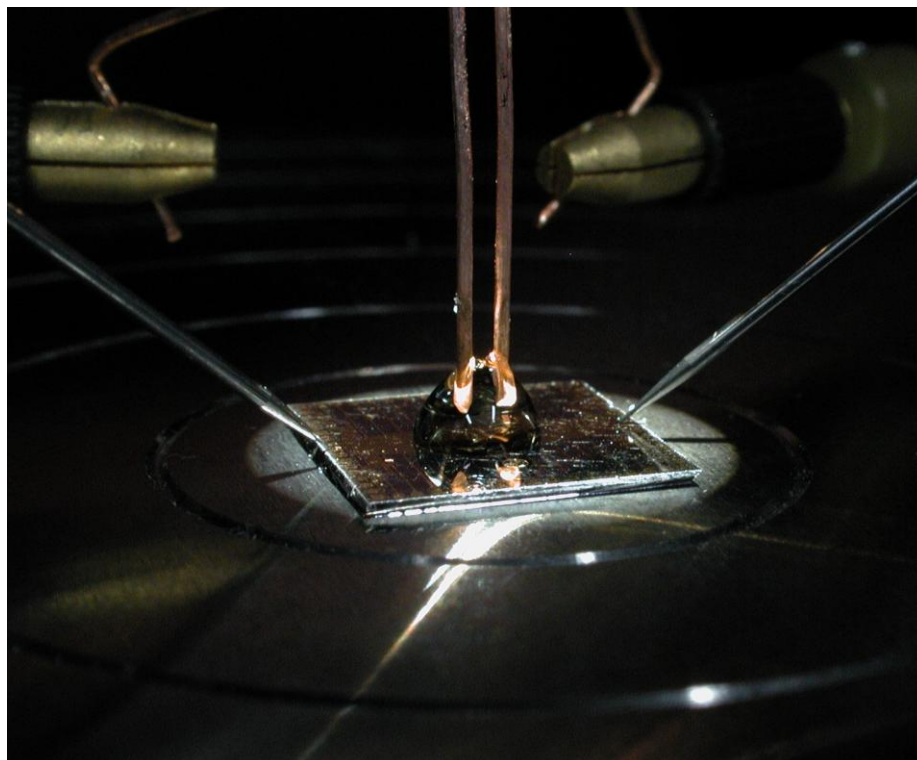
Külön érdekes kérdés az elektroaktív molekulák vizsgálata elektrokémiai közegben, ekkor u.i. elektrokémiai úton a redox centrummal rendelkező molekulák vezetőképessége befolyásolható („electrochemical gating”), ami kapcsolóelemek, tranzisztorok, memóriacellák kialakítását teszi lehetővé.

A témába német ill. svájci együttműködő partnerek révén kapcsolódott be az intézet, ahol a feladat különösen érzékeny mérőberendezés és flexibilis mérésvezérlés kialakítása volt. Az egyedi molekulák vezetőképességének vizsgálatánál két fő probléma lép fel. Az egyik a molekuláris „krokodilcsipeszek” – vagyis nanoméretű kontaktuspárok – kialakítása, amelyek közé a molekulákat be lehet fogni. A másik probléma a szobahőmérsékleten történő mérésből adódik. Amíg kis hőmérsékleten – az abszolút nulla fok közelében – az ehhez egy befogott molekula órákon, napokon keresztül stabilan vizsgálható, addig szobahőmérsékleten jellemzően csak másodpercekre tartható stabilan a kontaktusok között. Így a vezetőképesség mérések viszonylag gyors áramtranzienseken alapulnak, ahol egyaránt jelen vannak a molekulák vezetésének megfelelő nano- és pikoamper, és a fémes kontaktusnak megfelelő mikro- és milliamper nagyságrendű tartományok. Az ilyen gyors, nagy dinamikájú áramtranziensek rögzítése komoly kihívást jelentett a kutatók számára.

Az áramtranziensek rögzítésére két új áramköri megoldást dolgoztak ki. Az egyik az ún. hangolható bipoláris logaritmikus áram-feszültség átalakító, amely fokozatok nélkül kb. 13 nagyságrendnyi dinamikus tartományban teszi lehetővé az árammérést néhány femtoamper felbontás mellett. A megoldás egyediségét a hangolhatóság jelenti, amivel be lehet állítani az optimális egyensúlyt a felbontás és a konverter időállandója közt. A másik megoldás a többkimenetű lineáris áram-feszültség átalakító, amely ugyan kisebb dinamikus tartományt szolgáltat – kb. 8-9 nagyságrendet –, viszont méretben lényegesen kisebb, így pl. sikerült beépíteniük egy pásztázó alagútmikroszkóp (STM) fejébe, ami új funkciók adaptálását tette lehetővé. A fenti megoldásokat fölhasználva egyedi készülékeket építettek, amelyek képesek voltak molekuláris vezetés mérésére elektrokémiai közegben.

A molekuláris kontaktusokat kétféle konfigurációban használták. Az egyik lehetőség az ún. mechanikusan szabályzott szakítófelület (mechanically controlled break junction), amikor a kontaktusokat periodikusan összeérintik, majd újra szétválasztják (elszakítják) – ez legegyszerűbben pásztázó alagútmikroszkópban valósítható meg. Ha a kontaktust körülvevő közegben, vagy a kontaktusok felületén adszorbeált formában jelen vannak a vizsgálni kívánt, megfelelő szorpciós csoportokkal – horgonycsoporttal – rendelkező molekulák, akkor a ciklusok egy részében a szakítások során rövid időre hidat alkothatnak a fém kontaktusok

közt, ami a lecsengő áramtranziensekben lépcső formájában jelentkezik. Több ezer ilyen molekulaszakításból készített statisztikából a kérdéses molekuláris vezeték meghatározható.



Nanokontaktusok elektrokémiai előállítása szilícium lapka felületén

A molekuláris kontaktusok konfigurációjára egy másik lehetséges megoldás mikroelektronikai litográfiával, szilíciumlapka felületén kialakított elektódokat használ. A litográfia felbontása messze nem elegendő a molekuláris kontaktusokhoz, ezért azok még más módszerekkel, elektrokémiai marással, fémleválasztással, vagy elektromigrációval (tk. egy nanodrót ellenőrzött kiégetésével) további megmunkálást igényelnek. Az így kialakított „nanorészekben” a molekulák csapdázhatók és vizsgálhatók. Az intézet munkatársai által épített berendezés használni tudja mind az elektrokémiai, mind az elektromigrációs technikát a kontaktuspárok végleges kialakítására.

A megépített mérési összeállítások segítségével a német és svájci partnerek különböző szerves molekulák vezetését vizsgálták. Bizonyos esetekben, elsősorban hosszú alkénláncok jelenlétében, egy molekula többféle vezetést is mutathat, feltehetően a láncban fellépő diszlokációk (törések) miatt. Igazolták, hogy bizonyos viologén származékok vezetése elektrokémiai közegben jelentősen változik attól függően, hogy milyen az oxidációs állapotuk.

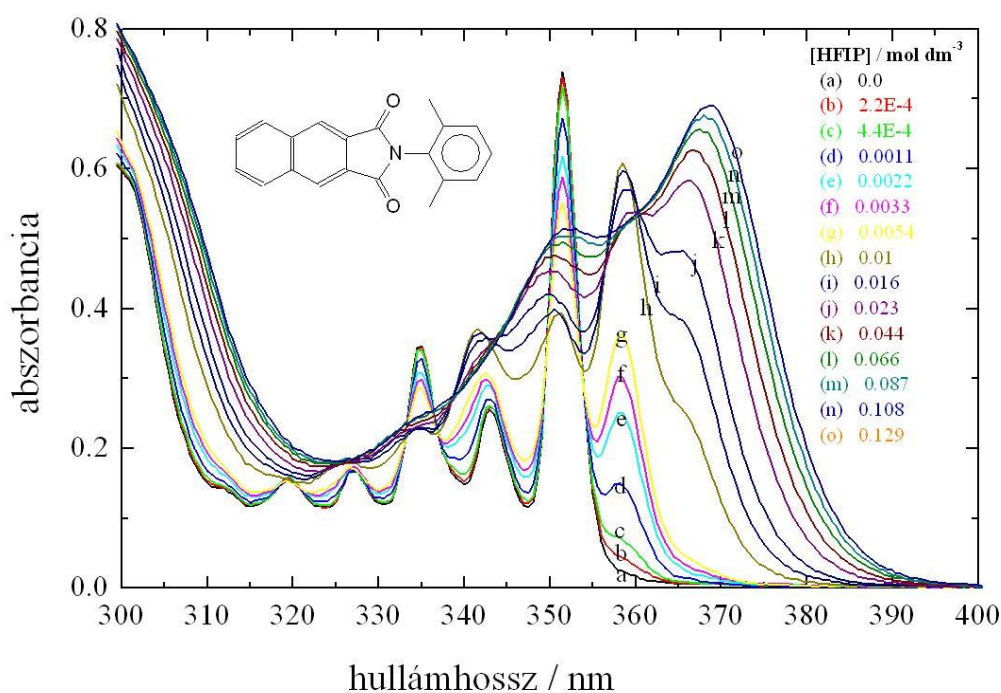
#### *A gerjesztett molekulák hidrogénhíd-bázicitása: koncepció, származtatás és felhasználás*

A szerves vegyületek egy része hajlamos arra, hogy alkalmas partnerekkel olyan komplexeket képezzenek, amelyekben az alkotórészeket hidrogénhíd tartja össze. A kötésnek a szerves molekula felőli hídfője egy nagy elektronegativitású atom, többnyire oxigén vagy nitrogén, egy úgynevezett Lewis-bázis centrum. A kötés hidrogén atomját és a másik hídfőt a partnermolekula szolgáltatja, például alkoholok HO csoportja formájában. Azt, hogy egy molekula mennyire hatékony hidrogénhíd akceptor, a hidrogénhíd-bázicitása jellemzi. A

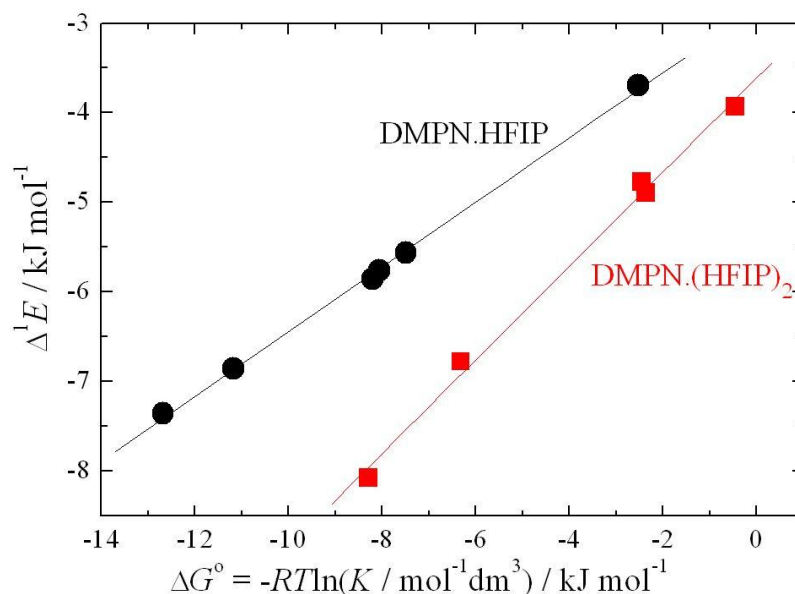


komplekképződés sokszor jelentősen megváltoztatja a szerves molekula viselkedését. Különösen érdekes az, amikor a hidrogénhíd-képződés következtében megváltozik a molekula fényelnyelést követő viselkedése. A kutatócsoport ilyen folyamatok vizsgálatában ért el jelentős eredményeket.

Aromás molekulák komplexeit állították elő szisztematikusan változó tulajdonságú alkoholokkal, és spektroszkópiai úton megvizsgálták, hogy milyenek a fényelnyelés nyomán keletkező komplexált, illetve komplexálatlan szerves molekula szingulett gerjesztett állapotának tulajdonságai. Megállapították, hogy az alap- és gerjesztett állapot energiakülönbsége megváltozik a komplexálódás hatására, és ennek a mértéke egyenesen arányos a komplexálódás egyensúlyi állandójának logaritmusával. Megmutatták, hogy az arányossági tényező a szingulett gerjesztett állapotú molekula hidrogénhíd-bázicitásának relatív változását adja meg (1. és 2. ábra). Ezzel a módszerrel a világon először tanulmányozni tudták, milyen tényezők befolyásolják a szingulett és a triplett gerjesztett állapotban levő (pl. az 1. ábrán bemutatott) szerves molekulák hidrogénhidas komplexálódását. Azt találták, hogy a szingulett esetében az alapállapotú molekulához képest jelentősen megnőtt a komplexképző hajlam, ugyanakkor a triplett speciesznél annak kismértékű csökkenését tapasztalták.



1. ábra. Az *N*-(2,6-dimetil-fenil)-2,3-naftalimid (DMPN) abszorpciós színeképei *n*-hexánban különböző 1,1,1,3,3,3-hexafluoro-2-propanol (HFIP) koncentrációk mellett

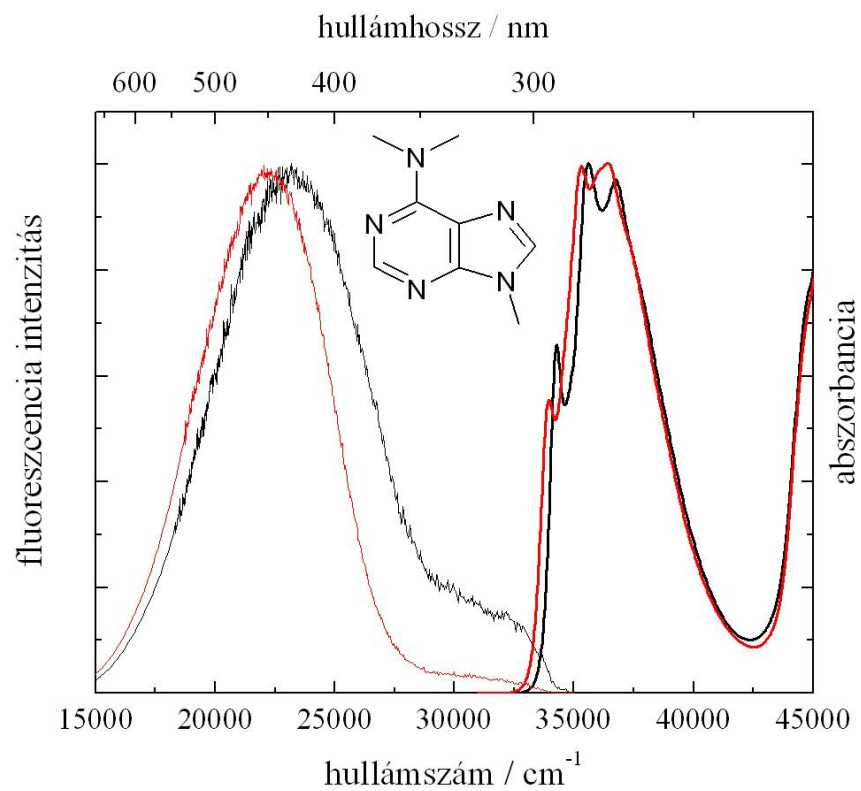


2. ábra. A DMPN – HFIP – *n*-hexán rendszerben mérhető szingulettenergia-változás a szabadentalpia-változás függvényében

Időfelbontott fluoreszcencia-lecsengési mérések segítségével meghatározták a szingulett gerjesztett állapotban lejátszódó komplexálódási reakciók sebességi állandóit. A gerjesztett állapot hidrogénhíd-bázicitási adatait felhasználva származtatni tudták a komplexálódás szabadenergia-változását. A kapott összefüggéseket felhasználva az alapállapotban lejátszódó H-hidas komplexek képződési és disszociációs reakcióinak sebességi állandóira tudtak becslést adni, amelyek pl. a biológiai rendszerekben alapvető jelentőségűek, de mérésük közvetlenül nem lehetséges. A H-hidas komplexek képződése során a várakozás szerint a partnerek minden találkozása reakcióra vezet, azaz a folyamat diffúziókontrollált. A vizsgálatok azt a meglepő eredményt hozták, hogy a várakozásokkal ellentétben e reakciók lényegesen lassabban játszódnak le, mint egy diffúziókontrollált reakció.

Egy másik tanulmányban megmutatták, hogy a gerjesztett állapotú molekulák hidrogénhíd-bázicitása ismeretében lehetőség van annak értelmezésére, hogy a komplexek abszorpciós és fluoreszcencia színeképei hogyan függenek az oldószertől. A hidrogén-kötés hatásának korrekciója után a dipól – oldószert kölcsönhatás tisztán tanulmányozhatóvá vált. Megállapították, hogy a gerjesztett komplexek nagyobb dipólus-momentummal jellemezhetőek, mint a megfelelő komplexátlatlan specíesek.

A nukleinsav származékok fotofizikáját is jelentősen módosítja, ha a molekulák hidrogénhidas komplexeket képeznek. A nukleinsavak sugárkárosodásának leírásához viszont csak a hidrogén-kötés komplexek tulajdonságainak megismerésén át vezethet járható út, mivel a komplexátlatlan molekula valós rendszerekben nem szokott előfordulni. A kutatócsoport eredményei szerint például az úgynevezett szabályos kettős lumineszcenciát mutató 6-(dimetilamino)-9-metil-purin (3. ábra) gerjesztett állapotainak hidrogénhíd-bázicitása az alapállapothoz viszonyítva jelentősen megnő, amely hatás nagymértékben befolyásolja a gerjesztett állapotú folyamatok sebességét.



3. ábra. A 6-(dimetilamino)-9-metil-purin (fekete) és HFIP-vel egyszer komplexált formájának (piros) abszorpciós és fluoreszcencia színeképei *n*-hexánban

## VI. A kutatóhely főbb mutatói 2010-ben

A kutatóhely neve: Kémiai Kutatóközpont, Anyag- és Környezetkémiai Intézet

### 1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség <sup>1</sup> :	113	Ebből kutató <sup>2</sup> :	48
PhD, kandidátus:	22	MTA doktora:	9
		Rendes tag és levelező tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma <sup>3</sup> :			2
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma <sup>4</sup> :			18

### 2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>5</sup> :			83
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>6</sup> :			68
Tanulmány, cikk <sup>7</sup> hazai tud. folyóiratban	magyarul:	7	idegen nyelven: 0
<i>külföldi</i> folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven: 43
<i>Ebből</i> impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven: 35
Könyv <sup>8</sup>	magyarul:	0	idegen nyelven: 1
Könyvrész, könyvfejezet <sup>9</sup>	magyarul:	2	idegen nyelven: 2

### 3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor <sup>10</sup> :	86,56	Összes független hivatkozás száma:	1581
Összes hivatkozás száma <sup>11</sup> :	1727		

### 4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2010-BEN

Tud. fokozat megszerzése <sup>12</sup> :	PhD:	3	MTA doktora:	0
------------------------------------------	------	---	--------------	---

### 5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma <sup>13</sup> :	1	külföldi oltalmak száma <sup>14</sup> :	1
------------------------------------------------------	---	-----------------------------------------	---

### 6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma <sup>15</sup> :			41
		poszterek száma:	51
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	20	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	14
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>16</sup> :	0		

### 7. A HAZAI FELSOÓKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>17</sup> :			20
Témavezetések száma: TDK munka:	12	Diplomamunka (BSc):	16
Diplomamunka (MSc):	12	PhD:	28

### 8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>18</sup> :		441,11	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>19</sup> :	5	Teljes saját bevétel:	481,06 MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		3,61	MFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			14
		A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	53,11 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			13
NKFP:	5	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	129,43 MFt
Egyéb:	8	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
ÚMFT témák száma:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma:			2
EU forrásból:	2	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	13,47 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási bevétel:			0 MFt

## I. A kutatóhely fő feladatai 2010-ben

Az intézet fő kutatási feladata az MTA Kémiai Kutatóközpont E-1287/2010. sz. Alapító okirat módosítása szerint 2010. évben a következő volt:

- innovatív, átfogó kutatások folytatása a kémia és a hozzá kapcsolódó tudományterületeken, amelyek különösen a biomolekuláris kémiára, elsősorban a gyógyszerkémiai vagy finomkémiai szempontból fontos szintézismódszerek kidolgozására, az eredeti heterociklusos szerves vegyületek és szénhidrátok előállítására, ismert és nem ismert célmolekulák alapvető biokémiai és fiziológiai szerepének vizsgálatára, továbbá új diagnosztikai lehetőségek feltárására irányulnak.

Az intézet kutatási alapeladataihoz kapcsolódóan egyéb feladatokat is ellátott, így:

- tevékenységével összefüggésben tudományos, szak- és ismeretterjesztő kiadványokat jelentetett meg;
- együttműködött a kutatóközponti, illetve más hazai kutatóintézetekkel, velük közös kutatási programokban vett részt, kapcsolatokat tartott fenn és létesített más országok tudományos intézményeivel, nemzetközi tudományos társaságokkal; elősegítette a magyar kémiai kutatások jelenlétét a tudományág nemzetközi életében;
- hazai és nemzetközi tudományos programokat és konferenciákat szervezett, pályázatokat írt ki;
- szorgalmazta és segítette a tudományos kutatások eredményeinek társadalmi és gazdasági hasznosítását;
- felsőoktatási intézményekkel együttműködve részt vett az oktatómunkában, közös kutatási, képzési és továbbképzési feladatokat látott el;
- hazai és nemzetközi kutatási pályázatokon vett részt;
- kutatási megbízási szerződések keretében K+F-tevékenységet végzett;
- hozzájárult a kutatóközponti szakkönyvtár működtetéséhez.

## II. A 2010-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

### a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

#### *Heterociklusos vegyületek szintézise és vizsgálata*

Megoldották a fenotiazinnal szubsztituált diének hidrobórlását, az így képződő új hidroxiszármazékokról kimutatták, hogy azok multidro-g-rezisztenciára gyakorolt hatása lényegesen megnő az eddig vizsgált rokon vegyületekéhez viszonyítva.

Külföldi kooperáció keretében extrém rezisztens tuberkulózis baktériumok (XDR-TB) ellen hatékony heterociklusos vegyületeket állítottak elő és teszteltek. Egy lehetséges „lead”-vegyület kiválasztására a közeljövőben sor kerülhet.

Szintetizáltak egy új, bőrtartalmú heterociklust: a tetrazolo[5,1-f][1,2]azaborinint.

Jelentős fluoreszcens hatású izokinolin-származékokat ismertek fel. Az előállításukra jól járható szintézisutat dolgoztak ki.

#### *Biológiailag aktív szénhidrátok szintézise*

Elvégezték a korábbi években kifejlesztett alán-Strecker-reakció alkalmazásával képződött diasztereomer glikoaminonitrilek abszolút konfigurációjának meghatározását. Az aminonitrilek  $^1\text{H}$  NMR-spektrumának vizsgálata egyértelművé tette, hogy a királis indukcióhoz használt S(-)-1-feniletiamin fenilcsoportja a diasztereomerek új aszimmetriacentrumán lévő protonokra eltérő mágneses árnyékoló hatással van. Ennek alapján megállapították, hogy a *Re*-oldali addíció termékeiben a fenilcsoport árnyékoló hatása 0.2-0.5 ppm értékkel kisebb kémiai eltolódásokat eredményez. Ezen eredményeket a kristályosítható permetil-glikoaminonitrilek kristályszerkezete igazolta. Az alán-Strecker-reakcióban képződött diasztereomerek közül mindig az volt túlsúlyban, amelyekben az új sztereocentrum kémiai eltolódása kisebb volt. Az S(-)-1-feniletiaminnak az alán-Strecker-reakció nukleofil addíciós lépésében tapasztalt 1,3-aszimmetrikus indukciója a Felkin-Ahn-moddal írható le.

#### *Oligoszacharidok reakcióinak tanulmányozása*

A heparin hatás-szerkezet összefüggés tanulmányozására újabb heparin tetraszacharidot szintetizáltak biológiai vizsgálatok céljára. Ugyancsak biológiai vizsgálatokhoz, további azacukortartalmú heparin-diszacharidokat, a heparánáz enzim új típusú inhibitorait, állítottak elő.

Folytatták a glikozilezési reakciók sztereokémiai eredményét befolyásoló tényezők szisztematikus vizsgálatát. Részletesen vizsgálták a szubsztituensek hatását *D-galakto*, *D-manno*, *D-xilo* és *L-ido* konfigurációjú monoszacharidoknál is. Megállapították, hogy az eredmények a korábban kidolgozott elméleti modell segítségével jól értelmezhetők e vegyületcsoportok esetén is.

Anomális reakciókat tapasztaltak néhány szénhidrát-benzilidén-acetál redukív gyűrűnyitása során. A reakciókat a reagensnek szomszédcsoporthésszel történő kelát-képződésével értelmezték.

Neurotoxicitási vizsgálatok céljára több, szénhidráttal módosított dendrimerszármazékot állítottak elő.

#### *Organokatalitikus reakciók tanulmányozása*

Az elmúlt hat év során a kutatócsoport egy ún. organokatalitikus kutatási programot alakított ki, amelynek célja kisméretű szerves molekulák katalizátorokként való alkalmazása szerves folyamatokban. Ez az alapjaiban biomimetikus koncepció a kémiai kutatások úttörő területei közé tartozik, célja a katalízis fémektől való függésének csökkentése és a folyamatok környezetkímélőbbé tétele.

2010-ben bifunkcionális négyzetamid katalizátorokat fejlesztettek ki. Vizsgálták a katalizátorok működésének mechanizmusát. Az új katalizátorokat dia- és enantioszelektív folyamatokban alkalmazták. Fémmentes hidrogénezésre alkalmas frusztrált Lewis-pár katalizátorokat hoztak létre a méretkizárásos elv alapján.

### *Természetes szerves anyagok szintézise*

Az indolvázis alkaloidokat és alkaloidszerű vegyületeket széles körben használják a gyógyászatban. A kutatócsoport a Richter Gedeon Nyrt.-vel együttműködve már hosszú évek óta foglalkozik ilyen típusú vegyületek szintézisével. 2010-ben egy egyszerű eljárást dolgoztak ki 3,4-diszubsztituált indolból történő sztereoszelektív gyűrűzárásra. Ezek a vegyületek ergolinvázis alkaloidok és alkaloidszerű vegyületek előállítására alkalmasak.

### *Nukleotidkémiai kutatások*

L-arabinózból kiindulva lineáris szintézis-stratégia alkalmazásával 12 új bázismódosított, ill. két referencia pirimidin-L-nukleozidot állítottak elő tumorgátló és antivirális hatásuk vizsgálata céljából. Az említett nukleozidok citosztatikus, ill. anti-leukémiás hatásának tanulmányozása jelenleg folyamatban van. További 6 új, mind bázis-, mind a cukorrészen egyaránt módosított származékot is szintetizáltak. Az említett 20 vegyület széles spektrumú antivirális hatásvizsgálatára nemzetközi együttműködés keretében kerül sor. Tekintve, hogy a D-nukleozidoknál lényegesen nagyobb metabolikus stabilitással és kisebb toxicitással rendelkező L-nukleozidok között számos jelentős és szelektív antivirális hatású analagon található, így az új vegyületek is potenciális antivirális és/vagy tumorgátló szernek tekinthetők.

### *Neurokémiai kutatások*

Azonosították az új típusú, glutaminsav-felvétellel közvetlenül kiváltható  $\gamma$ -amino-vajsav (GABA) kibocsátási folyamat fiziológiai következményét és a GABA forrását. A NANOSEN9-projekt támogatásával kifejlesztették az ezen folyamatok közvetlen megfigyelésére alkalmas nanoszenzor "proof-of-concept" prototípusát. Kapcsolódóan – a NANOTRANSPORT projekt keretében – kidolgozták szerves nanohordozók funkcionális neurotoxicitásának új vizsgálati módszereit.

### *Molekuláris farmakológiai kutatások*

Kötődésvizsgálatokkal és molekulamodellezéssel az imatinib (a Glivec márkanevű leukémia-ellenes gyógyszer hatóanyaga)  $\alpha_1$ -savas glikoprotein (AGP) szérumkomponensen talált erős és szelektív kötődésére kaptak információt. Kimutatták az antimaláriás hatású atovaquone erős kötődését humán szérumalbuminon (HSA).

Kimutatták két emberi akut fázis plazmafehérje, az  $\alpha_1$ -savanyú glikoprotein és a szerin proteáz gátló  $\alpha_1$ -antitripszin ún. chaperon aktivitását. Bizonyították, hogy az  $\alpha_1$ -savanyú glikoprotein fehérjeaggregációt gátló funkciója felfüggeszthető olyan gyógyszerekkel, amelyek a fehérje kötőzsebének nagy affinitású ligandumai. Ezen fehérjék chaperon aktivitásának felismerése két új taggal gyarapítja az extracelluláris tér kóros fehérjeaggregációval szembeni védelmét biztosító dajkafehérjék csoportját, és egyben új megvilágításba helyezi élettani és kóros folyamatokban játszott szerepüket.

Számos királis hatóanyag esetén kimutatták ciklodextrin-származékok, illetve az ezekből újonnan szintetizált monoamino-derivátumok királis elválasztóképességét kapilláris elektroforézissel.  $\beta$ -Laktámok és antimaláriás gyógyszerek esetében új királis elválasztásokat dolgoztak ki. A kölcsönhatások vizsgálata és a kidolgozott módszerek hozzásegítettek ahhoz, hogy új, hatékony, ciklodextrin alapú állófázisokat fejlesszenek ki, melyek alkalmazhatók fontos gyógyszer-hatóanyagok sztereoszelektív analitikájában és preparatív elválasztásában.

Elválasztástechnikai módszereket dolgoztak ki nanoszenzor-komponensek vizsgálatára és jellemezték a szenzor fluoreszcenciás sajátosságait.

Neuroszteroidok szelektív hatását mutatták ki GABA-A receptor alfajtákra.

#### *A metabolizmus folyamatainak vizsgálata*

Folytatták az ABC transzportereken (ABCC2/3; ABCB11; ABCG2) lejátszódó gyógyszer-interakciók vizsgálatát humán és patkány hepatocita szendvicskultúrában, kibővítve az „uptake” transzportereken (NTCP, OATP) történő interakciók vizsgálatával. Megállapították, hogy a patkány hepatociták uptake transzportereinek expressziója és aktivitása rohamosan csökken az idő függvényében. A humán hepatociták lényegesen jobban megőrzik uptake funkciójukat. Az uptake folyamat egy telíthető aktív és egy nem telíthető passzív folyamat eredőjeként jellemezhető. Kimutatták, hogy az akkumuláció csökkenésének hátterében az aktív, azaz a transzporter mediált uptake csökkenése áll.

#### *Gyógyszer-kölcsönhatások vizsgálata*

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

Vizsgálták egy koleszterinszármazék (dehidroepiandrosteron) hatását az *in vitro* CYP1A-indukciós vizsgálatokban kapott eredmények matematikai modellezésével. Humán hepatocitákban a dehidroepiandrosteron módosította a CYP1A indukciót. Összehasonlítva a modell alapján, valamint a kísérletek alapján készült CYP1A2 profilt, megállapították, hogy a CYP1A2 indukció csökkenése dehidroepiandrosteron hatására az androgén receptoron keresztül megvalósuló poszt-transzkripciós szabályozás eredménye.

#### *Biooxidációs vizsgálatok*

Meghatároztak és jellemezték állati tumorokban jelenlévő, a multidrogr rezisztenciáért felelős transzportereket, különös tekintettel a fotodinamikus terápiára.

Új, a fotodinamikus terápiában alkalmazható vegyületeket teszteltek *in vitro*. Elvégezték az anyagok szerkezet-hatás összefüggések (QSAR) vizsgálatát.

#### *Kemometriai kutatások*

Rangszámkülönbségek összegén alapuló, analitikai módszerek és QSAR-modellek rangsorolására szolgáló eljárást fejlesztettek ki. A módszert statisztikai tesztekkel való összehasonlítással validálták.

Kis molekulákra vonatkozó fizikai kémiai és kromatográfiás polaritási jellemzőket hasonlítottak össze és megállapították, melyiket milyen körülmények között lehet használni.



## **b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között**

Több napilapnak, rádióknak, illetve internetes portálnak adtak a szakterületüket érintő témákban nyilatkozatokat. Így például a 2010. évi kémiai Nobel-díj kapcsán az intézetben is intenzíven alkalmazott, palládium-katalizált keresztkapcsolásos reakciókról adtak interjút (MTI, Népszabadság, Klub Rádió,). A „Nők Lapja Café” internetes rovatában beszámoltak az intézetben futó legfontosabb projektekről.

A Nemzeti Fejlesztési Ügynökség TÁMOP 4.2.3/KMR pályázatára benyújtott “Immerzív kommunikációs csatornák a természettudományos ismeretterjesztés szolgálatában” című projekt keretében részt vettek a *Kémiai Panoráma* ismeretterjesztő folyóirat és a *Kémiai Portál* online magazin szerkesztésében. Létrehozták a *Lángész* című tudományos ismeretterjesztő portált.

Több kutató tartott kémiai ismeretterjesztő előadást budapesti gimnáziumokban.

## **III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2010-ben**

### *Hazai kapcsolatok*

Az intézet mind az egyetemekkel, más MTA-kutatóintézetekkel, mind a gyógyszeripar vállalataival igen eredményes kapcsolatokat ápol.

Az intézet kutatói tevékenyen részt vesznek a felsőoktatásban. Ezt igazolja, hogy 13 kutató oktat rendszeresen az egyetemeken és 24 fiatal kutató PhD-munkáját irányítják témavezetőként.

A Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetemen részt vesznek a Szerves Kémia és Technológiai Tanszék oktatási tevékenységében. Közös kutatásokat folytatnak az „Aszimmetrikus biotranszformációk folyamatos csőreaktorban” c. témában. Az eredményekről egy 2010-ben megjelent közös publikáció tájékoztat.

Az Eötvös Loránd Tudományegyetem (ELTE) oktatási tevékenységében többféle módon is részt vettek: előadásokat tartottak, és laboratóriumi gyakorlatokat vezettek. Részt vettek az egyetem Kémia Doktori Iskolájának munkájában is.

A Semmelweis Egyetem Gyógyszerészi Kémiai Intézetével együttműködésben részt vettek egy újonnan izolált növényi ekdiszteroid sztereokémiájának tisztázásában. Közös publikációban foglalták össze az eredményeket. Az egyetemen működő MTA Neuromorfológiai és Neuroendokrinológiai Laboratóriummal „A Glu-GABA cserefolyamatban résztvevő célfehérjék anatómiai és immunhisztokémiái lokalizációja” c. témában dolgoznak együtt eredményesen. Az egyetem Orvosi Vegytani, Molekuláris Biológiai és Pathobiokémiai Intézetével és az Uzsoki utcai Kórház Sebészet-Érsebészeti Osztályával „Humán hepatociták izolálása és gyógyszerinterakciók vizsgálata” témában dolgoznak közösen. Az eredményekből közös cikket jelentettek meg.

Részt vettek a Szent István Egyetem Állatorvos-tudományi Kar Doktori Iskolájának munkájában.

Intézmények közötti együttműködési megállapodás keretében több klinikával és kórházzal (Szent István Kórház, Szent László Kórház; Semmelweis Egyetem, Transzplantációs és Sebészeti Klinika, Pszichiátriai és Pszichoterápiás Klinika; Gottsegen György Országos

Kardiológiai Intézet, Heim Pál Kórház, Madarász Utcai Gyermekkorház) folytatnak közös munkát. Ennek kapcsán vizsgálják betegek szervezetének gyógyszerlebontó (méregtelenítő) képességét, és közösen kialakítják a betegek egyéni gyógyszeres terápiáját. Az együttműködés kiemelkedő eredményességét a 14 megjelent közös publikáció igazolja.

Az MTA SzBK, Enzimológiai Intézetével „DNS metilációjának tanulmányozása”, valamint a „K-vitaminok meghatározása vérből” c. témákban a közös eredményekről négy dolgozatban számoltak be 2010-ben.

Több, Magyarországon működő gyógyszervállalattal folytatnak sikeres együttműködéseket. Így például a Servier Kutatóintézet Zrt.-vel és a Richter Gedeon Nyrt.-vel. A Richter Gedeon Nyrt.-vel a neuroszteroidok és a GABA<sub>A</sub>-receptor kölcsönhatását tárgyaló dolgozatot jelentettek meg 2010-ben.

A Cyclolab Kft. (Budapest) céggel egy NKTH-Jedlik pályázat keretében dolgoznak közösen. 2010-ben új, hatékony ciklodextrin alapú, királis állófázisokat fejlesztettek ki és ezeket tesztelték, illetve az állófázis funkciós csoportjaként felhasznált és újonnan fejlesztett ciklodextrin származékok ligand-(királis)szelektor kölcsönhatását vizsgálták. Az eredményekről két publikációban számoltak be.

A Creative Labor Kft.-vel a NanoSEN9-projekt keretében: „Sejtvonalak előállítása immunfestési metodika tesztelésére”, a LuminoChem Kft.-vel: „Új Na<sup>+</sup> ion-szelektív fluoreszcens festékek fejlesztése”, a Nanochem Kft.-vel: „Ultraérzékeny fluoreszcens detektor fejlesztése” c. témákban folytattak közös kutatási-fejlesztési tevékenységet.

A SOLVO Biotechnológiai Zrt.-vel folytatott együttműködésük eredményeként újabb transzporterek szkrínelési technikáját dolgozták ki, és részt vettek egy in vivo patkány hepatobiliáris transzportergátlás vizsgálatában. Az eredményekről közös publikációt jelentettek meg.

2010-ben kutatási együttműködést indítottak a Virtua Drug Kft.-vel egy virtuális laboratórium létrehozásával, amelynek célja az ADME (farmakokinetikai tulajdonságok) becslése, valamint a várható interakciók következtében kialakuló toxikus mellékhatások, illetve a rezisztencia előrejelzése a gyógyszerfejlesztés korai szakaszában, ami jelentős idő- és költségmegtakarítást jelenthet.

Több hazai tudományos rendezvényt is szerveztek. Így pl. a „Fehérjeszimulációk fórumát” 2010. április 22-én tartották meg. Az IUPAC-UNESCO rendezvény, „2011, a Kémia Nemzetközi Éve” megnyitója alkalmából előadást tartottak: „Szerkezet és funkció: célfehérjék validálása az élő sejttől egyetlen molekuláig” címmel.

Tevékeny részt vállaltak a Magyar Állatorvosi Onkológiai Társaság VI. Konferenciájának (2010. június 12-13., Balatonfüred), továbbá a Magyar Szabadgyök-Kutató Társaság az MTA Mikroelem Munkabizottság Miniszimpóziumának (Budapest, 2010. szeptember 17.) megrendezésében.

A Farmakokinetika és Gyógyszermetabolizmus Szimpózium (2010. április 14-16., Galyatető), és a TOX-rendezvény (2010. október 13-15., Galyatető) fő szervezői voltak.

## *Nemzetközi kapcsolatok*

Az intézet számos külföldi kutatóintézettel folytat eredményes együttműködést.

A kapcsolatok elsősorban közös kutatásokat jelentenek, de több európai egyetem kutatóival is dolgoznak közös pályázati témákban.

Fontos és nagy jelentőségű rendezvény a „Novartis lectures”, amit már hosszú évek óta (évente két alkalommal) az intézetben rendeznek meg. Ezeken a rendezvényeken a legkiválóbb, nemzetközi tekintélyű tudósok tartanak nagy érdeklődéssel kísért előadásokat.

Az intézet több EU-programhoz kapcsolódva rendezett számos külföldi kutató részvételével közös tanácskozásokat. Így pl. az „Exploring Cellular Dynamics at Nanoscale”, az EU FP7 keretprogram által támogatott tanácskozásra került sor 2010. szeptember 8-án.

2010. április 21-én tartották meg hét külföldi és hét magyar előadó részvételével a Multidrog-rezisztencia szimpóziumot.

2010-ben 12 közlemény jelent meg az intézet nemzetközi együttműködéseinek eredményeként.

Az Örmény Tudományos Akadémia Finom Szerveskémi Intézetével együttműködésben az „Új nitrogén-, kén- és oxigéntartalmú, kondenzált heterociklusos vegyületek szintézise és biológiai aktivitása” c. témában egy vendégkutató dolgozott a magyar laboratóriumban, és a partner által szolgáltatott modellvegyületekkel végeztek el új típusú kémiai átalakításokat.

A „Hibrid nanorendszerek inverz gázkromatográfiás és kemometriai jellemzése” c. témában (MTA-Lengyel TA közötti egyezmény keretében, együttműködő partner: Poznani Műszaki Egyetem, Lengyelország) a Hansen-féle oldhatósági paraméterekkel sikerült előre jelezni az oldószer-visszanyerés értékét. Az eredményekről 5 közös cikkben számoltak be.

A „Polaritási indikátorok és a kromatográfiás polaritás értelmezése” c. témában (együttműködő partner: Szentpétervári Egyetem, Oroszország) különböző polaritási jellemzőket értékelték és hasonlítottak össze. Az oldott anyag és oldószer kölcsönhatásokat modellezték mindkét kölcsönható partner szempontjából. Az együttműködés eredményeiről eddig 3 közös cikket jelentettek meg.

Az EU COST program keretében (téma címe: „Reversal of multi drug resistance”) három külföldi egyetemmél folytattak közös kutatásokat: University of Lisbon (Portugália), University of Marseille (Franciaország), University of Ankara (Törökország). 2010-ben multidrog-rezisztenciát gátló származékok hatását mutatták ki kísérletileg. Igen fontos kutatási együttműködések alakultak ki az intézet kémiai laboratóriumi és a külföldi biológiai kutatóhelyek között a kiválasztott vegyületek tesztelése céljából.

Magyar-kínai Tét-egyezmény keretében (együttműködő partner: Yantai University, Shandong Province, Kína), az „Új antioxidáns klorin vegyületek a rákterápiában” c. témában folytattak kutatásokat. Az eredményekről közös cikkben számoltak be 2010-ben.

Magyar-cseh Tét-egyezmény keretében (együttműködő partner: Palaczky University Olomouc, Department of Cell Biology and Genetics, Cseh Köztársaság), a „Glukokortikoid hormonok szerepe az aromás szénhidogén receptor sejt-szignál működésében humán hepatocitákban” c. témában tanulmányozták a gyógyszer-metabolizmusban résztvevő citokrom P450 enzimek és a szteroid hormonok közti, valamint a xenoszenzorok és a szteroid szignál útvonalak közti kölcsönhatásokat. A P450 enzimek által biztosított védelmi rendszer megóvjja a szervezetet a xenobiotikumok lehetséges toxikus hatásaitól, amiben meghatározó

szerepe van az aromás szénhidrogén-receptornak, valamint a nukleáris receptoroknak (pregnán X-receptor, konstitutív androsztán receptor, glukokortikoid receptor). A receptorfüggő indukción túl endogén faktorok (fejlődési, ivari és hormonális faktorok) is módosítják a P450 expressziót. A szteroid hormonok a gyógyszer-metabolizmus szabályzásához is nagyban hozzájárulnak. A szteroid hormon prekursor dehidroepiandrosteronnak a CYP1A-indukcióra gyakorolt hatását vizsgálták. Az együttműködés eredményeiből hat közös publikáció született.

Magyar-szlovén Tét-egyezmény keretében (együttműködő partner: University of Ljubljana, Faculty of Medicine, Szlovénia) „A koleszterin homeosztázis és a gyógyszer-metabolizmus kapcsolatának kísérletes és matematikai modellezése” c. témában tanulmányozták a gyógyszerek okozta koleszterin homeosztázis felborulását, valamint a szteránvázis vegyületek okozta gyógyszer-metabolizmus változásokat. A koleszterinszint-csökkentő sztatinok számos betegnél kellemetlen mellékhatásokat okoznak, ezért új, nem-sztatin alapú megközelítések kerültek előtérbe. Megállapították, hogy a gyógyszer-metabolizmusban szerepet játszó nukleáris receptorok szenzorként működnek, és ezáltal megvalósul a szteránvegyületek metabolizmusának, valamint a xeno- és endobiotikumok okozta toxicitással szembeni védelemnek az összehangolt szabályzása. Az együttműködés hat közös tudományos közleményt eredményezett.

Magyar-horvát Tét-egyezmény keretében (együttműködő partner: Rudjer Boskovich Intézet, Zágráb, Horvátország) az „Új változószelektálási eljárások kidolgozása” c. témában új rangsorolási és változókiválasztási eljárásokat fejlesztettek ki és elméleti kémiai konferenciákon vettek részt közös előadásokkal és posztterekkel.

ERA Chemistry pályázat keretében (téma címe: „Hatékony módszerek kidolgozása heparin és heparán-szulfát vegyülettárak előállítására biológiai vizsgálatokhoz”) a Centre for Synthesis and Chemical Biology, University College Dublin, Írország partnerintézményből a részletes kutatási tervek összehangolása érdekében fogadták a külföldi laboratórium vezetőjét. A magyar kutatóhelyről egy fiatal munkatárs végzett eredményes posztdoktori munkát az ír intézetben.

A „Synthesis of biologically active heterocycles” c. témában (együttműködő partner: Bayer Crop Protection, Németország) mintegy 40 új vegyületet szintetizáltak 2010-ben.

„Szelektív halogénezést tartalmazó reakcióutak kidolgozása” c. témában az AllessaChemie GmbH, Frankfurt am Main (Németország) céggel vettek fel kapcsolatot. 2010-ben sikeres tájékoztató kutatásokat folytattak a későbbi hosszú távú kooperáció megalapozásának céljából.

#### **IV. A 2010-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása**

##### *Hazai pályázatok*

2010-ben az MTA-elnöke által meghirdetett Lendület-program keretében a „Frusztrált Lewis-pár katalizátorok” c. témakör kutatásaira 225 M Ft támogatást nyertek el, amely összegből 2010-ben 45 M Ft-ot használtak fel. A 2010-ben végzett munka legfontosabb eredménye a méretkizárásos elven működő, frusztrált Lewis-pár katalizátorok kifejlesztése és alkalmazása.

OTKA-pályázat keretében (téma: „4-, 5-, 6- és 7-klórmethylindolok előállítása és alkalmazásuk indolvázis alkaloidok szintézisében”) a tárgyévben az ergolinvázis alkaloidok szintézisének egy fontos, három gyűrűt tartalmazó intermedierjét állították elő egy egyszerű sztereoselektív módszerrel.

OTKA-kutatások keretében számos olyan eljárást dolgoztak ki, melyekben új módszereket alkalmaztak. Különös hangsúlyt fektettek a palládium-katalizált aminálásra (a „Buchwald-Hartwig-reakció” alkalmazására), valamint egy új szintetizátor felhasználására.

Az „Intelligens nanoszenzor fejlesztése az ionháztartás folyamatainak szubcelluláris szintű diagnosztizálására (nanoSEN9)” c. NKTH-témát konzorciális együttműködés keretében nyerték el. 2010-ben felépítették a fehérjefunkció monitorozására alkalmas nanoszenzor “proof-of-concept” prototípusát.

A pályázati támogatás mértéke: 180 M Ft, ebből 2010-ben 31 M Ft.

„Egyéni gyógyszeres terápia kialakítását támogató, molekuláris diagnosztikai szakértői rendszer és szolgáltatás kidolgozása” (GOP) pályázatot nyerték el, amelynek összes támogatása 200 M Ft, ebből 80 M Ft volt 2010-ben. A tárgyévben elvégezték a CYP-fenotipizálás módszereinek beállítását és validálását, valamint megkezdték a CYP-genotipizálás módszereinek kidolgozását.

### *Nemzetközi pályázatok*

„Új célpontok és új gyógyszerjelöltek az epilepszia leküzdésére: a gamma-aminovajsav transzport fehérjék altípusainak megkülönböztetésére szolgáló szelektív spirociklusos gátlószerek tervezése” címmel az ERA-2010 Chemistry pályázatot nyerték a Leuveni Katholieke Universitát-tel közösen.

2010-ben nyerték el a „Hatékony módszerek kidolgozása heparin és heparán-szulfát vegyülettárak előállítására biológiai vizsgálatokhoz” c. ERA 2010 Chemistry pályázatot.

A pályázati támogatás összesen: 35,2 M Ft, ebből 2010-ben 13 M Ft.

2010-ben TÉT-pályázaton „Különböző analitikai és kemometriai módszerek összehasonlítása” c. témára nyerték el támogatást. A pályázati támogatás összesen: 1,460 M Ft, ebből 2010-ben 0,73 M Ft.

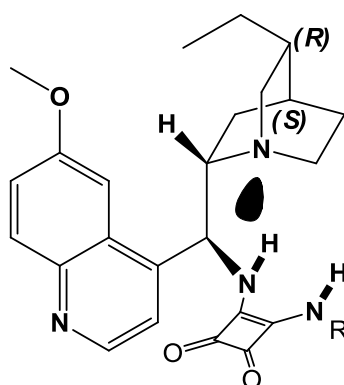
## **V. A 2010-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk**

1. Daragics K, Fügedi P: (2-Nitrophenyl)acetyl: A new, selectively removable hydroxyl protecting group. *Organic Letters*, 12 (9): 2076-2079 (2010)
2. Takács D, Király P, Nagy I, Bombicz P, Egyed O, Riedl Zs, Hajós Gy: Formation of a new ring system: Tetrazolo[5,1-f][1,2]azaborinin. *Journal of Organometallic Chemistry*, 695 (24): 2673-2678 (2010)
3. Erős G, Mehdi H, Pápai I, Rokob TA, Király P, Tárkányi G, Soós T: Expanding the scope of metal-free catalytic hydrogenation through frustrated Lewis pair design. *Angewandte Chemie-International Edition*, 49 (37): 6559-6563 (2010)
4. Fitos I, Visy J, Simonyi M, Mády Gy, Zsila F: Selective binding interactions of deramciclone to the genetic variants of human  $\alpha_1$ -acid glycoprotein. *Biochimica Et Biophysica Acta*, 1800 (3): 367-372 (2010)
5. Kardos J, Palló A, Bencsura A, Simon Á: Assessing structure, function and druggability of major inhibitory neurotransmitter gamma-aminobutyrate symporter subtypes. *Current Medicinal Chemistry*, 17 (20): 2203-2213 (2010)

## Az MTA KK Biomolekuláris Kémiai Intézetének kiemelten sikeres kutatási területe 2010-ben

### *Organokatalizátorok kifejlesztése gyógyszeripari felhasználás céljából*

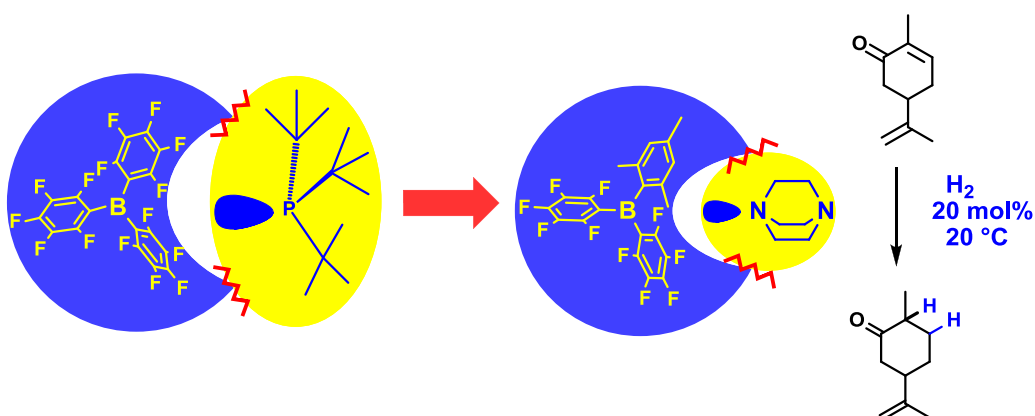
Öt évvel ezelőtt egy új bifunkciós tiokarbamid katalizátorcsalád (módosított cinkona alkaloidok) kifejlesztéséről számoltak be. Széles körű alkalmazhatóságuknak és katalitikus hatékonyságuknak köszönhetően azóta ezek a vegyületek a terület meghatározó, leggyakrabban használt katalizátoraivá váltak. Annak érdekében, hogy tovább bővítsék a bifunkcionális organokatalizátorok felhasználhatósági körét, elkezdtek vizsgálni a bifunkcionális négyzetamidok alkalmazhatóságát; a tiokarbamid helyett egy hasonló szerkezetű, dupla hidrogénhíd-donor, négyzetamid-molekula részletet alakítottak ki. Megállapították, hogy ezek a vegyületek jól kiegészíthetik az általuk korábban kifejlesztett tiokarbamid katalizátorokat, és hatékonyak bizonyulnak számos Michael-addíciós reakcióban. Diasztereoselektivitásuk különösen kiemelkedő. A reakciók mechanizmusának vizsgálata és tisztázása mellett arra is törekedtek, hogy olyan katalizátorokat hozzanak létre, amelyek szilárd hordozóhoz vannak kötve, vagyis immobilizáltak. Megfigyelték, hogy ezek a módosított katalizátorok megtartották az eredeti homogén katalizátorok szelektivitását, s így folyamatos üzemű eljárásokban is alkalmazhatók.



1 ábra. A bifunkcionális négyzetamid organokatalizátorok sematikus ábrázolása

A nemrég felfedezett, frusztrált Lewis sav-bázis párok alkalmazása egy alapvetően új stratégiát hozott a kis molekulák aktiválásában, amelyek közül kiemelkedik a hidrogén aktiválása. Ezek a molekulák szterikus okok miatt nem képesek kialakítani a klasszikus donor-akceptor komplexet, azonban ennek ellenére mégis létrejön egy másodrendű kötésekkel összetartott "frusztrált komplex". Ez az átmenetileg létrejövő, bifunkcionális rendszer azután szinergikusan képes a hidrogént hasítani. A szterikus zsúfoltságra, mint katalizátor tervezési elvre építve, számos Lewis sav-bázis párt állítottak elő, amiket katalitikus hidrogénezésekben lehetett alkalmazni. Annak ellenére, hogy a frusztrált Lewis-párok kémiája viszonylag új, már most feltételezhető, hogy ezek a felismerések paradigmaváltást hoznak a katalizátorfejlesztés területén. Lehetőség nyílik a drága és toxikus nehézfémek helyettesítésére a katalitikus hidrogénezés területén, s ezáltal környezetkímélő ipari eljárások terjedhetnek majd el. Azonban az eddig kifejlesztett rendszerek túlzott reaktivitása (gyakorlatilag nincs funkcióscsoport-tolerancia) nem tette lehetővé a katalizátorok széles körű, szintetikus alkalmazását. Ez arra ösztönözte a kutatókat, hogy a katalizátortervezésben a méretkizárásos elvet használják fel. Feltételezték, hogy a szterikus zsúfoltság további növelésével a Lewis-

savas centrum körül elérhető egy olyan helyzet, amikor csak a hidrogén aktiválása megy végbe, s más mellékreakciók nagymértékben vagy teljesen kiküszöbölhetők. Ez a katalizátortervezési elv sikeresnek bizonyult, első eredményüket az Angewandte Chemie "hot paper" minősítéssel elfogadta el, és eredményük a folyóirat címlapjára is felkerült. Az intézet kutatói rámutattak arra, hogy számos olyan esetben is meg tudják valósítani a fémmentes katalitikus hidrogénezést, amikor a korábbi katalitikus rendszerek nem is működnek. A módszer egyik fontos kiterjesztése volt a kinolinok részleges redukciója, ami nehezen megvalósítható folyamat, de nagy jelentőséggel bíró szintetikus lépés különböző gyógyszerek előállításában.



2. ábra. Szintetikus stratégia a funkcióscsoport-toleranciával rendelkező frusztrált Lewis sav-bázis párok kifejlesztésére

## VI. A kutatóhely főbb mutatói 2010-ben

A kutatóhely neve: Kémiai Kutatóközpont, Biomolekuláris Kémiai Intézet

<b><u>1. LÉTSZÁMADATOK</u></b>			
Átlagléttség <sup>1</sup> :	92	Ebből kutató <sup>2</sup> :	44
PhD, kandidátus:	22	MTA doktora: 6	Rendes tag és levelező tag: 0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma <sup>3</sup> :			2
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma <sup>4</sup> :			17
<b><u>2. PUBLIKÁCIÓK</u></b>			
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>5</sup> :			45
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>6</sup> :			44
Tanulmány, cikk <sup>7</sup> hazai tud. folyóiratban	magyarul: 3	idegen nyelven:	0
<i>külföldi</i> folyóiratban	magyarul: 0	idegen nyelven:	39
<i>Ebből</i> impaktfakt. publ, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	39
Könyv <sup>8</sup>	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet <sup>9</sup>	magyarul: 0	idegen nyelven:	1
<b><u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u></b>			
Összesített impaktfaktor <sup>10</sup> :	139,18	Összes független hivatkozás száma:	932
Összes hivatkozás száma <sup>11</sup> :	1004		
<b><u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2010-BEN</u></b>			
Tud. fokozat megszerzése <sup>12</sup> :	PhD: 5	MTA doktora:	0
<b><u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u></b>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma <sup>13</sup> :	0	külföldi oltalmak száma <sup>14</sup> :	0
<b><u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u></b>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma <sup>15</sup> :			14
		posztterek száma:	13
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	2	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	7
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>16</sup> :	0		
<b><u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u></b>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>17</sup> :			13
Témavezetések száma: TDK munka:	3	Diplomamunka (BSc):	5
Diplomamunka (MSc):	3	PhD:	24
<b><u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u></b>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>18</sup> :		533,46	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>19</sup> :	5	Teljes saját bevétel:	133,01 MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	MFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			6
	A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	58,55	MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			16
NKFP: 5	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	76,75	MFt
Egyéb: 11	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	MFt
ÚMFT témák száma: 0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	MFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	0	MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma:			1
EU forrásból: 1	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	MFt
Egyéb: 0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	MFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási bevétel:		0	MFt



## I. A kutatóhely fő feladatai 2010-ben

Az intézet fő kutatási feladata az MTA Kémiai Kutatóközpont E-1287/2010. sz. Alapító okirat módosítása szerint 2010. évben a következő volt:

- innovatív, kémiai kutatások folytatása, különösen a nanokémia és a katalízis területén, amelyek magukban foglalják a felületkémiai kutatásokat, nanoszerkezetű anyagok szintézisét, nanorétegek vizsgálatát, felületek jellemzését és módosítását, valamint a heterogén katalizátorok, a katalitikus reakciók és az alternatív energiaforrások kutatását.

Az intézet kutatási alapfeladataihoz kapcsolódóan egyéb feladatokat is ellátott, így:

- tevékenységével összefüggésben tudományos, szak- és ismeretterjesztő kiadványokat jelentetett meg;
- együttműködött a kutatóközponti, illetve más hazai kutatóintézetekkel, velük közös kutatási programokban vett részt, kapcsolatokat tartott fenn és létesített más országok tudományos intézményeivel, nemzetközi tudományos társaságokkal; elősegítette a magyar kémiai kutatások jelenlétét a tudományág nemzetközi életében;
- hazai és nemzetközi tudományos programokat és konferenciákat szervezett;
- szorgalmazta és segítette a tudományos kutatások eredményeinek társadalmi és gazdasági hasznosítását;
- felsőoktatási intézményekkel együttműködve részt vett az oktatómunkában, közös kutatási, képzési és továbbképzési feladatokat látott el;
- hazai és nemzetközi kutatási pályázatokon vett részt;
- kutatási megbízási szerződések keretében végzett K+F-tevékenységet;
- hozzájárult a kutatóközponti szakkönyvtár működtetéséhez.

## II. A 2010-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

### a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

#### *Nano-medicinális kutatások*

Új típusú, felületmódosított, szerves nanorendszereket és szerves nanokompozitokat előállítottak elő a biológiai (szöveti) környezetben is megőrzött stabilitás és biokompatibilitás elérése érdekében. A 20 nm-es átlagos átmérővel rendelkező, szűk méreteloszlású és aminopropil-láncokkal borított monodiszpersz szilika nanorészecskéken további fehérjekapcsolásra alkalmas, bifunkciós felületmódosításokat végeztek. Biokompatibilis polimerrel bevont (fluoreszcens jelzővel ellátott és hatóanyagot tartalmazó szilícium-dioxid-cirkónium-dioxid ( $\text{SiO}_2\text{-ZrO}_2$ ) mag-köpeny) nanorészecskéket állították elő. Elvégezték a

termék biológiai környezetben történő tesztelését. Megállapították, hogy daganatos sejtekben a részecskék feldúsulnak.

A célzott hatóanyag-bevitelre alkalmas unilamellás vezikulák héjszerkezetét szinkrotron sugárzással (DESY/Hamburg, BESSY/Berlin), valamint neutronszórással (Müncheni Kutatóreaktor, ILL/Grenoble) tanulmányozva megállapították, hogy a vezikulák sztérikus stabilizálásához felhasznált, PEG-lánccal ellátott foszfolipidekben a kettősréteg külső és belső oldalain beágyazott PEG-lipidek aránya közelítőleg 2:1.

Hazánkban egyedülálló módon összefrekvencia-keltési rezgési spektroszkópiát alkalmaztak lipid monorétegek és oldott anyagok (egyszerű ionok, gyógyszermolekulák, hatóanyag-jelölt peptidek, szerves és szervetlen nanorészecskék) kölcsönhatásainak megismerésére. A módszer alkalmazásával megállapították, hogy tiszta vízre terítve a foszfolipid-molekulák poláris fejcsoportjai a határfelületi vízmolekulák rendezettségét megnövelik, és ez a rendező hatás az anionos dipalmitoil-foszfátidil-glicerín esetében nagyobb, mint az ikerionos dipalmitoil-foszfátidil-kolin esetében.

„In vivo imaging” technikával kimutatták, hogy kettős kinázgátlót, mint tumorellenes szert tartalmazó liposzómák a vizsgálati egerek daganatában feldúsulnak. „Ex vivo imaging”-technikával igazolták a liposzómák jelenlétét a kezelt állatok tumorában és veséjében.

### *Felületmódosítási és nanoszerkezet-vizsgálatok*

Különböző kémiai redukciós és elektrokémiai módszerekkel előállított, arany (Au) nanorészecskékkel borított, interdigitális elektródokat fejlesztettek ki, impedanciamérésen alapuló gáz- és gőzérzékelő szenzorok érzékelő rétegeként. A szenzorok érzékenysége oldószer-gőzök hatására több nagyságrenddel nagyobb, mint az egyenáramú ellenállásmérésen alapuló interdigitális szenzoroké. A kifejlesztett szenzorok válaszideje és regenerációs ideje gyors, a jelváltozás reverzibilis. További előnyük, hogy viszonylag kis felületi borítottság esetén is alkalmazhatók, így a kis anyagszükséglet miatt, az alkalmazás igen gazdaságos.

Vertikálisan rendezett szénnanocső-erdővel borított elektródok szuperkondenzátorként történő alkalmazását vizsgálták. Kidolgozták a szuperkondenzátorok elektrokémiai módszerekkel történő minősítését. Vizsgálták a különböző elektrolitok hatását a kondenzátorok működési paramétereire, így az energiasűrűsége és a teljesítménysűrűsége. Kémiai gőzfázisú rétegleválasztással (CVD) növesztett szén-nanocső rétegekkel 4-10 F/g specifikus kapacitást sikerült elérni, míg a maximális teljesítménysűrűség > 200kW/kg, ami egy nagyságrenddel előnyösebb az aktív szén alapú szuperkondenzátoroknál.

Sikeresen megvalósították a biológiai vizsgálatokban alkalmazható „Lab-on-a-chip” platformba integrálható 3D mikro- és nanoelektrodok galvanikus helyettesítésen alapuló fémes bevonását és a módosított felületek elektrokémiai alkalmazását. A felületmódosítási technika előrelépést jelenthet sejtdifferenciálódási folyamatok valós idejű megfigyelésének követésében.

Meghonosították és sikeresen alkalmazták a mikrométeres lenyomatok technikáját (microcontact printing) lokális fibrinolitikus enzimaktivitás kinetikájának vizsgálatában. A vizsgálatok távlati célja az érrendszeri megbetegedések gyógyítása hatékonyságának növelése.

Összehasonlították különböző gyártmányú nanomechanikai vizsgálóberendezések szisztematikus hibáját. Megállapították, hogy a kiértékelés egységesítésével az átlagos hiba 5% alá csökkenthető. Az eredményeket az ISO szabványosítási eljárásban használják fel.

A korábbi évek alapkutatói eredményeire alapozva, különböző szemcseméretű, illetve morfológiájú titán-dioxid (TiO<sub>2</sub>) nanoanyagok alkalmazásán alapuló fotokatalitikus eljárásokat dolgoztak ki. Metilénkék színezék bontását vizsgálva, igazolták, hogy a 10 nm méretű nano TiO<sub>2</sub>-anyag hatékonysága azonosnak tekinthető a referenciaanyagként

közismerten elfogadott Degussa P25 mintáival. Ezzel szemben a nagyobb méretű, 100 nm-es  $\text{TiO}_2$  jóval hatékonyabbnak bizonyult: már 90 perc alatt 100%-ban elbontotta a metilénkék színezéket a reakcióelegyből. A fotokatalitikus eljárások tervezése során maximálisan figyelembe vették a későbbi méretnövelés és az ipari körülmények közötti megvalósítás előfeltételeit. Új, szol-gél eljárásokon alapuló preparatív módszereket dolgoztak ki különleges tulajdonságú, pl. elektromos vezetőképességgel rendelkező vagy megnövelt fotokatalitikus tulajdonságú, nanoméretű  $\text{TiO}_2$ -anyagok előállítására. Igazolták, hogy a kidolgozott nanokémiai módszerek kiváló alternatívát jelentenek a  $\text{TiO}_2$  kristályrács szerkezetének módosítására, idegen atomok, pl. vas, mangán, fluor bevitelével, szemben a már régóta ismeretes fizikai módszerekkel.

### *Hidrogén-energia kutatások*

A hidrogén-energiával kapcsolatos kutatások fő célja a hidrogénnek, mint energiahordozónak előállítása, tisztítása és tüzelőanyag-cellában történő alkalmazása. A 2010-ben végzett kutatások során a hidrogént bioetanol reformálásával állították elő. Magnézium-spinel hordozós nemesfémmentes katalizátorokat terveztek, amelyeknek nikkell (Ni) volt a fő komponense. Ezt többféle fémrel (Co, Ce, Mo) módosították. Az eredmények a Ni és a kobalt (Co) erős szinergetikus hatására utalnak. Röntgen fotoelektron-spektroszkópiás (XPS) vizsgálatok azt mutatták, hogy Co jelenlétében a Ni jobban redukálódik, miközben a Co magasabb oxidációs állapotúvá válik. A katalitikus hatás kifejtésekor bifunkciós mechanizmus valószínűsíthető, ami az egymás atomi közelségében megtalálható fémes nikkell és oxidált kobalt felületi képződményeknek köszönhető. A reformálási reakció első lépésében a fémes nikkelen adszorbeálódó etoxi speciesteket az oxidált kobalt felületi acetátokká és acetátokká oxidálja.

A hidrogén tisztítására, azaz szénmonoxid (CO) mentesítésére az úgynevezett preferenciális oxidációt (PROX) alkalmazták. Olyan modellrendszer kialakításával foglalkoztak, amely rendelkezik a valódi katalizátorok szerkezeti sokszínűségével, ugyanakkor vizsgálható a felületkutatás jól bevált eszközeivel. Vizsgálták CO adszorpcióját ionbombázással feldurvított Au (111) egykristály felületen fotoelektron-spektroszkópiával (XPS, UPS), összegfrekvencia-keltési spektroszkópiával (SFG) és pásztázó alagútmikroszkópiával (STM). Kimutatták, hogy az ionbombázás által létrehozott nagyszámú lépcső felelős a CO adszorpciójáért, ugyanakkor a CO-expozíció jelentősen megkönnyíti a nagyléptékű felületi anyagtranszportot, ami az ionbombázással feldurvított felület kisimulását eredményezi.

A tüzelőanyag-cellás katalizátorok fejlesztése terén kétkomponensű platina-ón (PtSn)-katalizátorokat állítottak elő. Sikerült jelentős aktivitásnövekedést elérni a referenciaként alkalmazott egyszemű Pt-katalizátorhoz képest.

### *Mikro- és mezopórusos anyagok kutatása*

Vizsgálták nitrogén-oxid (NO) metánnal oxigén jelenlétében, mordenit és ZSM-5 hordozós inidium-(In)zeolit modellkatalizátorokon történő szelektív katalitikus redukálását operando DRIFTS-MS-módszerrel, a katalitikus mechanizmus mélyebb megismerése céljából. Követték a reakciókörülmények, többek között a hőmérséklet és a reaktáns parciális nyomások változtatásának hatását az aktivitásra és a felületi képződmények koncentrációjára. Kimutatták, hogy a zeolitok aktív alakulatai  $\text{InO}^+$ -kationok. A reaktáns eleggyel kölcsönhatásban a katalizátoron felületi nitrát( $\text{NO}_3^-$ )- és nitrozonium-ionok( $\text{NO}^+$ ) képződnek. A nitrát a metánnal nitrogéntartalmú intermediert, adott esetben nitrometánt képzett. Az utóbbi reakciólépés a metános NO-redukálás sebességmeghatározó lépése. A  $\text{NO}^+$ -ionok és a

nitrometán reakciójában környezetre a NO-nál kevésbé ártalmas nitrogén (N<sub>2</sub>) és széndioxid (CO<sub>2</sub>) képződik.

Szintézisgáz (CO/H<sub>2</sub> elegy) előállítására alkalmas katalizátor és katalitikus reaktorrendszer kifejlesztésével foglalkoztak pirolízis olaj (főleg csontolaj) vízgőzös reformálásának céljából. A reakcióhoz hagyományos, szemcsézett Ni/γ-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-katalizátorokat, továbbá strukturált katalizátorokat készítettek. A strukturált katalizátor méhsejt szerkezetű monolit kerámia-(kordierit)hordozón vékony, aktív Ni/γ-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> réteget hordoz. Előnyös tulajdonsága, hogy áramlási ellenállása sokkal kisebb, anyag és hőátadási jellemzői viszont kedvezőbbek, mint a hasonló aktivitású, szemcsézett katalizátorokból képzett katalizátorágyé. Védőkatalizátor (dolomit) alkalmazásával elérték, hogy a monolit katalizátor aktivitása és a pirolízis gáz teljes konverziója szintézisgázzá hosszú időn át fennmaradjon.

### *Felületi szerkezetek kutatása*

Párhuzamos STM és kisenergiájú ionszórásos spektroszkópiás (LEIS) mérésekkel bizonyították, hogy irányított nukleációval ródiom-arany (Rh-Au) mag-héj nanorészecskék hozhatók létre TiO<sub>2</sub> nanocsövek és nanorudak felületén. Ily módon a kétfémes síkkatalizátor rendszerekre korábban kidolgozott eljárásukat kiterjesztették egy komplexebb és ipari alkalmazásként is felhasználható katalizátor típusra.

A kálium és szén-dioxid (CO<sub>2</sub>)adszorpcióját és kölcsönhatását vizsgálták Au(111) felületen. Megállapították, hogy a CO<sub>2</sub> kötési energiáját a káliumadalék nagymértékben növeli.

TiO<sub>2</sub> nanoszálakon és nanocsöveken kialakított Rh mag – Au héj szerkezetű katalizátorok aktivitásának vizsgálatával kimutatták, hogy az etanol átalakításában a kétfémes rendszerek aktívabbak, mint az egyszemes Au és esetenként, mint a Rh-katalizátorok.

Jelentős eredménynek számít a CO-mentes hidrogén előállítása hangyasav (HCOOH) bontásával Mo<sub>2</sub>C/szén-katalizátorokon. Azt találták, hogy a reakció során a CO<sub>2</sub>/(CO+CO<sub>2</sub>)-arány 98–99 % szénnanocső felületén létrehozott, vagy Norit felületére felvitt Mo<sub>2</sub>C-mintán, de víz hozzáadására sikerült CO-mentes H<sub>2</sub>-t előállítani a teljes HCOOH konverzió mellett.

A „Rh-nanodrótok növesztése és rendezett dekorációs TiO<sub>x</sub>-film kimutatása TiO<sub>2</sub>(110)-felületen növesztett hexagonális Rh-nanorészecskék esetében” c. téma kutatásainak során STM-mérésekkel kimutatták, hogy mind a sztöchiometrikus (1x1), mind (1x2) módon rekonstruált TiO<sub>2</sub>(110)-felületen elérhető az egydimenziós növekedés, ha a Rh-fém párologtatása elég magas hőmérsékleten történik. Méréseik alapján bebizonyosodott, hogy magas hőmérsékleten (1000-1200 K) egy új jelenség is fellép, nevezetesen atomi vastagságú, rendezett („wheel” típusu) TiO<sub>x</sub>-réteggel vonódik be a TiO<sub>2</sub>-felületen növesztett Rh-kristallit.

### *Nukleáris spektroszkópiai vizsgálatok*

Elsőként állítottak elő új típusú, korábban nem ismert, kristályos formában nem létező ón-nikkel-vas [Sn-Ni-Fe]- terner ötvözeteket, speciális paramétereket alkalmazó elektrokémiai leválasztás útján. Ezek az ötvözetek nemcsak korrózióálló bevonatként, hanem akkumulátorok elektródjaiként is gazdaságosan alkalmazhatók lehetnek. Röntgendiffrakciós, valamint <sup>57</sup>Fe és <sup>119</sup>Sn Mössbauer-spektroszkópiai vizsgálatok alapján megállapították, hogy ezek a rétegek amorfok és ferromágnesesek.

A nanofázisú anyagok kutatásával kapcsolatban tovább folytatták az általuk korábban kifejlesztett, a vas-ftalocianinok pirolízisével történő karbon-nanocsövek előállításával kapcsolatos kutatásaikat, ahol az α-vas ftalocianin oxigenálása során a rétegek közé beépülő oxigének egyik specieszénél az (Fe-O)-láncok között váratlanul megjelenő, új típusú ferromágneses csatolás fellépésére következtettek.

A mikrobiológiai autoregulátorként működő alkilrezorcinoloknál kimutatták, hogy az alkilrezorcinok molekulaszervezete lényeges szerepet játszik a redoxifolyamatok kinetikájában.

Mössbauer-spektroszkópiai mérések segítségével kimutatták, hogy a számítástechnikában alkalmazható, az adalékolt kobaltátokban fellépő negatív mágneses ellenállás jelentősen megváltozik a 20% stronciumtartalmú kobaltátokban a 2,5%-nál nagyobb vashelyettesítés hatására, mivel az addig összefüggő mágneses klaszterek elkülönült mágneses cseppekre esnek szét.

### **b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között**

Az intézet kutatói aktívan részt vettek – a kémia iránt érdeklődő, kiemelkedő képességű középiskolásoknak szervezett – „Aki kíváncsi kémikus” című nyári kutatótábor lebonyolításában.

A szakemberek és a műszaki kérdések iránt érdeklődők figyelmét ismeretterjesztő cikkekben hívták fel az MTA Kémiai Kutatóközpont, Nanokémiai és Katalízis Intézetben folyó, a megújuló anyag és energiaforrások hasznosításával, valamint a tiszta technológiák bevezetésével és a környezetvédelemmel kapcsolatos munkákra:

Az MTA Kémiai Kutatóközpont által kiadott Kémiai Panoráma c. tudományos ismeretterjesztő folyóirat 2010. évfolyamának 2. számában „Szokatlan kölcsönhatások. Katalízis szilárd felületen” címmel jelentettek meg egy cikket.

A Világgazdaság 2010. július 29-i számában „MTA: jobb az új termék, mint a biodízel” címmel cikk jelent meg a MOL Rt.-vel, a Pannon Egyetemmel és az Olajterv Rt.-vel közösen végzett kutatás-fejlesztésről, melyet a Nemzeti Kutatási és Technológiai Hivatal (NKTH) a Jedlik Ányos program keretében támogatott. A kutatás-fejlesztés célja a növényolaj dízelolajjal egyenértékű „zöld dízelle” történő konvertálása volt.

A Heti Válasz, Innováció rovatában „A biomasszától a biovegyiparig. Füstbe ment energia?” címmel jelent meg cikk a Gazdasági Operatív Program által támogatott, az állati melléktermékek, elsősorban a csontliszt kombinált kémiai és energetikai hasznosítását célzó kutatás-fejlesztésről. A kutatás-fejlesztés vállalkozó partnere a Terra Humána Kft. Az eljárásról részletesebb tájékoztatást adtak a „Gáz üzemanyag biomasszából” című szakcikkben, ami a Magyar Agrárkamara Lapjában az AGRÁRIUM Agrár és Piacgazdaság című lap 20. évfolyamának 2010/10. számában jelent meg.

Részt vettek a Lángész-projektben, melyben akadémiai kutatók, fiatal tehetségek és professzionális tudománykommunikátorok fogtak össze annak érdekében, hogy a fiatalok, sőt a gyerekek számára is kézzelfogható, átélhető élményt nyújtsanak a tudományos ismeretek, tapasztalatok révén. Előadást és interaktív foglalkozásokat tartottak középiskolákban a nanotechnológiáról. Részt vettek a Tudományfesztiválon, ahol kémiai kísérleteket mutattak be az érdeklődőknek.

Ismeretterjesztő előadásokat tartottak az Eötvös Loránd Tudományegyetemen (ELTE) az „ALKÍMIA MA” előadássorozat keretében, illetve a Paksi Atomerőmű Zrt.-ben „A nukleáris szakemberképzés helyzete Magyarországon, igények és lehetőségek, a fejlődés távlatai” címmel megrendezett ülésen.

„A kémiában is mini a divat – Nanoanyagok a gyógyításban” címmel jelent meg ismertetés a kutatóközpontban folytatott nanomedicinális kutatások jelentőségéről és eredményeiről a Népszabadság 2010. március 27-i számában.

„Új típusú mobiltelefon-cellák magyar kémikusoktól” címmel 2010. július 15-én jelent meg a jelenleg használt akkumulátoroknál jóval hosszabb élettartamú tüzelőanyag-cella kifejlesztéséről szóló tudósítás az MTA honlapján.

### III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2010-ben

#### *Hazai kapcsolatok*

A kutatóhely eredményes együttműködéseket folytat mind a hazai egyetemekkel, kutatóintézetekkel, mind több vegyipari és gyógyszeripari vállalattal.

Az egyetemekkel folytatott közös kutatások eredményeiről 2010-ben 26 publikációban számoltak be. Az intézet kutatói közül 12-en vesznek részt rendszeresen az egyetemi oktatásban.

Az elmúlt évben 12 PhD-disszertációt készítő fiatal kutató témavezetését látták el az intézetben. Részt vesznek a Szegedi Tudományegyetem Természettudományi Kar Doktori Iskolájának munkájában is.

A „Fischer-Tropsch reakció vizsgálata” c. téma keretében (együttműködő partner: Miskolci Egyetem, Műszaki Földtudományi Kar Nyersanyagelőkészítési és Környezeti Eljárástechnikai Intézete) Co/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-katalizátorokon sikerült alkoholok szintézisét szintézisgázból kiindulva megvalósítaniuk 2010-ben.

A Semmelweis Egyetem Orvosi Biokémiai Intézetével folytatott együttműködés keretében fibrinolitikus proteázokat tartalmazó vezikulás hordozórendszert fejlesztettek ki, amelynek hatóanyaga bontja mind a tiszta, mind a vérplazma olvadékot. A hatóanyag fibrinszálakra kifejtett méretcsökkentő hatását „in vitro” körülmények között modellezték, ami az alapját képezi a jövőbeni kutatásoknak. A vizsgálatok a hazánkban a legtöbb halálesetet okozó szív és érrendszeri trombózist kiváltó okok feltárására irányulnak.

Az MTA Izotópkutató Intézettel együttműködésben (téma címe: „Inverz oxid/fém határfelületek genezise, jellemzése és alkalmazása modellrendszerben”), OTKA-projekt keretében aranyhordozón létrehozott (vas-oxid)-réteg, úgynevezett „inverz modellkatalizátor” segítségével végeztek az arany/átmenetifém-oxid katalizátorok működési mechanizmusának jobb megértését célzó vizsgálatokat. 2010-ben két közös cikket publikáltak.

A „PEM (proton exchange membran)-típusú tüzelőanyag-cellák ötrétegű MEA (membrane electrode assembly) kutatás-fejlesztése új típusú anód-katalizátorokkal” c. témában partnerük a Kontakt-Elektro Ipari, Kereskedelmi Kft. (Pécs). 2010-ben 40 % Pt-tartalmú szénhordozós katalizátorok előállítására és elektrokatalitikus aktivitásának vizsgálatára került sor. Az előállítás és aktiválás kísérleti változóinak optimalizálása jelenleg folyik. A legjobb katalizátorok lényegesen aktívabbnak bizonyultak, mint a referenciaként alkalmazott, kereskedelmi forgalomban kapható katalizátor.

A pirolízis olaj katalitikus vízgőzös reformálása szintézisgázzá a biomassza kedvezőbb energetikai és szélesebb körű vegyipari hasznosítását megalapozó eljárás. A Terra Humana Kft. az MTA Kémiai Kutatóközpont, Nanokémiai és Katalízis Intézettel közösen – a Nemzeti Fejlesztési Ügynökség által támogatott „Innovatív bioenergetikai és környezetvédelmi eljárás és prototípus fejlesztés” tárgyú kutatás-fejlesztési munka keretében – katalitikus eljárást fejlesztett ki a pirolízis olaj szintézisgázzá konvertálására vízgőzös reformálással. A magas

hőmérsékletű (700–800 °C) katalitikus folyamatban a bioolaj teljes mennyiségét gáz üzemanyaggá alakítják. A gázt gázmotorban vagy gázturbinában elégetve a kémiai energia jó hatásfokkal mechanikai energiává, illetve generátor alkalmazásával elektromos energiává konvertálható. A fejlesztés eredménye egy új, környezetbarát technológia a megújuló energiahordozó, a biomassza „zöld” elektromos energiává alakítására.

Az „Új biológiai szennyvíztisztító berendezések és technológia kutatása és fejlesztése” c. NKFP-támogatású konzorciális projekt (UWATECH Környezet- és Víztechnikai Kft.) projekt egy 200-20 000 lakos-egyenérték kapacitású, nagy hatásfokú, gazdaságos és környezetbarát kommunális szennyvíz-tisztító technológia kifejlesztésére irányul. A projekt célja a jelenlegi eljárásokban használt részegységeknél (bio-reaktor, levegőztető, iszapleválasztó, vízszagtalanító/fertőtlenítő) hatásosabb és gazdaságosabb berendezések kifejlesztése. Laboratóriumi és nagylaboratóriumi vizsgálatokat végeztek a forgó-merülő szövetekercs, valamint adszorbens alkalmazására biofilm hordozóként. Elkészítették a demonstrációs kísérleti berendezés terveit, beszerezték a referencia berendezésként üzemelő forgó-merülő tárcsás technológia egységeit. Az engedélyezési eljárások befejeződése után megkezdték a demonstrációs és kísérleti szennyvíztisztító építését, a műveleti egységek tervezését gyártását és telepítését Reziben (Zala megye).

A TÁMOP 4.2.1/B4.1 és B4.2 pályázati témákban („Benzinfrakciók további benzol- és aromástartalom csökkentése katalitikus úton”; „Motorbenzinek- és gázolaj-keverőkomponensek előállítása melléktermékként keletkező olefinekből”) a Pannon Egyetem, MK-VFI-MOL Ásványolaj- és Széntechnológiai Intézeti Tanszékével dolgoznak eredményesen.

#### *Nemzetközi kapcsolatok*

Az intézetnek széles körű nemzetközi kapcsolatai vannak; ezek az együttműködések részben egyezményes keretekben, részben egyezményen kívül folynak. 2010-ben 30, külföldi szerzőkkel közös publikációt jelentettek meg.

Az MTA-Bolgár Tudományos Akadémia közötti egyezmény keretében a „Mikro- és mezopórusos szilikátok szerkezeti és savas tulajdonságainak módosítása és alkalmazásuk katalizátor és adszorbens anyagként” c. témában (együttműködő partner: Institute of Organic Chemistry, Bulgarian Academy of Sciences, Szófia, Bulgária) két bolgár és két magyar kutató 1-1 hetes látogatását bonyolították le a partner intézménynél.

Három közös publikációt jelentettek meg és egy közös előadást tartottak.

A „Növényi és bakteriális metabolitok fémekkel való kölcsönhatásának vizsgálata” c. témában (együttműködő partner: Orosz Tudományos Akadémia Biokémiai és Növényélettani Intézet, Szaratov, Oroszország), az MTA-Orosz Tudományos Akadémia közötti egyezmény keretében sikerrel alkalmazzák a Mössbauer-spektroszkópiát a környezeti tényezők mikrobiális jelölésre kifejtett kémiai hatásának a vizsgálatára. Az orosz partnerintézetből két kutató töltött el hosszabb időt a magyar laboratóriumban.

Az együttműködés eddigi eredményeként 2010-ben közös publikációt jelentettek meg és két konferencia-előadást tartottak.

Az „Atomos oxigén adszorpciójának vizsgálata PdAg/Pd(111) felületi ötvözetben, CO ko-adszorpció hatása” c. témában a partnerintézmény (University of Ulm, Németország) meghívására egy fiatal kutató 3 hónapos tanulmányúton vett részt. Olyan kétfémes

modellrendszerek tulajdonságaival ismerkedett meg, melyek tanulmányozása a magyar laboratórium kutatási tervei közt szerepel.

A „Molekuláris kapcsolók vizsgálata” c. témában (együttműködő partner: Freie Universität Berlin, Németország) egy közös dolgozatot jelentettek meg 2010-ben, és egy rövid (egy hónapos) tanulmányútra is sor került.

MTA-CNR-egyezmény keretében (együttműködő partner: Institute of Nanostructured Materials, National Research Council of Italy, Rome, Olaszország) „A Fischer-Tropsch mechanizmus vizsgálata” c. témában kölcsönös tanulmányutakra került sor. Egy közös publikációt jelentettek meg.

A „Kalkogenid üvegek” c. témában (együttműködő partner: University Uzgorod, Ukrajna), a Visegrádi Alapítvány által finanszírozott együttműködés keretében az Ungvári Egyetemmel gyümölcsöző együttműködés alakult ki a kalkogenid üvegek foto-mechanikus tulajdonságainak tanulmányozása területén. Az eredményekről közös publikációban számoltak be.

Magyar-francia Tét-egyezmény keretében (együttműködő partner: CNRS Le Mans-i Szilárdtestfizikai Kutatólaboratóriuma, Franciaország) a „Kobaltát perovszkitok mágneses fázisátalakulásainak és növények vasfelvételi mechanizmusainak vizsgálata Mössbauer-spektroszkópiával” c. témában a partnerek jól kihasználják az egyes laboratóriumokban lévő, egymást kiegészítő feltételeket. A kolosszális mágneses ellenállást mutató mintasorozatokon részletes hőmérsékletfüggő Mössbauer-méréseket végeztek. Az eredményekről közös publikációban és konferencia-előadásban számoltak be.

Magyar-argentin Tét-egyezmény keretében (együttműködő partner: Southern National University, Bahía Blanca, Argentína) a „Kálium ad-atom hatásának vizsgálata metanol adszorpciójára  $\beta$ -Mo<sub>2</sub>C(001) felületen” c. témában a kísérleti eredményeket az elméleti számításokkal hasonlították össze. Az eredményekről 2010-ben közös publikációt jelentettek meg.

Magyar-argentin Tét-egyezmény keretében (együttműködő partner: INCAPE, FIQ, UNL-CONICET, Santa Fe, Argentína) a „Monolit fém-zeolit katalizátorok fejlesztése” c. témában kölcsönös tanulmányutakra került sor. Három közös publikációban foglalták össze az elért eredményeket és egy közös előadást tartottak.

A 2010-es évben folytatódott az EXCELL (Exploring Cellular Dynamics at Nanoscale) elnevezésű európai projekt, az FP7 NMP – „Nanosciences, nanotechnologies, materials & new production technologies program” keretében. A projekt újfajta megközelítéseket dolgoz ki biológiai anyagok és nanostruktúrák közötti kölcsönhatások feltérképezésére. A projekt eredményeként egy komplex, integrált, mikrofluidikán és nagy érzékenységű elektronikán alapuló platform létrehozása várható, amely alkalmas a sejtdinamika nanotartományban történő követésére. 2010. szeptember 8-10 között Budapesten az MTA Kémiai Kutatóközpont szervezésében, az EXCELL-projekt részeként EXCELLessons címmel előadói napot tartottak a hazai szakemberek és a projektpartnerek részvételével. Az EXCELL-projekten belül szoros együttműködés alakult ki az MTA Kémiai Kutatóközpont és a Dán Műszaki Egyetem között szilíciumfelületek fém és szerves rétegekkel történő bevonásának területén, valamint a Potsdami Egyetemmel membránfehérje-immobilizálás témában.



A „Novel Catalyst for DMFC MEA” c. témában kutatási szerződést kötöttek az Industrial Technology Research Institute (Hsinchu, Taiwan) intézménnyel. (SnPt/C)-katalizátorokat terveztek. Vizsgálták elektrokémiai aktivitásukat metanol elektrooxidációjában. Jelentős aktivitásnövekedést értek el a módosítatlan (Pt/C)-katalizátorhoz képest.

A „Propán szelektív oxidációja” c. témában a Süd Chemie AG (Heufeld, Németország) vállalattal kötött kutatási szerződés keretében MoVTaNb vegyes oxidok kombinatorikus tervezését és katalitikus tulajdonságaik nagyátersztő vizsgálatát végezték el. Azt találták, hogy az akrilsavhozam a legjobb kompozíciókon meghaladja az 50 %-ot.

#### **IV. A 2010-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása**

##### *Hazai pályázatok*

2010-ben „A trombus mátrix proteolitikus lebontása: új célpontok és eszközök a trombolízis területén” c. OTKA-pályázatot nyertek el a Semmelweis Egyetem Orvosi Biokémiai Intézettel közösen. A téma összes támogatása: 37,4 M Ft.

A 2010-ben elnyert OTKA-projekt: „Katalitikus hidrogéntermelés megújuló energiaforrásokból” támogatása összesen: 23,55 M Ft; 2010-ben: 6,04 M Ft.

2010-ben az OTKA-által támogatott „Elektrokémiailag párologtatással, ionkeveréssel és gyorsítással előállított, mikrokristályos, amorf és kristályos ötvözetbevonatok és másként előállított rokonanyagok összehasonlító vizsgálata Mössbauer-spektroszkópiával és egyéb módszerekkel” c. témára összesen 14,6 M Ft-ot, ebből 2010-re 3,6 M Ft-ot nyertek el.

Az OTKA (ERA Chemistry) által támogatott (összesen: 34 M Ft; 2010-ben: 14 millió Ft) „Fe-kelátok és komplexek felvétele és mozgása a rizoszférában” c. témában vashiányos növények vasellátására alkalmazható, természetes Fe-kelátok (Fe(III) és Fe(II)-glükonátok, Fe(III) és Fe(II)-lignoszulfátok) Mössbauer-spektroszkópiai és analitikai mérését végezték el.

OTKA-CNK (kiemelt célzott alapkutatások) -pályázati témával („Önszerveződő lamellás rendszerek szerkezete és dinamikája”) összesen 29 M Ft-ot nyertek el.

Az NKTH-által támogatott Jedlik Á. program egyik témájára („Nanorészecskéhez kötött molekulárisan célzott daganaellenes jelátviteli gyógyszerhatóanyag és kapcsolódó diagnosztika integrált fejlesztése”) 22,9 M Ft-os támogatást nyertek.

A pályázat keretében 2010-ben egy új fejlesztésű rákellenes hatóanyag (EGFR-gátló) liposzómás formuláját állították elő. In vivo képalkotási technikával kimutatták a hatóanyag célzott bejuttatásának sikerességét.

Az „Innovatív bio-energetikai és környezetvédelmi eljárás, ill. prototípus-fejlesztése” c. témára a Terra Humana Kft.-vel közösen nyerték el a Nemzeti Fejlesztési Ügynökség (GOP 1.1.1.-08 sz.) pályázat támogatását, ami összesen: 27,3 M Ft.

A projektben végzendő kutatások: nemesfém nem tartalmazó, promoteált, hordozós Ni-katalizátor kifejlesztése különböző eredetű és összetételű pirolízis gázok katalitikus, vízgőzös reformálására, a reakció és a katalizátor-regenerálás körülményeinek optimalizálása, a katalizátor formázása, a méretnövelt katalizátor gyártástechnológiájának kidolgozása, katalizátorkészítés a reformáló reaktor prototípusához.

## V. A 2010-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Varga Z, Berényi Sz, Szokol B, Órfi L, Kéri Gy, Peták I, Hoell A , Bóta A: A closer look at the structure of sterically stabilized liposomes: A small-angle X-ray scattering study. Journal of Physical Chemistry B - Condensed Matter Materials Surfaces Interfaces and Biophysical, 114(20): 6850-6854 (2010)
2. Paszternák A, Felhősi I, Pászti Z, Kuzmann E, Vértes A, Kálmán E, Nyikos L: Surface analytical characterization of passive iron surface modified by alkyl-phosphonic acid layers. Electrochimica Acta, 55: 804–812 (2010)
3. Pászti Z, Hakkel O, Keszthelyi T, Berkó A, Balázs N, Bakó I, Guczi L: Interaction of carbon monoxide with Au(111) modified by ion bombardment: a surface spectroscopy study under elevated pressure. Langmuir, 26: 16312-16324 (2010)
4. Boda L, Onyestyák Gy, Solt H, Lónyi F, Valyon J, Thernesz A: Catalytic hydroconversion of tricaprylin and caprylic acid as model reaction for biofuel production from triglycerides. Applied Catalysis A: General, 374: 158–169 (2010)
5. Lónyi F, Solt HE, Valyon J, Decolatti H, Gutierrez LB, Miró E: An operando DRIFTS study of the active sites and the active intermediates of the NO-SCR reaction by methane over In,H- and In,Pd,H-zeolite catalysts. Applied Catalysis B-Environmental, 100: 133-142 (2010)
6. Dömök M, Oszkó A, Baán K, Sarusi I, Erdőhelyi A: Reforming of ethanol on Pt/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-ZrO<sub>2</sub> catalyst. Applied Catalysis A: General, 383(1-2): 33-42 (2010)

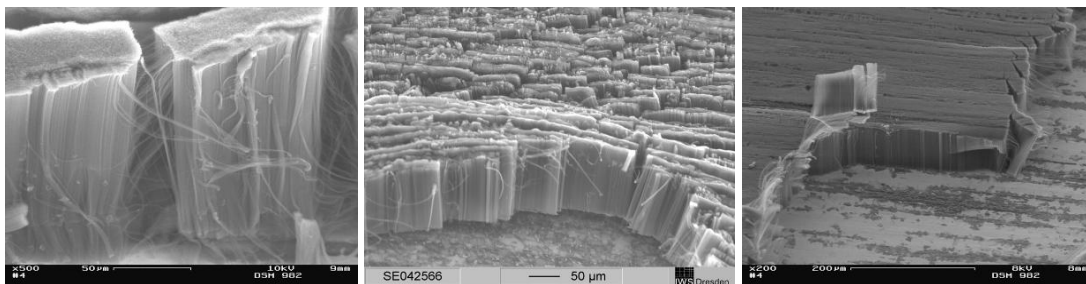
## Az MTA KK Nanokémiai és Katalízis Intézetének kiemelten sikeres kutatási területei 2010-ben

### *Szén-nanocső alapú szuperkondenzátorok*

A szuperkondenzátorok fejlesztése a nanotechnológia fejlődésével igen nagy lendületet vett. Jelenleg nagy porozitású aktív szénrétegeket használnak elektródként. A MTA Kémiai Kutatóközpont, Nanokémiai és Katalízis Intézet egyik fontos kutatási területe: a szén-nanocső(carbon nanotube = CNT)-rétegek kialakítása és alkalmazási lehetőségei. A nanocső-rétegek több szempontból előnyösek: nagy a fajlagos felületük, közel azonos méretű pórusokat tartalmaznak, vezetési tulajdonságaik kiválóak. Mindez elméletileg nagyobb kapacitást tesz lehetővé, mint amekkora az aktív szenes szuperkondenzátoroké.

A drezdai Fraunhofer Intézettel együttműködésben fém hordozókra atmoszferikus kémiai páraleválással (chemical vapor deposition = CVD) három dimenzióban (3D) vertikálisan rendezett szénnanocső-réteg kialakításán, szendvicsszerkezetű elektrokémiai cella fejlesztésén és a cella teljes körű elektrokémiai jellemzésén dolgoznak.

Kísérleteik során optimalizálták a nanoszerkezetű katalizátor vékonyréteg-összetételét, a leválasztási körülményeket, valamint az atmoszferikus CVD-vel történő szénnanocső-réteg növesztés kísérleti paramétereit. Tömör, homogén, vertikálisan rendezett szerkezetű 200 µm hosszú szénnanocső-réteget sikerült kialakítaniuk (1. ábra).



1. ábra. Három dimenzióban rendezett szénnanocső-erdő elektronmikroszkópos felvételei

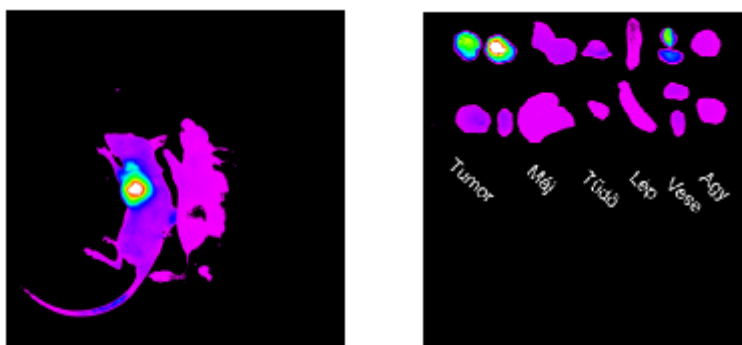
Szendvicsszerkezetű elektrokémiai teszt cellát fejlesztettek ki, mellyel sikerült a rendezett szerkezetű szénnanocső-rétegek elektrokémiai energiátárolás szempontjából előnyös tulajdonságait igazolniuk. Kis soros ellenállást kaptak, ami a rendezett szerkezetű nanocső-rétegek belsejében lejátszódó gyors iontranszportnak és a CNT nagy elektromos vezetőképességének az eredménye. Ennek következtében a CNT-alapú szuperkondenzátorok teljesítménysűrűsége (100-200 kW/kg) jelentősen meghaladja a jelenleg kereskedelemben kapható aktív szén alapú termékekét. Problémát okoz azonban a megfelelő mértékű energiasűrűség elérése, a szén-nanocső kis sűrűsége miatt az egységnyi hordozóra leválasztható CNT aktív tömege kicsi.

A CNT-alapú szuperkondenzátorok stabilitása rendkívül jó, 10000 töltés-kisüléses ciklus után sem mutatható ki kapacitáscsökkenés. Ez a réteg és az elektrolit inert természetének tulajdonítható.

A CNT-alapú szuperkondenzátorok alkalmazási területét korlátozza azonban, hogy az önkisülés sebessége viszonylag nagy, így önmagukban nem, csak kombinált rendszerekben, rövid idejű energiátárolóként kerülhetnek alkalmazásra.

### *Tüdőrák kezelésére alkalmas liposzómás készítmény fejlesztése és tesztelése*

A MTA KK Nanokémiai és Katalízis Intézetben liposzóma-hordozós, tumorelles szer állítottak elő. A liposzóma nanorészecskék hatását immunrendszerében gyengített (Hairless SCID) egereken képzett humán (pl. tüdő adenokarcinóma) tumorban, ill. egyéb testrészekben vizsgálták „in vivo” és „ex vivo” képalkotó technikával. A technikákhoz a hozzáférést a Semmelweis Egyetem I. Patológia Intézete biztosította. A kettős kinárgátlót, mint tumorelles hatóanyagot tartalmazó liposzóma-hordozós szer dúsulása az élő kísérleti állat tumorában a készítmény beadása utáni 6. napon „in vivo”, illetve a kezelést követő 10. napon a leölt állat daganatában és veséjében „ex vivo” megfigyelhető volt (1. ábra). A kezelt állat szöveteiből metszetet készítettek és fluoreszcens immunhisztokémiai módszerrel kimutatták, hogy a liposzóma-hordozós rendszer az ereken kívül halmozódik fel.



1. ábra. A bal oldali kép „in vivo” képalkotó technikával mutatja egy tumorelles szer dúsulását a daganatban a szer beadása utáni 6. napon egérben egy tisztán liposzómával hasonlóan kezelt tumoros egér mellett. Jobb oldali kép: példa az „ex vivo” képalkotó technika alkalmazására. Egy tumorelles szerrel és egy tisztán liposzómával kezelt egeret 10 nappal a készítmény beadása után leöltek, daganatát és szerveit elkülönítették. Csak a tumorelles szerrel kezelt állat tumorában, illetve veséjében (fölső sor) volt megfigyelhető a szer dúsulása.

## VI. A kutatóhely főbb mutatói 2010-ben

A kutatóhely neve: Kémiai Kutatóközpont, Nanokémiai és Katalízis Intézet

<b><u>1. LÉTSZÁMADATOK</u></b>			
Átlagléttség <sup>1</sup> :	105	Ebből kutató <sup>2</sup> :	69
PhD, kandidátus:	34	MTA doktora:	11
		Rendes tag és levelező tag:	1
Az intézethez kötődő akadémikusok száma <sup>3</sup> :			2
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma <sup>4</sup> :			27
<b><u>2. PUBLIKÁCIÓK</u></b>			
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>5</sup> :			67
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>6</sup> :			66
Tanulmány, cikk <sup>7</sup> hazai tud. folyóiratban	magyarul:	1	idegen nyelven: 0
külföldi folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven: 54
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven: 45
Könyv <sup>8</sup>	magyarul:	0	idegen nyelven: 0
Könyvrész, könyvfejezet <sup>9</sup>	magyarul:	0	idegen nyelven: 2
<b><u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u></b>			
Összesített impaktfaktor <sup>10</sup> :	118,42	Összes független hivatkozás száma:	1102
Összes hivatkozás száma <sup>11</sup> :	1340		
<b><u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2010-BEN</u></b>			
Tud. fokozat megszerzése <sup>12</sup> :	PhD:	4	MTA doktora: 0
<b><u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u></b>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma <sup>13</sup> :	0	külföldi oltalmak száma <sup>14</sup> :	1
<b><u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u></b>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma <sup>15</sup> :			32
		poszterek száma:	22
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	9	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	8
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>16</sup> :	28		
<b><u>7. A HAZAI FELSOROKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u></b>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>17</sup> :			12
Témavezetések száma: TDK munka:	2	Diplomamunka (BSc):	2
Diplomamunka (MSc):	5	PhD:	12
<b><u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u></b>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>18</sup> :		437,51	MFt
Fiatalkutatói álláshelyek száma <sup>19</sup> :	6	Teljes saját bevétel:	327,37 MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	MFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			8
		A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	22,62 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázati témáinak száma:			20
NKFP:	9	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	19,23 MFt
Egyéb:	11	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
ÚMFT témák száma:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			11
		A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	189,68 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma:			6
EU forrásból:	6	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	61,08 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	1,76 MFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási bevétel:			0 MFt



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

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

Telefon: 438-1120, Fax: 438-1143

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

### **I. A kutatóhely fő feladatai 2010-ben**

Az intézet fő kutatási feladata az MTA Kémiai Kutatóközpont E-1287/2010. sz. Alapító okirat módosítása szerint 2010. évben a következő volt:

innovatív kutatások folytatása a kémiában és a hozzá kapcsolódó tudományterületeken, elsősorban a szerkezeti biológia és kémia területén, amelyek különösen: szupramolekuláris kémiai (önszerveződő) rendszerek, fluoreszcens próbák, fotokrom vegyületek, molekulák kölcsönhatásai, molekuláris dinamikai szimulációk és kvantumszimulációk tanulmányozására terjednek ki.

Az intézet kutatási alapfeladataihoz kapcsolódóan egyéb feladatokat is ellátott, így:

- tevékenységével összefüggésben tudományos, szak- és ismeretterjesztő kiadványokat jelentetett meg;
- együttműködött hazai kutatóintézetekkel, velük közös kutatásokat folytatott; kapcsolatokat tartott fenn és létesített más országok tudományos intézményeivel, nemzetközi tudományos társaságokkal; elősegítette a magyar kémiai kutatások jelenlétét a tudományág nemzetközi életében;
- hazai és nemzetközi tudományos programokat és konferenciákat szervezett;
- szorgalmazta és segítette a tudományos kutatások eredményeinek társadalmi és gazdasági hasznosítását;
- felsőoktatási intézményekkel együttműködve részt vett az oktatómunkában, közös kutatási, képzési és továbbképzési feladatokat látott el;
- hazai és nemzetközi kutatási pályázatokon vett részt;
- kutatási megbízási szerződések keretében végzett K+F-tevékenységet;
- hozzájárult a kutatóközponti szakkönyvtár működtetéséhez.

### **II. A 2010-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények**

#### **a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények**

##### *Szerkezeti biológiai és kémiai kutatások*

A tioszemikarbazon vegyületeket széles körben használják fémionok spektrofotometriás és spektrofluorimetriás kimutatására. Ezeknek a vegyületeknek jelentős biológiai hatása van, így több származék antimaláriás, antibakteriális és antitumor hatású. Komplexképző sajátosságukat azonban rossz oldhatóságuk miatt eddig csak szerves oldószerekben vagy szilárd fázisban vizsgálták. Az intézet kutatói által végzett vizsgálatok célja az volt, hogy 30%-os DMSO-víz oldatban összehasonlítsák néhány tioszemikarbazon ligandum biológiailag fontos fémionokkal (Cu(II), Fe(II), Zn(II)) történő komplexképzését. A paramágneses réz(II)komplexek vizsgálatában a szobahőmérsékleten felvett, ún. „kétdimenziós” ESR-spektrumok megbízható egyensúlyi és szerkezeti információkat nyújtottak. A

spektrumfelbontás során a pH-függő spektrumsorozatot együttesen értékelték ki, és meghatározták a komplexek eloszlását. A vizsgálat kimutatta, hogy az N-metilezett származékok esetén az S-koordináció jelentős vetélytársa lehet a piridin-N koordinációjának, és mind a CuL<sub>2</sub>H, mind a CuL<sub>2</sub> összetétel kétféle izomerszerkezetben valósulhat meg. Az ESR-spektrumokban mérhető intenzitáscsökkenés alapján kimutatták, hogy biológiai pH-n kétszeres ligandumfeleslegben a domináns vegyület egy Cu<sub>2</sub>L<sub>3</sub> összetételű kétmagvú komplex.

Az oxigén stressz által keltett reaktív oxigén specieszek kimutatására rendkívül hatékony spincsapda eljárást dolgoztak ki, felhasználva a calix-pirrol vegyületek nagy anionaffinitását. A kalix[4]pirrol összekapcsolása ciklikus nitronvegyülettel nagyságrendileg gyorsította meg a szuperoxid szabad gyök csapdázási sebességét.

A maximin-4 nevű, antimikrobiális sajátosságokkal rendelkező peptid mágneses magrezonancia-spektroszkópiai (NMR) vizsgálata során megállapították, hogy mind SDS-micellákban, mind pedig 50% metanol jelenlétében a peptid hélix-kanyar-hélix konformációt ölt. Szilárd fázisú NMR-spektroszkópiai vizsgálatokkal különböző összetételű lipid kettősrétegekben tanulmányozták a peptid orientációját. Azt találták, hogy az aminosav-szekvencia közepén a hélix V alakban megtörik. Az eredmények elősegítik az antimikrobiális peptidok hatásmechanizmusának és a bakteriális szelektivitásuk mögött rejlő tényezők jobb megértését.

NMR-spektroszkópiai módszerekkel tanulmányozták a komplexátlatlan és a komplexált humán epesav-kötő fehérje (I-BABP) különböző időskálán zajló belső mozgásait. Megállapították, hogy ligandumkötődés hatására nő a portálrégióval szomszédos hurok rendezettsége a ps-ns időskálán.

Az MTA KK Biomolekuláris Kémiai Intézettel végzett együttműködésben nemfémes borán/amin hidrogénező, katalitikus rendszerek hőmérsékletfüggő oldat- és szilárd NMR szerkezetvizsgálatát végezték el. Továbbfejlesztették a multinukleáris <sup>10</sup>B és <sup>11</sup>B-NMR spektroszkópia méréstechnikai lehetőségeit. Megállapították, hogy a <sup>10</sup>B-NMR-mérések alkalmasak a szabad és datív kötésben lévő boránok arányának és reaktivitásának meghatározására.

Szilárd fázisú <sup>1</sup>H-<sup>1</sup>H CRAMPS NMR-módszerekkel termoreszponzív gélek szerkezetvizsgálatát végezték el. A mérések a polimer láncok és az őket stabilizáló molekuláris alkotók között mutattak ki kölcsönhatásokat. Folyadékkristályok és polietiléneket stabilizáló aril-alkil foszfinok bomlástermékeinek szerkezetét határozták meg.

2010-ben a röntgendiffrakciós szerkezetvizsgálatok területén organokatalizátorok új komplexeit állították elő, és meghatározták kristályszerkezetüket. Kísérleteik bizonyították a pentavalens germánium létezését. Az irányított szublimáció jelenségét sikerült a parciális izostrukturalitás segítségével megmagyarázniuk.

Tömegspektrometriai mérések értelmezésének céljából, kvantumkémiai módszerekkel megállapították a poli(etilén-oxid)-ok és alkálifém-ionok komplexeinek szerkezetét, az alkálifém-ion kötési energiáját és a legbelső koordinációs héjat alkotó oxigénatomok számát 18-as polimerizációfokig. A kötési energia Li<sup>+</sup> > Na<sup>+</sup> > K<sup>+</sup> > Cs<sup>+</sup> sorrendben csökken, a koordinációs szám rendre 5, 6, 7 és 11. A kötési energia mindegyik alkálifémnél legalább 12-es polimerizációfokig növekszik. Megállapították, hogy csak a Li<sup>+</sup> és a Na<sup>+</sup> esetén van lehetőség arra, hogy a komplex a tömegspektrométerben olyan fragmentációs utakon is bomolhasson, amelyek szerkezeti információt hordoznak; K<sup>+</sup> és Cs<sup>+</sup> esetén az egyetlen fragmentációs csatorna az alkálifém-ion ledobása.



A széndioxid (CO<sub>2</sub>) vízben való oldódását ab initio metadinamikai módszerrel vizsgálva megállapították, hogy az általánosan feltételezett egy lépéses mechanizmussal szemben a szénsav képződése két elemi lépésen keresztül zajlik, és először bikarbonát képződik. Ennek az eredménynek jelentősége lehet a korábbi kinetikai eredmények értelmezésében, illetve az enzimkatalizált CO<sub>2</sub> megkötés értelmezésében.

Kvantumkémiai számítások segítségével felderítették egy pirazol alapú N-heterociklusos karbén újszerű gyűrűátrendeződésének mechanizmusát. Az eredmények alapján a gyűrűfelnylás egy E1cB típusú eliminációnak, míg a gyűrűzáródás egy 6π-elektronciklizációs folyamatnak tekinthető.

Klasszikus- és kvantummechanikai reakciódinamikai módszerekkel kiszámították a gerjesztett O<sub>2</sub>- és H-atom reakciójának hatáskeresztmetszetét, és megállapították, hogy az égések kémiájában alapvető (H + O<sub>2</sub>)-reakció lejátszódását nem segíti elő az O<sub>2</sub>-molekula elektrongerjesztése.

Elméleti reakciódinamikai módszerekkel megállapították, hogy a tripllett gerjesztett állapotú metán disszociációja során kizárólag CH<sub>3</sub> és H keletkezne, de a CH<sub>3</sub> termék kvantumállapota nem egyezik a kísérletileg észlelhetővel, ezért a tripllett állapot részvétele a metán fotodisszociációjában gyakorlatilag kizárható.

Modellszámításokat végeztek az atomi teljes spinek (spin-négyzetek) viselkedésére kötődisszociáció során, valamint aromás és antiaromás rendszerekben.

Extrém mértékben lokalizált nemortogonális lokalizált molekulapályákat definiáltak és programozták be. Az új módszer lehetővé teszi annak meghatározását, hogy egy molekula elektronszerkezetéről alkotott kvalitatív képünk mennyire van összhangban a kapott hullámfüggvénnyel.

Módosított energiadekompozíciós módszert javasoltak, amelyben a hullámfüggvény ionos tagjaira vett korrekció lehetővé teszi, hogy a kapott egy- és kétcentrumos energiakomponensek számszerű értékei közelebb legyenek a kémikusok várakozásához.

Eljárást dolgoztak ki a Stark-effektus figyelembevételére a multifotonos ionizáció egyszerűsített szimulációja során.

### *Szupramolekuláris kémia, önszerveződő rendszerek tanulmányozása*

2010-ben előállítottak és egykristály röntgendiffrakcióval szerkezetileg jellemeztek egy olyan arany (Au)(I) makrociklust, melynek kristályrácsa bár nem tartalmaz nagyméretű pórusokat, mégis képes egykristály-egykristály átalakulás során vendégmolekulákat megkötni, majd kiengedni, anélkül, hogy a kristályszerkezet összeomolna. A vendégmolekulák megkötésének és kiengedésének folyamatát egy új mechanizmus segítségével magyarázták.

A globális felmelegedés következményeként mind sürgetőbb a széndioxid-megkötő rendszerek kifejlesztése. Ez az újonnan előállított Au(I) szupramolekula szén-dioxid megkötő rendszerként működhet, hiszen nagy szelektivitással képes a gázt elnyelni, megkötni, majd irányított módon kiengedni. Ezek az eredmények nagymértékben elősegíthetik a nemporózus anyagok vendégmolekula és gázmegkötő tulajdonságának pontosabb megértését.

### *Funkcionális vegyületek kutatása*

A biológiailag funkcionális vegyületek nagyműszeres szerkezetvizsgálata és analitikája témában módszert dolgoztak ki glikoproteinek dúsítására egyszerű ioncserélő, szilárd fázisú extrakciós módszerrel, s azt sikerrel alkalmazták a haptogloblin és complement C3 fehérjék glikozilációs mintázatának keverékből történő megállapítására. Szoftvert fejlesztettek ki a

glikozilációs mintázat kvantitatív jellemzésére, melyet klinikai vérplazma mintákon tesztelnek.

Megállapították a tömegspektrometriában legfontosabb standard anyag, a leucin enkefalin bomlási mechanizmusát, meghatározták a bomlási folyamat aktiválási energiáját és entrópiáját, melyek a jövő számára alapvető referencia adatokként fognak szolgálni.

A sejtek közötti kommunikáció utóbbi években felfedezett különleges esete a mikrovezikulumokon keresztül történő jelátadás. Meghatározták különböző eredetű mikrovezikulumok proteínösszetételét, megállapították, hogy az észlelt alfa-enoláz fehérjekomponens közvetlen kapcsolatban van az egyik legfontosabb népbetegség, a reumatoid arthritis kialakulásával. Ez a felismerés jó kiindulási alapul szolgálhat a betegség diagnosztikájához és gyógyításához.

Különböző micelláris rendszerekben Philips X'Pert diffraktométerrel tanulmányozták a tumorbetegségek kezelésére engedélyezett kemoterápiás szerek hordozóanyagait. Az eredmények azt mutatják, hogy bizonyos hőmérsékletek felett a kvázikristályos szerkezet megszűnik.

2010-ben folytatták az Au(I) – szerves oldószerek kölcsönhatásának vizsgálatát. Az új, klasszikus molekuláris dinamikai potenciál segítségével változatosabb, Au(I)-tartalmú komplexeket tanulmányoztak nemvízes oldatokban.

Klasszikus molekuláris dinamikai potenciálok fejlesztéséhez szükséges elméleti kémiai számításokat végeztek a lantanoida komplexek ( $[Ln_2M_3(oda)_6(H_2O)_6]$ , ahol  $Ln=La, Sm$  és  $M = Cu, Co$ ) vizes oldatainak molekuláris dinamikai szimulációjához. Ezek a komplexek nagyon jól oldódnak vízben, ami alkalmassá teszi őket folyadékfázisú röntgendiffrakciós mérések végzésére, valamint az önszerveződés tanulmányozására.

A metanolreformálás során a palládium/cink (Pd/Zn) 1:1-arányú felületi ötvözetén adszorbeálódó részecskék és a felület kölcsönhatási energiáját vizsgálták, a metanolreformálás mechanizmusának jobb megértése céljából. Kimutatták, hogy a Pd(111)-felületen megkötődő Zn-atomok olyan kötőhelyeket preferálnak, melyek esetén a szomszédos Pd-atomok száma maximális. A felületi ötvözet jellemzően (2x1) szerkezetű.

Módszert dolgoztak ki a spiropirán  $\rightleftharpoons$  merocianin egyensúly és a merocianin + fémion  $\rightleftharpoons$  fémkomplex szimultán egyensúly vizsgálatára. Meghatározták az egyik alapvegyület (6-nitro-BIPS) egyensúlyi állandóit négy fémionnal történő komplex képződésében. Kimutatták, hogy szulfonátokalexarének kiváló hordozóanyagok a rákellenes hatású koralin alkaloidnak. Feltárták az antibakteriális és nemlineáris optikai sajátságokkal rendelkező 4-hidroxi-4'-nitrosztilben fényelnyelést követő folyamatait és a 2'-nitro szubsztitúció hatását. Alkilmetilimidazólium típusú ionfolyadékok és a kukurbit[7]uril makrociklusos vegyület kölcsönhatásának kalorimetriás vizsgálatával megállapították, hogy a molekulászerkezet változtatása miként befolyásolja a komplexképződés termodinamikai paramétereit.

A kutatóközpont organokatalízis kutatócsoportja által újonnan előállított borán ( $B(C_6F_5)_2(Mes)$ ) különleges reaktivitásának értelmezésére elméleti úton felderítették a frusztrált Lewis sav-bázis pár (FLP) típusú heterolitikus hidrogénhasítás energetikai viszonyait. Megállapították, hogy a reakció sebességét az ún. frusztrált komplex szerkezete alapvetően meghatározza. A  $B(C_6F_5)_2(Mes)$  borán leányékkolt savas centruma miatt sikeres FLP csak viszonylag kisméretű bázissal kombinálva jöhet létre.

A bullvalén és barbaralén molekulák degenerált periciklikus intramolekuláris átrendeződésének mechanizmusát Born-Oppenheimer molekuladinamikai szimulációkkal vizsgálva, megmutatták, hogy az aromáság kialakulása az átrendeződés átmeneti állapotában

igen erős szervező erő. Szerkezeti, elektronszerkezet és szabadenergia számításokkal igazolták, hogy a ciklikus delokalizáció magas hőmérsékleten is képes a jelentős (gyakran közel 1 Å nagyságú) szerkezeti fluktuációk szinkronizálására és arra, hogy az átrendeződést a koncertikus reakcióúton vezesse.

Car-Parrinello molekuladinamikai számítások és a metadinamikai módszer együttes használatával, az iparilag fontos Wacker-reakció mechanizmusát vizsgálva, megállapították, hogy az ún. külső mechanizmus is összhangban áll mind a reakció kinetikájával, mind pedig a palládium komplex kémiai sajátosságaival, nevezetesen a katalitikusan aktív  $[PdCl_2(H_2O)(C_2H_4)]$  komplex sztereo-kémiájával és a ligandumok transz-hatásának versengésével. A vizsgálatok alapján arra következtettek, hogy a sebességmeghatározó lépés nem a hidroxipalladációs lépés.

Multikonfigurációs eljárással meghatározták a  $CH_2BrCl$  molekula triplett elektronállapotait és a szingulett - triplett állapotok közti spin-pálya csatolásokat.

Összehangolt kísérleti és kvantumkémiai vizsgálatokkal megállapították, hogy alkén-vinilborátok cink-dimetil katalizátor jelenlétében nitronokkal *N*-allil-hidroxilaminokat képeznek, és azonosították a valószínű reakcióutat, amely a számítások szerint alkalmas lehet a termékek sztereoselektív előállítására.

### **b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között**

Az intézet kutatói tevékenyen részt vettek a *Kémiai Panoráma* című, a Kémiai Kutatóközpont kiadásában megjelenő ismeretterjesztő folyóirat szerkesztésében. Ebben több tudományos ismeretterjesztő cikket jelentettek meg az év folyamán.

Az „AKI Kíváncsi Kémikus” című, középiskolásoknak szervezett, tudománynépszerűsítő, a diákok természettudományos pályaválasztását ösztönző, tehetséggondozását és utánpótlás-nevelését segítő, nyári tábor szervezésében több diák dolgozott az intézet laboratóriumaiban, egy-egy hétig.

Előadást tartottak Cambridge Scientific Database megismertetése céljából a Szegedi Tudományegyetem három intézete számára.

A Baár-Madas Református Gimnáziumban szervezett Tudományos Napon "Hogyan lesz a látható láthatatlan? Molekulaszerkezeti vizsgálatok" címmel középiskolások részére tartottak előadást.

Az intézet kutatói három magyarországi új ásvány (Kabazit-Mg; Ammóniomagnéziovoltaít, Klajit) felfedezésében vettek részt, amiről az MTV híradójában számoltak be.

## **III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2010-ben**

### *Hazai kapcsolatok*

Az intézetnek széles körű hazai kapcsolatrendszere van. Elsősorban az egyetemi és más akadémiai kutatóhelyekkel folytatnak kutatási együttműködések. Az intézet 18 kutatója vesz részt az egyetemi oktatómunkában. Tíz fiatal kutató készíti PhD-disszertációját az intézetben. 2010-ben 17 publikációt jelentettek meg egyetemi kutatókkal közösen.

Az intézet és a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem (BME) közös laboratóriumot működtet a lézerspektroszkópiai kutatások területén.

A „Hipervalens vegyületek előállítása, szerkezetvizsgálata és kapcsolódó elméleti kémiai számítások” c. témában a BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszékével dolgoznak

együtt. Az egykristály-szerkezetkutatás és az elméleti számítások együttes alkalmazásával hipervalens elemet tartalmazó vegyületek szerkezetét határozták meg. 2010-ben egy közös publikációt jelentettek meg.

A „Szuperkritikus extrakcióval történő rezolválás mechanizmusának felderítése” c. témában a BME Szeretlen és Analitikai Kémia Tanszék és Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék kutatóival közösen publikálták eredményeiket.

A „Hidrogének biológiailag aktív specieszekkel vizes fázisban történő kölcsönhatásainak vizsgálata” c. OTKA-témában (együttműködő partner: BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék) 2010-ben egy közös közleményt jelentettek meg és egy előadást tartottak.

Az „Antimikrobiális peptidok hatásmechanizmusának vizsgálata” c. témában (együttműködő partner: az Eötvös Loránd Tudományegyetem (ELTE) Szerves Kémiai Tanszék Peptidkémiai Kutatócsoport) folytatott sikeres közös munka során oldat- és szilárd fázisú NMR-spektroszkópiai vizsgálatokkal különböző összetételű membrán mimetikumokban, illetve lipid kettősrétegekben tanulmányozták a maximin-4 nevű antimikrobiális peptid konformációját és orientációját. A vizsgálatok alapján meghatározták, hogy a peptid bakteriális szelektivitásában jelentős szerepük van az elektrosztatikus tényezőknek. Az együttműködésből 2010 végére két elfogadott publikáció született.

A Szegedi Tudományegyetem Gyógyszertechnológiai Intézetével közös kutatásokat folytatnak a „Makromolekuláris hatóanyaghozó mátrixok és szilárd fázisú készítmények vizsgálata szilárd fázisú NMR-spektroszkópiával” c. témában. 2010-ben egy közös előadásban foglalták össze az újabb eredményeket.

A Magyar Állami Eötvös Loránd Geofizikai Intézet részére megbízási szerződés keretében FT-IR-mikroszkóppal speciális méréseket végeztek.

A „Bakteriális flagellum fehérjéinek vizsgálata” c. témában az SZBK Enzimológiai Intézettel és a Pannon Egyetem, Nanotechnológia Tanszékével dolgoznak együtt. NMR-spektroszkópiai módszerekkel tanulmányozták egy vélhetően a flagellum fehérjék transzportjában szerepet játszó szignál peptid konformációját. Megállapították, hogy a peptid preferáltan alfa-hélix konformációjú. Micellás oldatokban végzett vizsgálatok a peptid membránaktivitására utalnak.

Szerződés alapján végzett munka keretében (partnerek: Cyclolab Kft., Fajro Kft.) titándioxid, illetve szilícium-dioxid szuszpenzió szingulettoxigén-termelő képességét vizsgálták. Mérési módszert dolgoztak ki és alkalmaztak fényszóró szuszpenziók jellemzésére.

Megbízási szerződés kapcsán (partnerek: Evo Blocks Kft., Luminochem Kft.) meghatározták számos új anyag molekuláris szerkezetének és a kísérleti körülmények változtatásának hatását a fluoreszcenciás tulajdonságokra.

Az Izotóp Kft. részére megbízási szerződés keretében spektroszkópiai anyagvizsgálati és minőségellenőrzési szolgáltatást végeztek.

## *Nemzetközi kapcsolatok*

Az intézet igen kiterjedt nemzetközi kapcsolatokkal rendelkezik. A kapcsolatok eredményességét mutatja, hogy 2010-ben 35 közös tudományos publikációt jelentettek meg az elért eredményekről.

Az Ukrán TA-MTA kétoldalú megállapodás keretében a „Biomolekulák tömegspektrométerben végbemenő elemi reakcióinak modellezése” c. témában (együttműködő partner: B.Verkin Institute for Low Temperature Physics and Engineering of the National Academy of Sciences of Ukraine, Kharkov, Ukrajna) polimereknek biológiailag aktív vegyületekkel való kölcsönhatását tömegspektrometriai módszerekkel vizsgálva megállapították, hogy az oxietilezett glicerin oligomer, illetve polietilén-glikol képes (pozitív vagy negatív töltésű) komplexeket képezni különböző aminosavakkal, s ezen komplexek szerkezetére is nyertek információkat molekuladinamikai számításokkal. Eredményeiket nemzetközi konferencián mutatták be.

Az „Alkaloidok fény hatására végbemenő folyamatai biológiai fontosságú rendszerekben” c. téma (MTA-DFG-egyezmény, együttműködő partner: Max Planck Institute for Bioinorganic Chemistry, Mülheim an der Ruhr, Németország) keretében feltárták, hogy a mikrokörnyezet sajátosságai és a 2'-nitro szubsztitúció miként befolyásolja az antibakteriális és nemlineáris optikai sajátosságokkal rendelkező 4-hidroxi-4'-nitroszilben fényelnyelést követő folyamatait. Kimutatták, hogy a triplettképződés sebessége csökken, a sugárzásmentes energiavesztés pedig gyorsul a közeg polaritásának növelésekor. Az eredményekről két közös tudományos publikációban számoltak be.

MTA-DFG-egyezmény keretében (együttműködő partner: Institute of Physical Chemistry, Friedrich Schiller University Jena, Németország) a „Halometánok: kvantumkémiai és kvantumdinamikai számítások a fotodisszociáció lézeres szabályzására” c. témában meghatározták a  $\text{CH}_2\text{BrCl}$  molekula triplett elektronállapotait és a szingulett - triplett állapotok közti spin-pálya csatolásokat. 2010-ben két közös publikációt jelentettek meg.

Az „Izostrukturalitás és molekuláris izometritás vizsgálatok” c. téma (együttműködő partner: Institut for Organic Chemistry, Technische Universität Bergakademie Freiberg, Németország) keretében folytatott közös munka során leírták a ritkán vizsgált, laterálisan szubsztituált kalixarének konformációs viselkedésének és zárványkomplex képzésének folyamatát, valamint a fluorszubsztitúció hatását a molekula konformációjára. Két közös cikket publikáltak.

3-Aminopirazol származékokat és azok komplexeit állították elő, jellemezték az anyagok szerkezetét, és elméleti számításokat végeztek a szokatlan szerkezetű Cu(II) és Ni(II) komplexek esetében. A Faculty of Sciences, University of Novi Sad kutatóival közösen két cikkben számoltak be az eredményekről.

MTA-CNRS-egyezmény keretében (együttműködő partner: Laboratoire Léon Brillouin, Saclay, Franciaország) a túlhűtés jelenségét tanulmányozták mezopórusos anyagokban. Különböző zeolitokban és MCM 41-ben abszorbeált túlhűtött víz szerkezetének tanulmányozásával kimutatták, hogy a pórusokban a folyékony víz szerkezetének megfelelő vízfázis található  $-40^\circ\text{C}$  hőmérséklet közelében. Az eredményeket közös publikációban foglalták össze.

A „Reaktív oxigénspecieszek és biológiai fontosságú komplexek ESR-vizsgálata” c. témában (együttműködő partnerek: Université de Provence, Marseille, Université Paris Descartes, Franciaország, The Ohio State University, USA) végzett közös kutatások eredményeként négy közös folyóiratcikket jelentettek meg.

A Stockholm University, Department of MMK, Svédország kutatóival „A rezgési spektrumok tanulmányozása kísérleti és kvantumkémiai módszerekkel” c. témában különféle kémiai anyagok IR- és Raman-spektrumainak elemzését és részletes értelmezését végezték el elméleti számítások segítségével.

A Magyar-mexikói Tét-egyezmény keretében művelt „A living polimerizáció ESR-vizsgálata” c. téma eredményeiről (együttműködő partner: Science & Technology of Polymers at CIQA Saltillo Area, Mexikó) négy közös előadást tartottak 2010-ben.

Magyar-osztrák Tét-egyezmény keretében (együttműködő partner: University of Vienna, Ausztria) a „Víz érzékelésére szolgáló fluoreszcens próbák biológiai rendszerek vizsgálatára” c. témában 7-amino-kumarin származékok fotofizikai sajátságait határozták meg.

Magyar-spanyol Tét-egyezmény keretében (együttműködő partner: Universitat Autònoma de Barcelona, Spanyolország) a vízben lejátszódó katalitikus reakciókat vizsgálták Car-Parrinello metadinamikai szimulációk segítségével. Megállapították, hogy az ún. belső mechanizmus valószínűsége, az etilénsoport erős transz hatása miatt, kicsiny. Az eredményekről közös publikációban számoltak be.

A Department of Chemistry and Institute of Computational Chemistry, University of Girona (Spanyolország); University of New Mexico, Albuquerque, NM (USA); Department of Chemistry, Northwestern University, Evanston, IL (USA); Département de Chimie Moléculaire, CNRS-Université Joseph Fourier, Grenoble (Franciaország), Department of Physics, Stony Brook University, New York (USA), Institute of Physical Chemistry, Friedrich-Schiller-University Jena (Németország) és a University of Bari, Olaszország intézményekkel folytatott közös kutatások eredményeiről hét publikációban számoltak be.

Megszervezték a *Magyar Proteomikai Társaság Proteomikai Fórum-át* (2010. május 1-2.), amit Kőszegen tartottak meg. Ugyancsak megszervezték a *28th Informal Meeting on Mass Spectrometry* rendezvényét (2010. május 2-6.) Kőszegen, továbbá részt vettek a *4th Central and Eastern European Proteomic Conference* szervezésében, amit Bécsben tartottak meg 2010. augusztus 29. és szeptember 3. között.

#### **IV. A 2010-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása**

##### *Hazai pályázatok*

A „Kémia az életminőség javításért” c. KMOP-téma kutatásainak során (pályázati támogatás 2010-ben 1,4 M Ft) megállapították, hogy a titán-dioxid szuszpenzióban csak a látható tartomány rövid hullámhosszúságú szélén (400 nm környezetében) tapasztalható szingulett oxigénképződés. A szabadon rotáló 7-amino szubsztituenszt tartalmazó kumarinszármazékok gerjesztett állapotának élettartamát a poláros protikus oldószerek nagymértékben lerövidítik, míg a merev struktúrájú 7-amino szubsztituensek esetében az oldószer polaritása és protikus volta csak minimális szerepet játszik a gerjesztett állapot élettartamának befolyásolásában.

A „Nemkovalens kölcsönhatások szerepe biológiai fontosságú vegyületek fényelnyelés hatására végbemenő folyamataiban” c. OTKA-téma támogatása összesen: 13,4 M Ft, amiből 3,35 M Ft jutott 2010-re.

Az eddig elvégzett kutatások eredményeként kimutatták, hogy a 4-szulfonátokalexarének kiválóan alkalmasak gyógyszerhatóanyag hordozóként, mert például a rákellenes koralin-alkaloid molekulái közül annyit képesek megkötni, amennyi a makrociklus aromás csoportjainak a száma. Igazolták, hogy a 4'-nitro- és a 2',4'-dinitro-szubsztituált 4-hidroxisztilbének fotokémiai izomerizációja elsősorban tripllett gerjesztett állapoton keresztül megy végbe. Megállapították, hogy hidrogénhid-akceptor jellegű anyagok nagymértékben gyorsítják a szingulett gerjesztett állapot energiavesztését.

A „Bioligandumok fémkoordinációjának termodinamikai vizsgálata ESR-spektroszkópiával” c. OTKA-témában néhány nyíltláncú: Ac-HPHPH-CONH<sub>2</sub>, Ac-KHPHPHQ-CONH<sub>2</sub>, Ac-HHPHG-CONH<sub>2</sub>, Ac-HHPHGHPHG-CONH<sub>2</sub>, illetve elágazó láncú: (NH<sub>2</sub>-His)<sub>4</sub>(Lys)<sub>2</sub>Lys-CONH<sub>2</sub>, (NH<sub>2</sub>-His-His)<sub>2</sub>Lys-CONH<sub>2</sub>, (NH<sub>2</sub>-His-Gly)<sub>2</sub>Lys-CONH<sub>2</sub> peptid típusú metalloenzim modellvegyületet állítottak elő. Ezek oldatbeli egyensúlyi vizsgálata és oldatszerkezetének tanulmányozása részben már megtörtént. Ezen oligopeptideknél nagyobb tagszámú fémkötő peptideket állítottak elő biológiai módszerek segítségével. A tisztításra eredményes eljárásokat dolgoztak ki. CD és fluoreszcencia-spektroszkópiás, valamint tömegspektrometriás módszerekkel tanulmányozták a fémion-megkötő sajátságokat elsősorban cink(II)ionnal.

A témára fordítható összes támogatás: 4 M Ft, ebből 2010-ben: 1,15 M Ft.

„A sejtek közötti kommunikáció újonnan azonosított mikrovezikulum-útjának vizsgálata” c. OTKA-témában a fehérjéknek a mikrovezikulumokból történő kinyerésére általuk korábban kidolgozott mintaelőkészítési eljárást továbbfejlesztve, miniaturizálták az eljárást, és csökkentették a mintaelőkészítéshez szükséges időt. A Jurkat T-sejtekben sikerült kimutatniuk és azonosítaniuk 70 peptidet az eddig leírt 7 peptiden kívül.

A pályázati támogatás összesen: 24 M Ft, amiből 6 M Ft jutott 2010-re.

2010-ben „Önszerveződő aranyvegyületek szintézise és szerkezeti jellemzése különböző módszerekkel: röntgendiffrakció, NMR” c. OTKA-pályázatot nyertek.

A pályázat összes támogatása 16 M Ft, ebből 2010-ben: 3,8 M Ft.

Az újonnan előállított [Au<sub>2</sub>(*cisz*-dppe)<sub>2</sub>](NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub> (*cisz*-dppe = *cisz*-1,2-bisz(difenilfoszfino)etilén) arany(I) difoszfín komplexnek a kristályrácsa bár nem tartalmaz nagyméretű pórusokat, mégis képes vendégmolekulákat megkötni, majd kiengedni anélkül, hogy a kristályszerkezet összeomolna. Ez az arany(I) vegyület nagyon hatékony a CO<sub>2</sub> elnyelésében, megkötésében és irányított módon történő kiengedésében is.

OTKA-pályázatot nyertek el „A Reinecke só szupramolekuláris kémiája” c. téma kutatásaira. A támogatás összesen: 14 M Ft, ebből 2010-ben: 4 M Ft.

Új ferrocénium sókat állítottak elő. Több metatézis reakcióval egykristály-diffrakciós kísérletre alkalmas kristálymintákat növesztettek és meghatározták szerkezetüket.

### *Nemzetközi pályázat*

Az FP6-Marie Curie Early Stage Researcher Training projekt keretében (téma címe: „Polymer characterisation using electron capture dissociation and collision-induced dissociation multistage mass spectrometry”) a polimer fragmentáció tömegspektrometriai és elméleti vizsgálatában elért eredményeit az "Energetics of cationized PEG oligomers: a mass

spectrometric and theoretical size dependence study" című dolgozatban összegezve PhD fokozatot szerzett a kutatócsoport egyik fiatal kutatója.  
A pályázati támogatás összesen: 18 M Ft volt, amiből 6 M Ft jutott 2010-re.

#### V. A 2010-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Kim SU, Liu Y, Nash KM, Zweier JL, Rockenbauer A, Villamena F: Fast reactivity of a cyclic nitron-calix[4]pyrrole conjugate with superoxide radical anion: Theoretical and experimental studies. *Journal of the American Chemical Society*, 132(48): 17157-17173 (2010)
2. Faigl F, Mátravölgyi B, Erdélyi Zs, Pál K, Hessz D, Kubinyi M: Synthesis and resolution of 4,4,6,6-tetramethyl-4H,6H-pyrrolo[1,2-a][4,1]-benzoxazepine-1,10-dicarboxylic acid. *Tetrahedron: Asymmetry*, 21(24): 2920-2924 (2010)
3. Megyesi M, Biczók L: Considerable change of fluorescent properties upon multiple binding of coralyne to 4-sulfonatocalixarenes. *Journal of Physical Chemistry B*, 114(8): 2814–2819 (2010)
4. Király P, Varga Sz, Vakulya B, Soós T, Tárkányi G: Self-association promoted conformational transition of (3R,4S,8R,9R)-9-[(3,5-bis(trifluoromethyl)phenyl)-thiourea](9-deoxy)-epi-cinchonine. *Magnetic Resonance in Chemistry*, 48(1): 13-19 (2010)
5. Bombicz P, Kovács I, Nyulászi L, Szieberth D, Terleczy P: Neutral pentacoordinate group 14 compounds with beta-diketonato ligands. *Organometallics*, 29(5): 1100-1106 (2010)
6. Memboeuf A, Nasioudis A, Indelicato S, Pollreisz F, Kuki A, Kéki S, van den Brink OF, Vékey K, Drahos L: Size effect on fragmentation in tandem mass spectrometry. *Analytical Chemistry*, 82(6): 2294-2302 (2010)
7. Pászti Z, Hakkel O, Keszthelyi T, Berkó A, Balázs N, Bakó I, Guzzi L: Interaction of carbon monoxide with Au(111) modified by ion bombardment: A surface spectroscopy study under elevated pressure. *Langmuir*, 26(21): 16312-16324 (2010)
8. Deák A, Tunyogi T, Károly Z, Klébert Sz, Pálinkás G: Guest escape and uptake in nonporous crystals of a gold(I) macrocycle. *Journal of the American Chemical Society*, 132(39): 13627-13629 (2010)
9. Erős G, Mehdi H, Pápai L, Rokob TA, Király P, Tárkányi G, Soós T: Expanding the scope of metal-free catalytic hydrogenation through frustrated Lewis pair design. *Angewandte Chemie International Edition*, 49(37): 6559-6563 (2010)

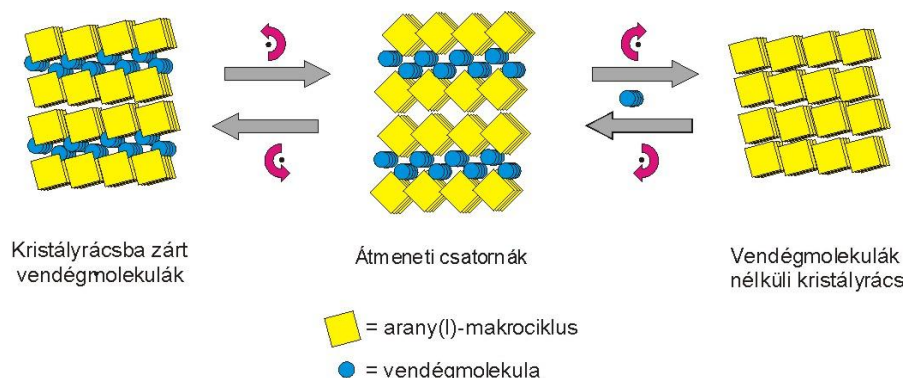


**Az MTA KK Szerkezeti Kémiai Intézetének  
kiemelten sikeres kutatási területe 2010-ben**

*Vendégmolekulák megkötése arany-makrociklusos szupramolekulák kristályrácsában*

A szupramolekuláris kémia a biológiából vett molekuláris önszerveződés elvének felhasználásával a fizika, az elektronika, a kémiai technológia és a nanotechnológia számára potenciálisan hasznos anyagokat képes létrehozni. A lumineszcens, katalitikus és/vagy redox-aktív arany(I)-centrumoknak a szupramolekuláris szerkezetekbe történő beépítése megelőlegezi az így kialakított szupramolekulák gyakorlati felhasználhatóságát.

Előállítottak és egykristály röntgendiffrakcióval szerkezetileg jellemeztek egy olyan 10-tagú arany(I)-makrociklust, melynek kristályrácsa bár nem tartalmaz nagyméretű pórusokat, mégis képes egykristály-egykristály átalakulás során vendégmolekulákat megkötni majd kiengedni, anélkül, hogy a kristályszerkezet összeomolna. A vendégmolekulák megkötésének és kiengedésének a folyamatát egy új mechanizmussal magyarázták. Feltételezték, hogy a vendégmolekulák kiengedésével járó egykristály-egykristály átalakulások során szükséges, hogy az arany(I)-makrociklusok elmozduljanak és ezáltal csatornák keletkezzenek. Ezeken a csatornákon keresztül áramolnak ki a vendégmolekulák a kristályrácsból. Megfelelő vendégmolekulák jelenlétében ezek a csatornák újból kialakulhatnak, elősegítvén a vendégek beáramlását, majd pedig az arany(I)-makrociklusoknak a „visszazáródásával” a kristályrácson belüli megkötésüket (1. ábra).



1. ábra. A vendégmolekulák megkötése és kiengedése az arany(I)-makrociklus kristályrácsából átmeneti csatornákon keresztül

A globális felmelegedés következményeként mind sürgetőbb olyan szén-dioxid-megkötő rendszerek kifejlesztése, melyek hatékonyak nemcsak a gázmolekulák elnyelésében és megkötésben, hanem a későbbi kiengedésében is. Ez az újonnan előállított arany(I)-szupramolekula szén-dioxid-megkötő rendszerként működhet, hiszen nagy szelektivitással képes a gázt elnyelni, megkötni, majd irányított módon kiengedni. Bebizonyították, hogy az arany(I)-makrociklus kristályrácsának az üregeiben helyet foglaló szén-dioxid-molekulák víz hozzáadásával felszabadíthatók. Ezek az eredmények nagymértékben elősegíthetik a nem porózus anyagok vendégmolekula és gázmegkötő tulajdonságainak a pontosabb megértését.

## VI. A kutatóhely főbb mutatói 2010-ben

A kutatóhely neve: Kémiai Kutatóközpont, Szerkezeti Kémiai Intézet

### 1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség <sup>1</sup> :	57	Ebből kutató <sup>2</sup> :	35
PhD, kandidátus:	15	MTA doktora:	9
		Rendes tag és levelező tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma <sup>3</sup> :			2
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma <sup>4</sup> :			10

### 2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>5</sup> :			63	
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>6</sup> :			61	
Tanulmány, cikk <sup>7</sup> hazai tud. folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	0
külföldi folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	58
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven:	58
Könyv <sup>8</sup>	magyarul:	0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet <sup>9</sup>	magyarul:	0	idegen nyelven:	1

### 3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor <sup>10</sup> :	200,24	Összes független hivatkozás száma:	1506
Összes hivatkozás száma <sup>11</sup> :	1882		

### 4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2010-BEN

Tud. fokozat megszerzése <sup>12</sup> :	PhD:	8	MTA doktora:	0
------------------------------------------	------	---	--------------	---

### 5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma <sup>13</sup> :	0	külföldi oltalmak száma <sup>14</sup> :	0
------------------------------------------------------	---	-----------------------------------------	---

### 6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma <sup>15</sup> :			18
		posztterek száma:	13
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	5	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	5
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>16</sup> :	0		

### 7. A HAZAI FELSOÓKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>17</sup> :			18
Témavezetések száma: TDK munka:	4	Diplomamunka (BSc):	2
Diplomamunka (MSc):	1	PhD:	10

### 8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>18</sup> :	344,1	MFt		
Fiatalkutatói álláshelyek száma <sup>19</sup> :	5	Teljes saját bevétel:	54,11	MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:			0	MFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			18	
	A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:		18,66	MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			9	
NKFP:	2	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	24,04	MFt
Egyéb:	7	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	MFt
ÚMFT témák száma:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	MFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			0	
	A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:		0,4	MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma:			1	
EU forrásból:	1	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	MFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási bevétel:			0	MFt