

Beszámoló a 2011. évi tudományos tevékenységről



TARTALOM

ANYAG- ÉS KÖRNYEZETKÉMIAI INTÉZET	5
I. A kutatóhely fő feladatai 2011-ben.....	5
II. A 2011-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények.....	5
a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények.....	5
b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között.....	9
III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2011-ben.....	10
IV. A 2011-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása.....	12
V. A 2011-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk.....	12
VI. Az Anyag- és Környezetkémiai Intézet főbb mutatói 2011-ben.....	14
BIOMOLEKULÁRIS KÉMIAI INTÉZET	19
I. A kutatóhely fő feladatai 2011-ben.....	19
II. A 2011-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények.....	19
a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények.....	19
b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között.....	22
III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2011-ben.....	23
IV. A 2011-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása.....	26
V. A 2011-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk.....	26
VI. A Biomolekuláris Kémiai Intézet főbb mutatói 2011-ben.....	28
NANOKÉMIAI ÉS KATALÍZIS INTÉZET.....	33
I. A kutatóhely fő feladatai 2011-ben.....	33
II. A 2011-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények.....	33
a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények.....	33
b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között.....	36
III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2011-ben.....	37
IV. A 2011-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása.....	39
V. A 2011-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk.....	41
VI. A Nanokémiai és Katalízis Intézet főbb mutatói 2011-ben.....	42
SZERKEZETI KÉMIAI INTÉZET	47
I. A kutatóhely fő feladatai 2011-ben.....	47
II. A 2011-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények.....	47
a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények.....	47
b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között.....	50
III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2011-ben.....	50
IV. A 2011-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása.....	53
V. A 2011-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk.....	54
VI. A Szerkezeti Kémiai Intézet főbb mutatói 2011-ben.....	56

Kémiai Kutatóközpont
ANYAG- ÉS KÖRNYEZETKÉMIAI INTÉZET

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

Telefon: 438-1130, Fax: 438-1147

e-mail: szepvolgyi.janos@tk.mta.hu, honlap: <http://www.chemres.hu/aki>

I. A kutatóhely fő feladatai 2011-ben

Az intézet fő feladatának tekintette 2011-ben magas színvonalú kémiai és interdiszciplináris kutatások folytatását az anyagtudomány és anyagtechnológia, valamint a környezeti kémia területein. Tevékenységük alapvető jellemzője, hogy a tudományos kérdésekre komplex módon, többféle elméleti, kísérleti és anyagvizsgálati módszer együttes alkalmazásával keresik a válaszokat.

Témáik kiválasztásakor kiemelt figyelmet fordítottak a tudományos újszerűsége, a kutatási feladatok gyakorlati vonatkozásaira és a társadalom aktuális igényeire. Kutatási témáikban az anyagtudományi és a környezetkémiai szempontok együtt jelennek meg.

A szerkezeti anyagok kémiai és szerkezeti jellemzőinek meghatározása, a kialakulásukhoz vezető folyamatok tanulmányozása mellett speciális funkcionális anyagok előállítására lehetőség szerint olyan eljárásokat dolgoznak ki, melyekkel a környezetet legkevésbé terhelik. A szerkezeti anyagokban létrehozásakor természetes eredetű illetve biológiailag lebomló komponens beépítésére törekszenek.

A potenciális vagy valós környezeti károk felszámolására olyan kémiai eljárásokat fejlesztenek ki, melyek nem fejeződnek be a kárenyhítésnél, hanem kiterjednek arra is, hogy a hulladékokat hasznos alapanyagokká lehessen átalakítani.

II. A 2011-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Nanorétegek előállítása és vizsgálata

Amorf hidrogénezett szénréteget alakítottak ki polietilén-tereftalát (PET) műszaki polimer felületén hélium plazma-alapú ionimplantációval. Összefüggéseket tártak fel a kezelési paraméterek és a felületi kémiai összetétel és szerkezet között, amelyek lehetőséget nyújtanak a felületi C-tartalom és a kémiai szerkezet célirányos kialakítására. Szerkezet-tulajdonság és összetétel-tulajdonság összefüggéseket tártak fel, amelyek olyan területeken lehetnek fontosak, mint műér, mesterséges szívbillentyű és sztent implantátumok kialakítása.

Nanocsövek felületén lévő rétegek vastagságának meghatározására új modellt fejlesztettek ki, amely figyelembe veszi az egymáson véletlenszerűen elhelyezkedő nanocső-sorokból származó XPS intenzitásokat. A modell módosított felületű nanocsövek és a rájuk leválasztott rétegek esetén alkalmazható. Használhatóságát rádiófrekvenciás és egyenfeszültséggel gyorsított nitrogénplazmában kezelt, többfalú szén nanocsövek külső rétegeinek módosítása példáján igazolták.

Funkcionális szemcsés anyagok előállítása, formálása és elemzése

Fehérje típusú anyagokat tartalmazó kompozit gyógyszerformák kifejlesztése területén különböző biokompatibilis és biodegradábilis polimerek (kitozán, politejsav-glikolsav) felhasználásával és mágneses nanorészecskék előállításával több nanoszerkezetű kompozit

hordozórendszer kifejlesztése folyik. A publikálható alapkutatási eredmények mellett ezekből olyan szabályozott- és célzott hatóanyag leadást biztosító új gyógyszerformátumok hozhatók létre, melyek alkalmazása a betegek számára komfortosabb és kisebb terhelést jelentő gyógyszeradagolást tesznek lehetővé. A kutatócsoport által vizsgált mikrokapszulázási módszerek a különböző összetett emulziós – evaporációs és diffúziós fázis átalakítási technikák.

A Maribori Egyetem Textil Tanszékével együttműködésben polimer nanorészecskébe kapszulázott fotokróm festékek fáradással szembeni ellenállását megfelelő adalékanyaggal megnövelték. A keletkező nanorészecskéket textilanyagok bevonásához használt keverékben diszpergálták, és tartós bevonatként printing módszerrel rögzítették.

A hagyományos szilárd részecsketechnológiai eljárások közül természetes eredetű hidrokolloidok élelmiszeripari alkalmazhatóságát javító technológiai módosításokat dolgoztak ki (BUSZESZ Élelmiszeripari Zrt).

Nanoszemcsés TiB₂ kerámiapor szintézis termikus RF plazmában

Nanoszemcsés TiB₂ kerámiapor szintézisét tanulmányozták termikus plazmában. Vizsgálták az eljárás hatékonyságát, valamint a kapott termék szemcseméretét és morfológiáját a beadott különböző prekursorok függvényében. Eljárást dolgoztak ki a TiB₂ szennyezőinek eltávolítására. A reakciók kinetikájának felderítéséhez optikai spektroszkópiát vettek igénybe. A mérések során sikerült felvenni és beazonosítani a TiO (titan-monoxid) spektrumát, melynek különös elméleti jelentősége van a plazmadiagnosztikai eljárások terén. Az eredmények megalapozhatják a plazma hőmérsékletének a korábbiaknál megbízhatóbb meghatározását.

Nanoszerkezetű amfifil polimer kotérhálók

Folytatták vizsgálataikat úgynevezett intelligens, hőmérséklet-érzékeny, vagyis alsó kritikus oldhatósági hőmérséklettel (LCST) rendelkező AKTH-kkal. Megállapították, hogy vizes közegben a poli(N,N-dietil-akril-amid) és a poliizobutilén (PIB), illetve a polidimetilsziloxán alapú kotérhálóknak a teshőmérséklethez közeli hőmérséklet-tartományban a hőmérséklet emelkedésével csökken az átlátszósága (LCST) és közel lineárisan a duzzadási foka. Differenciális pásztázó kalorimetriával meghatározták a poli(N-izopropilakrilamid)-ot és PIB-et tartalmazó AKTH-k LCST-je és összetétele közötti összefüggést.

Fémsók megkötésére alkalmas poli(N-vinil-imidazol) alapú amfifil kotérhálókat állítottak elő, és tanulmányozták a szerkezetükből adódó tulajdonságaikat. A kotérhálókat nanoreaktorként alkalmazva ezüst és réz nanorészecskéket állítottak elő, melyek antibakteriális hatását vizsgálták. Felderítették a polimetakrilsav és PIB alapú AKTH-k rövid- és hosszúidejű (pár órá és pár hónapos) reverzibilis duzzadási tulajdonságait a duzzasztó közeg pH-jának változtatásával.

Előállítottak olyan PIB és poli(poli(etilén-glikol)-metakrilát) (PPEGMA) összetevőkből álló amfifil kotérhálókat, amelyekben változik a PIB:PPEGMA arány. Kísérletet tettek ilyen térhálóknak fém nanorészecskék előállítására, és ezek esetleges katalitikus tulajdonságainak a vizsgálatára. Vizsgálták lineáris PIB és hiperelágazásos PPEGMA komponensekből álló kotérhálók duzzadási viselkedését, és felhasználásukkal teljesen újszerű, polialmasavat és polianilint tartalmazó interpenetráló térhálókat alakítottak ki.

Új típusú polimerek kvázielő atomatadásos gyökös polimerizációval

Olyan speciális szerkezetű kopolimerek gazdaságos és környezetileg előnyös szintézisét valósították meg, amelyek bizonyos tulajdonságaikban felülmúlják számos eddig használt polimer fizikai és kémiai jellemzőit. A műanyagipar által használt monomerek (sztirol és

(met)akrilátok) kváziélő atomátadásos gyökös polimerizációjával lineáris, csillag és hiperelágazásos polimereket állítottak elő környezetileg előnyös oldószerben (benzotrifluoridban). Többféle katalizátorrendszert is kipróbáltak, aminek során a katalizátor-koncentráció csökkentése fontos szempont volt.

Az így előállított multifunkciós makromolekulák funkcionalitását a felhasználási területeknek megfelelően változtatták. A hidroxil-telekelikus polisztirol illetve hidroxil csoportokat tartalmazó csillag/hiperelágazásos poliakrilátok jól alkalmazhatók poliuretán szintézisének. Az általuk előállított, vinil-csoportokat tartalmazó (fotopolimerizációba vihető) elágazott szerkezetű polimerek pedig mint fogtömő anyagok jöhetnek számításba. Ezen újszerű anyagok iránt nagy az érdeklődés nemzetközi partnerek részéről.

Poliizobutilén és poli(poli(etilén-glikol)-metakrilát) (PPEGMA) szegmensekből felépülő blokk-kopolimerek bifunkciós etilén-glikol-dimetakriláttal történő összekapcsolásával jó mechanikai tulajdonságú csillag polimert és amfil fil kotérhálókat állítottak elő.

Az előállított makromolekulákat minden esetben modern analitikai módszerekkel, mint pl. lézer fényszóródás detektorral felszerelt gépermeációs kromatográfiával és NMR spektroszkópiával vizsgálták

Funkciós polimerek kationos polimerizációval

A polimerizációs reakciók környezetterhelésének csökkentése céljából a sztírol karbokationos polimerizációjának katalizátoraként alkalmazott $TiCl_4$ koncentrációjának hatását vizsgálták a polimerizáció kimenetelére. A katalizátor koncentrációjának folyamatos csökkentésével azt tapasztalták, hogy a reakciósebesség szisztematikusan csökken, csakúgy, mint az iniciátorhatékonyság. Valamint a kisebb $TiCl_4$ koncentrációk alkalmazásával előtérbe került egy, a láncvégi csoportot érintő mellékreakció, az indanil szerkezetet eredményező intramolekuláris gyűrűzáródás is, amit 1H -NMR mérésekkel igazoltak. További ígéretes eredménynek tekinthető a sztírol oldószermentes karbokationos tömb polimerizációjának megvalósítása, valamint a reakció levegő jelenlétében történő kivitelezése, amely az inert atmoszféra nélkülözését teszi lehetővé. Vizsgálták továbbá az izobutilén és p-metilsztírol karbokationos kopolimerizációjának lehetőségét, amely új lehetőségeket nyithat speciális funkciós polimerek előállítására.

Polimerek környezetileg előnyös lebontása és átalakítása

Folytatták a poli(vinil-klorid) (PVC) degradatív átalakításával kapcsolatos ígéretes kutatásaikat. Oldatban végzett szisztematikus kísérletekkel tanulmányozták a PVC láncon bekövetkező kémiai átalakulásokat a térhálósodás és más nemkívánatos reakciók elkerülését biztosító körülmények között. Tanulmányozták a PVC egyik legnagyobb mennyiségben használt adalékának, a dioktil-ftalátnak (DOP) a degradációra gyakorolt hatását. Bebizonyították, hogy az általuk alkalmazott termooxidatív körülmények között a DOP hatékonyan elősegíti a kívánatos degradációs folyamatokat. Vizsgálták a DOP hatását különböző koncentrációkban DOP-t tartalmazó oldószerkezegekben is. Arra a meglepő eredményre jutottak, hogy a dioktil-ftalát és az 1,2,4-triklórbenzol bizonyos arányú keverékei szinergisztikus hatással vannak a PVC oxidatív bomlási folyamataira.

Poliolefinék szerkezet-tulajdonság összefüggéseinek feltárása és tulajdonságainak módosítása

Tovább folytatódott az együttműködés a TVK-val, melynek eredményei a gyakorlatban is hasznosulnak. A kutatók bebizonyították, hogy szoros kapcsolat áll fenn a feldolgozott polietilén reológiai jellemzői és a késztermék tulajdonságai között, amelyek nagymértékben függenek az alkalmazott stabilizátor rendszertől. Irányelveket fogalmaztak meg a stabilizátor rendszer optimalizálására. Ígéretes eredményeket értek el természetes vegyületek stabilizátorként való alkalmazására.

A Borealis multinacionális céggel folytatott együttműködésben összefüggést állapítottak meg polipropilén polimerek molekuláris szerkezete, a gócképzők kémiai szerkezete és a termék tulajdonságai között. Megállapították, hogy bizonyos kopolimerek ütésállósága többszörösére növelhető megfelelő típusú és mennyiségű gócképző adagolásával. Az eredmények alapján szabadalmi bejelentés született. Poliolfineket nano- és természetes erősítőanyagokkal módosítottak a tulajdonságok javítása érdekében.

Természetes és szintetikus polimerek és társított rendszereik

A természetes erősítőanyagot, töltőanyagot tartalmazó PP/fa és PLA/fa kompozitok deformációs és tönkremeneteli mechanizmusának vizsgálata során megállapították, hogy a tulajdonságokat az erősítőanyag szemcsemérete és alaki tényezője mellett a mátrix jellemzői és a határfelületi kölcsönhatások is jelentősen befolyásolják. A termék tönkremenetele bekövetkezhet a szálak kereszt- és hosszirányú törése, a szemcsék elválása vagy kihúzóda következtében. Különböző megközelítéseket dolgoztak ki, illetve alkalmaztak a határfelületi kölcsönhatások becslésére, és bebizonyították, hogy azok széles határok között változnak. PP és PA6/montmorillonit kompozitokban is vizsgálták a határfelületi kölcsönhatások szerepét, és elsőként közöltek kvantitatív adatokat a kompozitokban kialakuló határréteg jellemzőire vonatkozóan. 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, és természetes szállal erősített keményítőtől hatékony táprudat készítettek. Jelentős eredményeket értek el a gyógyászatban alkalmazott poliuretán elasztomerek szerkezetének felderítésében, és funkcionális csomagolóanyagok előállításában is. A kutatások egy jelentős része hazai vagy nemzetközi együttműködéshez, illetve pályázathoz kapcsolódik.

Biomassza anyagok hasznosítását valamint műanyagok újrahasznosítását megalapozó kutatások

Fa és lágyszárú biomassza valamint csatornaiszap minták termikus lebontását vizsgálták inert és oxidatív atmoszférában. Főkomponens elemzéssel összefüggést mutattak ki a minták termogravimetriás paraméterei és a kalorimetriás adatok között, valamint új ismereteket nyertek a csatornaiszap és az akácfa keverékének oxidatív hőbomlásáról. A minták égését a kinetikai rezsím tartományában az eddig rendelkezésre állóknál megbízhatóbb reakciókinetikai modellel írták le.

Megállapították, hogy a nátrium ionos Y és β zeolitok általában alkalmasak a klór- és brómtartalmú polimerek pirolízisolvajában a halogéntartalom csökkentésére, de aktivitásuk jelentősen eltérő a különböző típusú szerves halogénvegyületek esetében. A benzolgyűrű alifás szubsztituenseiből és fenolos hidroxilcsoport szomszédos pozícióiról a klór- és brómatomok könnyen és teljesen eltávolíthatóak nátrium zeoliton, de aromás gyűrűhöz kapcsolt halogénatom általában csak részben cserélődik hidrogénatomra.

Légkörkémiiai kutatások

Részletesen vizsgálták a 2,3-pentándion (2,3PD) légkörkémiiai kinetikáját és fotokémiáját direkt és relatív kinetikai mérésekkel, valamint impulzus-lézer fotolízis alkalmazásával. Elsőként a szakirodalomban megadták az OH-gyökkel végbemenő reakció sebességi együtthatóját. A tapasztalt nagy reaktivitást a 2,3PD molekula β -helyzetben lévő H-atomjának könnyű lehasíthatóságával magyarázták. Megállapították, hogy a molekula jelentős mértékben elnyel és fotolizálódik a látható hullámhossz-tartományban is, ami miatt a légköri élettartama mindössze néhány óra.

A tárgyévben megjelent közleményükben megmutatták, hogy a dimetil-adenin típusú nukleinsav-származékok aprotikus oldószerekben mutatott kettős lumineszcenciás viselkedését a reverzibilis kétállapotú rendszerekre jellemző kinetikával lehet leírni. A legfontosabb energiavesztő folyamat a belső konverzió, de a spinváltó reakció szerepe is számottevő. Legújabb kutatásaik arra irányulnak, hogy leírják, hogyan módosítja e molekulák gerjesztett állapotú viselkedését az, ha közeg protikus.

Környezeti elektrokémia

A már szobahőmérsékleten is folyékony szerves sókra, az ún. ionos folyadékokra nagy jövőt ígérnek a modern, környezetbarát elektrokémiai technológiák terén. Ezek kidolgozásához alapadatok hiányoznak, melyek meghatározására alap-elektrokémiai méréseket végeztek: Voltammetriás és elektrokémiai impedanciamérésekkel jellemezték az Au(100) egykristály elektródot egy új guanidinium-ion-alapú ionos folyadékban, az N,N-dibutil-N',N'-diethyl-N'',N''-dimetilguanidinium-bisz(trifluorometilsulfonil)imid elektrolitban. Hőmérsékletfüggő impedanciamérésekkel a kettősréteg átrendeződésére jellemző kinetikai adatokat kaptak. Hasonlóképpen az előző évi, butil-metil-imidazólium-hexafluorofoszfátban végzett mérések következtetéseihez, most is megállapították, hogy a ténylegesen mérhető effektusok és az ilyen rendszerek határréteg-dinamikáját értelmező kurrens elméletek következményei távol esnek egymástól.

Az elektrokémiában alapvető fontosságú a fém-folyadék határfelületek jellemzése, az ottani erőhatások jellemzése. Evégett egy vezetősondás pásztázó atomerő mikroszkóp összeállítást akként módosítottak, hogy azzal periodikus fém-fém nanokontaktusok kialakulása és széthúzása közben párhuzamosan legyen mérhető a fellépő erőhatás és a kontaktus elektromos vezetése. A berendezéssel folyadékfázisban vizsgálták az arany-arany kontaktusok kialakulásánál, megszűnésénél, ill. a különböző vezetési kvantumállapotok közti átmeneteknél fellépő erőhatást.

Poliklórozott aromások roncsolása hőhasznosítással

A "Folyamatos üzemű technológia kifejlesztése poliklórozott aromások dehalogénezése" című NKTH project keretében laboratóriumi és nagylaboratóriumi léptékben a reakciósebesség és a roncsolási hatásfok szempontjából optimalizálták a bruttó reakciót, mely a klóratomok mészkővel történő lehasításából és fixálásából, a klórmentes köztitermékek hőhasznosítással egybekötött oxidálásából, valamint a reakcióban képződő folyadékfázisú CaCl_2 gravitációs elkülönítéséből áll. Kidolgozták a prototípus üzem technológiai tervét. A konzorciumi tagokkal együttműködésben megtervezték, és elkészítették a prototípus kiviteli terveit. Ez a tevékenység magában 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 elkészült. 2011 folyamán eredményes kísérletek során a prototípus tüzetes bevizsgálása és optimalizálása megtörtént.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

A társadalom széles rétegeihez elsősorban a televíziós és rádióműsorokon keresztül juttatták el a tudomány híreit. A Mindentudás Egyeteme c. műsorhoz kapcsolódóan három kerekasztal beszélgetésen vettek részt, a Delta c. műsorban új eredményeikkel szerepeltek, a Kémia Éve kapcsán pedig rádióriportban beszéltek a 114-es és a 116-os rendszámú elemek IUPAC általi hivatalos elismeréséről.

Az érdeklődőknek szól az elmúlt évben magyar nyelven megjelent 8 cikk és egy könyvfejezet valamint egy német nyelvű cikk. Ezek a tudományos ismeretterjesztő anyagok olyan, nagy érdeklődésre számot tartó témákkal foglalkoznak, mint a vörösiszap képződése, tulajdonságai, tárolása, hasznosíthatósága, a megújuló energiaforrások, a tudomány és áltudomány kérdései.

Különösen fontosnak tartják, hogy a kémiát és általában a természettudományokat népszerűsítsék a középiskolások körében, ezért sokféle rendezvényen igyekeztek megszólítani ezt a korosztályt: Előadásokat tartottak a Lángész Zárófesztiválon Budapesten, a Tudománynapon Jászberényben és Veszprémben, a Kutatók Éjszakáján Budapesten valamint a Fáy András Tudománynépszerűsítő Középiskolás Programon. Részt vettek a Magyar Kémikusok Egyesülete által a Kémia Éve 2011 rendezvénysorozat keretében középiskolások részére szervezett „Felszínélők” című vetélkedő lebonyolításában. Posztert mutattak be „A Magyar Tudomány Ünnepe” alkalmából rendezett „A mi világunk kémiája” szimpóziumon. Intézeti nyílt nap keretében fogadták a budapesti II. Rákóczi Ferenc Gimnázium és Berzsényi Dániel Gimnázium tanulóit, akik a laboratóriumokban bemutatott kísérleteken keresztül ismerkedhettek az intézetben folyó kutatásokkal. A Waldorf iskola tanulói az intézeti rendkívüli kémiaórájukon analitikai kémiai kísérleteket végeztek.

A kémia iránt nagy érdeklődést mutató középiskolások tehetséggondozásával már több éve foglalkoznak, és a tárgyévben immáron a harmadik „AKI kíváncsi kémikus” kutatótáborukat rendezték meg. A kutatótáborban 15 modern témában folyó kutatásba 25 diák kapcsolódhatott be, és a laboratóriumi munka mellett megtapasztalták a kutatói munka olyan tevékenységeit is, mint az előadás készítése és megtartása és a cikkírás. A kutatótáborról és eredményeiről szól további 3 ismeretterjesztő cikk és két rádióriport.

A pályaválasztás előtt álló fiataloknak pedig a BME-n és az ELTE-n tartottak demonstrációval egybekötött előadást.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2011-ben

Hazai kapcsolatok

Az intézet három fő tevékenységi körben kapcsolódik magyarországi intézményekhez, ezek a közös kutatások végzése, részvétel a felsőoktatásban és fejlesztési munkák ipari megbízásból.

A közös kutatások jelentős számú publikációban megmutatkozó eredményessége elsősorban abból adódik, hogy a különböző iskolákhoz tartozó kutatók ismereteikkel hasznosan kiegészítik egymást, és a rendelkezésre álló többféle módszerrel a megoldandó problémákat komplexen, esetenként multidiszciplinárisan tudják megközelíteni.

Több éve tart és évenként megújul a kapcsolat a Pannon Egyetemmel funkcionális nanorészecskék témában, a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetemmel (BME) műanyagok szerkezet – tulajdonság összefüggéseinek vizsgálatában, és egy éve az Eötvös Loránd Tudományegyetemmel légkörkémiái és fotokémiái kutatásokban. Az intézet Alkalmazott Polimer Fizikai Kémiai Osztálya a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszékkal közös szervezeti egység, a Pannon Egyetem Műszaki Informatikai Karának Műszaki Kémiai Intézetével közös professzori laboratórium működik, az ELTE TTK Kémiai Intézetével pedig a 2010-ben megkötött szerződés alapján a tárgyévben kezdte meg munkáját a Környezeti Kémiai-fizikai Laboratórium. Nem formális együttműködésben a Semmelweis Egyetemmel sokkomponensű biológiai rendszerekben végeztek analitikai vizsgálatokat. A BME Gépészmérnöki Kar, Energetikai Gépek és Rendszerek Tanszékével biomassa anyagok égési tulajdonságait határozták meg. OTKA projekt keretében a cellulóz alapú bioetanol gyártás hatékonyabbá tételén dolgoznak a BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék kutatóival.

Az intézet munkatársai magas óraszámokban oktattak egyetemeken. Graduális és posztgraduális előadásokat tartottak, szemináriumokat és laborgyakorlatokat vezettek a BME Vegyész- és Biomérnöki Karán, az Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Karán, a Pannon Egyetemen és a Miskolci Egyetemen. Az ELTE, a BME hallgatóinak TDK, BSc, MSc és PhD munkáit irányították, a Semmelweis Egyetemen PhD hallgatók konzulensei voltak.

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

Az intézet kutatói nagy számban vesznek részt az MTA bizottságainak és munkabizottságainak és más tudományos testületek, folyóiratok szerkesztőbizottságainak munkájában.

Tizenkét magyarországi kis- és középvállalat megbízásából az intézet kutatási és fejlesztési feladatokat, méréseket végzett, többen közülük igénybe vették az intézet akkreditált laboratóriumának szolgáltatásait. Hét nagyvállalattal - melyek közül kettő külföldi, kettő pedig multinacionális - áll kapcsolatban az intézet. A tőlük kapott feladatok jellemzően nagyobb volumenűek és gyakran tudományos igényűek. Az eredmények az anyagi bevétel mellett esetenként közös publikációkban is mérhető. Vannak olyan vállalatok, melyek az intézet több osztályával és különböző feladatok elvégzésére is szerződött.

Nemzetközi kapcsolatok

Az előző években megkötött és 2011-re is áthúzódó kétoldalú egyezmények keretében végzett munkán felül, és a több éve folyó nem formális együttműködéseiken túl az alábbi projekteket indították 2011-ben.

Funkcionális nanorészecskék előállítása és modellezése rádiófrekvenciás termikus plazmában témájú 3 éves Magyar-Olasz TÉT együttműködésre vonatkozó szerződést írtak alá az év utolsó napjaiban. A partnerintézmény a Bolognai Egyetem Mérnöki Karának Gépészmérnöki tanszéke.

MTA kétoldalú egyezmény keretében talajminták lézeres szemcseméret analízise területén vizsgálatok kezdődtek a Lengyel Tudományos Akadémia Agrofizikai Intézetével közösen. Kutatásaikat kiterjesztik felszíni üledékek elemzésére is.

A Kínai Új Energia Vállalattal biobutanol üzemanyag extraktív fermentációval történő előállításán dolgoznak. Az előállítás kétfázisú immobilizált rendszerben, speciális új szétválasztási és frakcionálási technikával történik.

Újszerű multifunkcionális, elágazásos polimerek szintézise területén kialakult egy munkakapcsolat az indiai Roorkee székhelyű Indiai Technológiai Intézet Kémia Tanszékével.

Az új és régi együttműködések velejárója az intézet kutatóinak külföldre és a külföldiek hazánkba utazása.

Az intézet kutatói új és kevésbé ismert komplex permanganátsók előállításával és jellemzésével foglalkoznak, és ezzel kapcsolatban látogatást tettek az indiai Jodhpur Egyetemen és a Cirill és Metód Egyetemen Skopjében (Macedónia). Ugyanezzel a témával kapcsolatban látogatott az intézethez a romániai Petru Poni Intézet munkatársa.

Egy fiatal munkatárs atomátadásos gyökös polimerizációs kutatásokat folytatott a Bázeli Egyetemen Svájcban. Blokk-kopolimerek szintézisével foglalkozott az intézetben az Indiai Technológiai Intézet kutatója.

Biomassza anyagok hőbomlásának kinetikája vizsgálatához kapcsolódó számítógépes kiértékeléseket tanított az intézet kutatója a Trondheimi Egyetemen (Norvégia). A Hawaii

Egyetem (USA) professzora a biomassza hasznosítás kutatása témával rendszeresen visszatérő vendége az intézetnek.

Európai Unió COST program keretében égési folyamatokat leíró kinetikai modelleket tanulmányozott egy fiatal kutató a Karlsruhei Egyetemen (Németország).

Hosszú évek óta eredményes munkát folytat az intézet kutatója az Ulmi Egyetemen (Németország), ahol fémek elektrokémiai tulajdonságait vizsgálja ionos folyadékokban.

A Berni Egyetemen (Svájc) molekuláris vezetés mérésével foglalkoznak, ahol az intézet munkatársa nagyérzékenységű műszereket fejleszt. Hasonló érdeklődés - elektronátlépés vizsgálata a molekuláris elektronika új anyagaiban - hozott az intézetbe két kutatót a prágai Heyrovsky Intézetből (Csehország).

Erasmus program keretében PhD hallgató érkezett a Vilnius Egyetemről (Litvánia). Szilikátok plazmatermikus előállítása és jellemzése témában végzett kísérleti munkát az intézetben.

Az intézet több kutatója tagja nemzetközi tudományos szervezeteknek és külföldi folyóiratok szerkesztőbizottságainak.

IV. A 2011-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A tárgyévben elnyert OTKA pályázat keretében természetes és mesterséges polimer hulladékok együttes pirolízisével foglalkoznak. Több mint 40 halogén tartalmú komponens azonosítottak a PVC-t és brómozott égésgátlót is tartalmazó polimerkeverék pirolízisekor keletkező olaj komponensei között. A teljes szerződésállomány 6 M Ft, ebből 2011 évre 1.117 ezer Ft jutott.

V. A 2011-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Tóth A, Veres M, Kereszturi K, Mohai M, Bertóti I, Szépvolgyi J
Structure-property and composition-property relationships for poly(ethylene terephthalate) surfaces modified by helium plasma-based ion implantation
APPLIED SURFACE SCIENCE 257 pp. 10815-10820. (2011)
2. Feczkó T, Tóth J, Dósa Gy, Gyenis J
Optimisation of protein encapsulation in PLGA nanoparticles
CHEMICAL ENGINEERING AND PROCESSING 50 pp. 757-765. (2011)
3. Károly Z, Mohai I, Klébert Sz, Keszler A, Sajó IE, Szépvolgyi J
Synthesis of SiC powder by RF plasma technique,
POWDER TECHNOLOGY 214 pp. 300-305. (2011)
4. Fodor Cs, Kali G, Iván B
Poly(N-vinylimidazole)-l-poly(tetrahydrofuran) amphiphilic conetworks and gels: Synthesis, characterization, thermal and swelling behavior
MACROMOLECULES 44 pp. 4496-4502. (2011)
5. Csiszár E, Fekete E
Microstructure and surface properties of fibrous and ground cellulosic substrates
LANGMUIR 27 pp. 8444-8450. (2011)

6. Kovács J, Pataki P, Orbán-Mester A, Nagy G, Staniek P, Földes E, Pukánszky B
Melt stabilisation of Phillips type polyethylene, Part III: Correlation of film strength with the rheological characteristics of the polymer
POLYMER DEGRADATION AND STABILITY 96 pp. 1771-1779. (2011)
7. Várhegyi G, Bobály B, Jakab E, Chen H
Thermogravimetric study of biomass pyrolysis kinetics. A distributed activation energy model with prediction tests
ENERGY AND FUELS 25 pp. 24-32. (2011)
8. Demeter A
Hydrogen bond basicity in the excited state: Concept and applications
In: Ke-Li H, Guang-Jiu Z (szerk)
Hydrogen bonding and transfer in the excited state, Chapter 3
John Wiley & Sons Ltd., Chichester, 2011. pp 39-78., ISBN-13: 978-0-470-66677-7
9. Bakos I, Szabó S, Pajkossy T
Deposition of platinum monolayers on gold
JOURNAL OF SOLID STATE ELECTROCHEMISTRY
15 pp. 2453–2459. (2011)

VI. Az Anyag- és Környezetkémiai Intézet főbb mutatói 2011-ben

1. Létszámadatok

Átlagléttség szám*:	<input type="text" value="0"/>	Ebből kutató*:	<input type="text" value="0"/>
PHD v. CSc*:	<input type="text" value="0"/>	MTA doktora v. DSc*:	<input type="text" value="0"/>
MTA levelező tag*:	<input type="text" value="0"/>	MTA rendes tag*:	<input type="text" value="0"/>
Akadémikusok száma (a fenti kettő összesen):	<input type="text" value="0"/>		
Az intézethez kötődő akadémikusok száma:	<input type="text" value="1"/>		
35 év alatti, intézeti állományban levő kutatók száma*:	<input type="text" value="0"/>	kutatónők száma*:	<input type="text" value="0"/>

2. Publikációk¹

Az év folyamán megjelent tudományos², oktatási és tudományos ismeretterjesztő³ publikációk száma összesen:

2.1 Az év folyamán megjelent tudományos publikációk száma:

2.1.1 Szakfolyóiratban megjelent tanulmányok, cikkek száma⁴

hazai tudományos folyóiratban magyarul:	<input type="text" value="10"/>	~ idegen nyelven:	<input type="text" value="0"/>
külföldi folyóiratban magyarul:	<input type="text" value="0"/>	~ idegen nyelven:	<input type="text" value="50"/>
mindezekből impakt faktoros publikáció magyarul:	<input type="text" value="1"/>	~ idegen nyelven:	<input type="text" value="46"/>
recenzió, kritika magyarul:	<input type="text" value="0"/>	~ idegen nyelven:	<input type="text" value="0"/>

2.1.2 Könyv⁵, könyvfejezet⁶

könyv/monográfia ⁷ magyarul:	<input type="text" value="0"/>	~ idegen nyelven:	<input type="text" value="0"/>
tanulmánykötet magyarul:	<input type="text" value="0"/>	~ idegen nyelven:	<input type="text" value="0"/>
könyvrész és könyvfejezet magyarul:	<input type="text" value="0"/>	~ idegen nyelven:	<input type="text" value="3"/>

2.1.3 Konferenciacikk- és kiadvány

magyarul:	<input type="text" value="7"/>	~ idegen nyelven:	<input type="text" value="6"/>
-----------	--------------------------------	-------------------	--------------------------------

2.1.4 Egyéb publikáció⁸

tanulmánykötet szerkesztése, szöveggondozás magyarul:	<input type="text" value="0"/>	~ idegen nyelven:	<input type="text" value="0"/>
sorozatszerkesztés magyarul:	<input type="text" value="0"/>	~ idegen nyelven:	<input type="text" value="0"/>
atlasz ⁹ magyarul:	<input type="text" value="0"/>	~ idegen nyelven:	<input type="text" value="0"/>
tematikus térkép magyarul:	<input type="text" value="0"/>	~ idegen nyelven:	<input type="text" value="0"/>
kritikai kiadás: 5 szerzői ¹⁰ ívig:	<input type="text" value="0"/>		
kritikai kiadás: 5 szerzői ív felett:	<input type="text" value="0"/>		
szótári szócikkállomány magyarul:	<input type="text" value="0"/>	~ idegen nyelven:	<input type="text" value="0"/>
lexikoncikk ¹¹ magyarul:	<input type="text" value="0"/>	~ idegen nyelven:	<input type="text" value="0"/>
szakfordítás: 5 ívig:	<input type="text" value="0"/>		
szakfordítás: 5 ív felett:	<input type="text" value="0"/>		

bibliográfia magyarul:	<input type="text" value="0"/>	~ idegen nyelven:	<input type="text" value="0"/>
adatbázis ¹² magyarul:	<input type="text" value="0"/>	~ idegen nyelven:	<input type="text" value="0"/>
atalógus ¹³ magyarul:	<input type="text" value="0"/>	~ idegen nyelven:	<input type="text" value="0"/>

2.2 Oktatási anyag

felsőoktatási tankönyv vagy jegyzet ¹⁴ magyarul:	<input type="text" value="1"/>	~ idegen nyelven:	<input type="text" value="0"/>
---	--------------------------------	-------------------	--------------------------------

2.3 Tudományos ismeretterjesztő írás cikk magyarul:	<input type="text" value="8"/>	~ idegen nyelven:	<input type="text" value="1"/>
könyv, könyvrészlet magyarul:	<input type="text" value="1"/>	~ idegen nyelven:	<input type="text" value="0"/>

3. Hatástényező és idézettségi mutatók

összesített impakt faktor: ¹⁵	<input type="text" value="107.497"/>
összes független hivatkozás száma:	<input type="text" value="1407"/>
összes hivatkozás száma: ¹⁶	<input type="text" value="1652"/>
kapott recenzió, kritika:	<input type="text" value="0"/>

4. Tudományos fokozat, illetve cím megszerzése 2011-ben

PhD:	<input type="text" value="3.000"/>	MTA doktora cím:	<input type="text" value="0.000"/>
------	------------------------------------	------------------	------------------------------------

5. Szellemi alkotások védelme¹⁷

nemzeti úton megadott oltalmak száma: ¹⁸ :	<input type="text" value="0"/>	megadott külföldi oltalmak száma ¹⁹ :	<input type="text" value="0"/>
értékesített szabadalmak száma:	<input type="text" value="0"/>		
szervi jogvédelem alá tartozó alkotások száma ²⁰ :	<input type="text" value="0"/>		

6. Részvétel a tudományos közéletben Tudományos rendezvények

nemzetközi rendezvényen tartott előadások száma:	<input type="text" value="57"/>	~posztterek száma ²¹ :	<input type="text" value="22"/>
hazai rendezvényen tartott előadások száma:	<input type="text" value="25"/>	~posztterek száma:	<input type="text" value="23"/>
hazai rendezvények szervezése:	<input type="text" value="0"/>	nemzetközi rendezvények szervezése:	<input type="text" value="1"/>

Szakértői tevékenység

tanácsadói tevékenységek száma ²² :	<input type="text" value="0"/>		
opponensi vélemény összesen	<input type="text" value="10"/>	ebből külföldre:	<input type="text" value="0"/>
egyéb szakértői vélemény:	<input type="text" value="31"/>	ebből külföldre:	<input type="text" value="4"/>
egyéni szaklektori vélemény összesen:	<input type="text" value="142"/>	ebből külföldre:	<input type="text" value="135"/>

Részvétel tudományos testületben

szerkesztőségi tag nemzetközi szakfolyóiratban:	<input type="text" value="23"/>		
szerkesztődégi tag hazai fszakfolyóiratban:	<input type="text" value="2"/>		
nemzetközi tud. bizottság tagja:	<input type="text" value="16"/>	nemzetközi tud. bizottság vezetője:	<input type="text" value="1"/>
hazai tud. bizottság tagja:	<input type="text" value="52"/>	hazai tud. bizottság vezetője:	<input type="text" value="12"/>

7. Az intézetet és a tudományt népszerűsítő tevékenység

nyilvános esemény megrendezése²³:

kulturális rendezvények²⁴:

ismeretterjesztő előadások száma:

tudományos ismeretterjesztő műsorok szerkesztése TV-ben, rádióban:

8. A hazai felsőoktatásban végzett tevékenység

rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma²⁵:

ebből doktori iskolákban oktatók száma: doktori iskolát vezetők száma:

doktori iskolában tőrzstagok száma:

elméleti kurzusok száma²⁶: gyakorlati kurzusok száma:

témavezetések száma (TDK-dolgozat):

témavezetések száma (BA, illetve BSc diplomamunka):

témavezetések száma (MSc, illetve MA diplomamunka):

témavezetések száma (PHD-disszertáció):

9. Egyéb adatok

9.1 Kutatói mobilitás

A kutatóhely vendégtevékenységet folytató munkatársainak száma

hazai egyetemen vagy kutatóintézetben: vállalatnál:

külföldi egyetemen vagy kutatóintézetben: vállalatnál:

Vendégkutatók száma a kutatóhelyen

hazai kutatók száma félévnél rövidebb ideig: félévnél hosszabb ideig:

külföldi kutatók száma félévnél rövidebb ideig: félévnél hosszabb ideig:

A kutatóhelyen más hazai kutatók által kutatómunkával eltöltött idő²⁷:

A kutatóhelyen külföldi kutatók által kutatómunkával eltöltött idő:

9.2 Vállalati kapcsolatok az aktuális évben

A kutatóhellyel szerződéses kapcsolatban álló közép- és kisvállaltok száma:

A kutatóhellyel szerződéses kapcsolatban álló nagyvállalati partnerek száma:

10. Pénzügyi adatok

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege*:	<input type="text" value="0.0"/>	M Ft		
Fiatalkutatói álláshelyek száma*:	<input type="text" value="0"/>			
Az időszak folyamán a teljes saját bevétel (pályázatok, szabadalmak, szerződések, stb.) összege (az akadémiai költségvetési támogatáson kívül)*:	<input type="text" value="0.0"/>	M Ft		
saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel*:	<input type="text" value="0"/>			
Hazai pályázatok:				
Az év folyamán művelt OTKA-témák száma:	<input type="text" value="0"/>	A tárgyévre vonatkozó bevétel*:	<input type="text" value="0.0"/>	M Ft
Az év folyamán művelt NKTH-pályázat témáinak száma:	<input type="text" value="0"/>			
NKFP:	<input type="text" value="0"/>	A tárgyévre vonatkozó bevétel*:	<input type="text" value="0.0"/>	M Ft
Egyéb:	<input type="text" value="0"/>	A tárgyévre vonatkozó bevétel*:	<input type="text" value="0.0"/>	M Ft
Az év folyamán művelt ÚMFT-témák száma:	<input type="text" value="0"/>	A tárgyévre vonatkozó bevétel*:	<input type="text" value="0.0"/>	M Ft
Az év folyamán művelt egyéb hazai témák száma:	<input type="text" value="0"/>	A tárgyévre vonatkozó bevétel*:	<input type="text" value="0.0"/>	M Ft
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma:	<input type="text" value="0"/>			
EU-forrásból:	<input type="text" value="0"/>	A tárgyévre vonatkozó bevétel*:	<input type="text" value="0.0"/>	M Ft
Egyéb:	<input type="text" value="0"/>	A tárgyévre vonatkozó bevétel*:	<input type="text" value="0.0"/>	M Ft
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:	<input type="text" value="0"/>			
		A tárgyévre vonatkozó bevétel*:	<input type="text" value="0.0"/>	M Ft

A *-gal jelölt adatokat kérjük, ne töltsék ki. Ezekbe a rovatokba az éves pénzügyi beszámoló alapján a Pénzügyi Főosztály adatai kerülnek.

Kémiai Kutatóközpont
BIOMOLEKULÁRIS KÉMIAI INTÉZET
1025 Budapest, Pusztaszeri út 59-67; 1525 Budapest, Pf. 17.
Telefon: 438-1110, Fax: 438-1145
e-mail: hajos.gyorgy@ttk.mta.hu, honlap: <http://www.chemres.hu>

I. A kutatóhely fő feladatai 2011-ben

Az intézet kutatási tevékenysége döntően a biomolekuláris kémia két fontos területére irányul: új vegyületek szintézisére és reakciókészségük feltárására, valamint a biológiailag hatásos molekulák kötődésének, transzportjának és lebomlásának tanulmányozására.

A szintetikus munkák elsősorban heterociklusos származékok, alkaloidok, peptidmimetikumok és szénhidrátok előállítását célozzák, a biokémiai kutatások kötődésvizsgálatokra, neurokémiai témákra, transzportfolyamatok tanulmányozására és metabolizmus-vizsgálatokra összpontosulnak. Ezek mellett organokatalitikus eljárásokkal is foglalkoznak.

Gyógyszerkötődési vizsgálatokat is végeznek, a metabolizmus folyamatainak vizsgálatával foglalkoznak, valamint potenciális gyógyszerjelölt molekulák és célfehérjék azonosításán és tervezésén dolgoznak. Komoly erőfeszítéseket tesznek továbbá neurodegeneratív megbetegedések (például az epilepszia és az ischémia) mögött fennálló mechanizmusok jobb megértése érdekében.

II. A 2011-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Heterociklusos vegyületek szintézise és vizsgálata

A fenotiazinnal szubsztituált diének körét új funkcionális származékokkal (pl. aminokkal, savamidokkal, sulfoxidokkal) egészítették ki új szintetikus eljárásokkal. E munka részeként általános eljárást dolgoztak ki 2-amino és 2-amidofenotiazinek szintézisére.

A magyar-portugál együttműködés keretében 40 db új származék multidrog-rezisztenciát gátló hatását tesztelték baktériumokon. A közös munka és a kutatási eredmények alapján meghatározták a jövőbeli lead vegyület szerkezeti feltételeit.

A kéntartalmú piridin-származékok körében egy új átrendeződést mutattak ki, mely szokatlan módon egy metil-csoport részvételével zajlik le. A folyamatot kvantumkémiai számítással értelmezték.

Az izokinolin-gyűrű új funkcionálisával kiterjesztették a fluoreszcens tulajdonságú származékok körét, ezekre a vegyületekre jól járható szintézist dolgoztak ki.

Külföldi (argentín) kooperációban a speciális „flash vákuum pirolízis” módszerrel új indazolszármazékok keletkezését mutatták ki.

Neurokémiai kutatások

Azonosították egy új típusú, korábban leírt, glutaminsav felvétellel közvetlenül kiváltható gliális γ -amino-vajsav (GABA) kibocsátási folyamat forrását és in vitro epilepszia modellben felderítették hatását a neuronális aktivitásra. A NANOSEN9 projekt támogatásával egyedi ioncsatornák aktivitásának mérésére alkalmas nanoszenzort fejlesztettek ki és vizsgálati

protokollt dolgoztak ki nanorészecskék funkcionális neurotoxicitásának meghatározására. Meghatároztak egy, a neuronális aktivitástól független, energia-metabolitok által aktivált gliális Ca^{2+} szignált a nucleus accumbens-ben, az agy jutalmazásért felelős régiójában.

Molekuláris farmakológiai kutatások

Kimutatták, hogy az α_1 -savas glikoprotein (AGP) szérumfehérjén specifikusan kötődő fluoreszcenciás jelzőanyagok kötődésmódja jelentősen megváltozik egy endogén szteroid jelenlétében.

A Quinacrine stereoszelektív kötődését detektálták immobilizált calmodulinon.

Igazolták az indukált CD (cirkuláris dikroizmus) sávok mérésével az α -kimotripszin eddig ismert gátlószereitől merőben eltérő növényi alkaloidok (berberin, szangvinarin, keleritrin, ellipticin) kötődését, amelyek az enzim lehetséges gátlószereinek tekinthetők. Ugyancsak CD spektroszkópiás módszer alkalmazásával kimutatták, hogy a bilirubin specifikusan kötődik több, az emberi szervezetben előforduló enzimhez. A bilirubin és az enzimek kofaktorai (NADH, AMP) között kimutatott kötődési kölcsönhatások képezhetik részben az epepigment élettani és kóros körülmények között kifejtett biológiai hatásainak szerkezeti alapját.

A Cyclolab Kft.-vel együttműködésben vizsgálták a danzil-aminosavak sztereoszelektív elválasztását újonnan szintetizált ciklodextrin származékok alkalmazásával, kapilláris elektroforézis technikával.

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

Vizsgálták a farmakológiai allosztéria szerkezete, termodinamikája, evolúciója és tervezése összefüggéseit. Kimutatták GABA-A receptorokra neuroszteroidok alegység-szelektív potenciáló hatását.

A metabolizmus folyamatainak vizsgálata

Kidolgozták a műtéti mintákból történő májsejt izolálás technikáját. Egyre kevesebb a kísérleti munkára alkalmas, nem transzplantált kadáver donorból származó májszövet. Ez terápiás szempontból jó, mert a szervek többnyire beültetésre kerülnek, a kutatást és gyógyszerfejlesztést azonban megnehezíti. Igazolták, hogy a műtéti mintákból jó életképességű, toxikológiai és májfunkció vizsgálatokra alkalmas sejtkultúra készíthető.

Folytatták annak vizsgálatát, hogy mi okozza a patkány és a humán hepatociták eltérő reakcióját gyógyszerkezelés hatására. Az epesó homeosztázisban fontos szerepet játszó ABCB11 és SLC10A1 transzporterek aktivitásának változását tanulmányozták néhány *in vivo* kolesztázist okozó gyógyszerrel történő kezelést követően. Kimutatták, hogy a humán hepatociták sokkal érzékenyebben reagáltak ciklosporin-A kezelésre, míg a patkánysejtek transzport folyamatait a bosentan jobban befolyásolta. Humán és patkány hepatocitákon vizsgálták a nagyon széles körben használt lipidcsökkentő szerek, az atorvastatin, fluvastatin, pravastatin, rosuvastatin hatását a máj transzporterek működésére és expressziójára egyszeri és többszöri adagolás után. Igazolták, hogy többszöri adagolás után az atorvastatin csökkenti, míg a fluvastatin megemeli az epesók (taurokolát) bejutását a hepatocitákba. A fajok közötti különbség a transzport folyamatok változásában gyógyszerek vagy gyógyszerjelölt molekulák hatására fontos információt jelent a gyógyszerfejlesztők számára. Ezek a vizsgálatok a gyógyszerfejlesztés korai stádiumában jelezhetnek hepatotoxikus mellékhatást, vagy káros gyógyszer-interakciót. A vizsgálatokban együttműködő partner a SOLVO Biotechnológiai Zrt. volt. A Szent István Egyetemmel kooperálva a terápiarezisztenciáért felelős transzporterek és oxigén-függő fehérjék jelenlétét határozták meg és jellemezték állati tumorokban, különös tekintettel a fotodinamikus terápiában (PDT) részvevő transzporterekre.

Gyógyszer-kölcsönhatások vizsgálata

Kidolgozták a CYPtestTM diagnosztikai eljárás szakmai alapjait, amely a szervezet gyógyszerlebontó képességének meghatározásával lehetővé teszi az egyénre szabott gyógyszeres terápia kialakítását. A diagnosztikai rendszer egyfelől a gyógyszer-metabolizmusban résztvevő citokróm P450 enzimek expressziójának meghatározásán (CYP-fenotipizálás), másfelől a DNS-analízissel megállapítható génhiba kimutatásán (CYP-genotipizálás) alapul. A módszer klinikai alkalmazásra került olyan betegcsoportoknál, ahol több hatóanyagot együttes adagolnak, vagy ahol az egyéni gyógyszeres kezelés jelentősen javíthatja a gyógyszerek hatékonyságát és nagyban csökkentheti a toxicitás kockázatát. Az eljárás piaci bevezetését a Toxi-Coop Toxikológiai Kutató Központ Zrt vállalta fel.

A CYPtestTM eljárás szabadalmi oltalmi igénye bejelentésre került az Európai Szabadalmi Hivatalnál (EP 11184319.9) és a CYPtestTM védjegyet a Nemzetközi Unióban (EU, Japán, USA) bejegyezték. Megkezdődött az eljárás bemutatása orvos szakmai és társadalmi fórumokon.

Oligoszacharidok reakcióinak tanulmányozása

A heparin hatás-szerkezet összefüggés tanulmányozására három heparin tetraszacharidot szintetizáltak biológiai vizsgálatok céljára. E tetraszacharidok szintézise a korábban kidolgozott ortogonális védőcsoportstratégia segítségével egyetlen közös intermedierből történt. Ugyancsak biológiai vizsgálatokhoz további azacukrokat, a heparánáz enzim új típusú inhibitorait, állították elő.

Folytatták a glikozilezési reakciók sztereokémiai eredményét befolyásoló tényezők szisztematikus vizsgálatát. Részletesen vizsgálták az oldószerek befolyását a szubsztituensek által okozott sztereoselektivitás változásokra. Meghatározták azokat az oldószereket, melyekben a kívánt sztereoselektivitás változás maximális, továbbá azokat az oldószereket is, amelyekben a szubsztituens által okozott nemkívánt hatás minimalizálható. Az oldószerek a szubsztituens hatásra gyakorolt befolyását elméletileg is értelmezték.

Biológiailag aktív szénhidrátok szintézise

A C-glikoaminosavakat tartalmazó peptidomimetikumok előállítására jelenleg rendelkezésre álló irodalmi módszerek hátránya az, hogy a célvegyületek soklépéses szintézis során nyerhetőek. Emiatt az utóbbi években jelentősen megnövekedett a szintetikus lépés-hatékony többkomponensű reakciók használata a biológiailag aktív hatóanyagok kutatásában. A nagyfokú szerkezeti diverzitásuk miatt a többkomponensű reakciók alkalmasak kisebb molekulakönyvtárak létrehozására és elősegítik az új vezérmolekulák (lead compounds) könnyebb felfedezését.

Szénhidrát-módosított peptidomimetikumok szintézisét 4CR-Ugi reakcióval valósítottuk meg C-glikozil aldehid és keton valamint L-aminosavakból előállítható királis aldehid és keton származékokból kiindulva. Az Ugi-reakcióban további reaktánsként az amin és savfunkciót egy molekulában tartalmazó L-aminosavakat (alanin, szerin, treonin, prolin), valamint különböző izonitrileket (glikozil izonitril, glicinből előállítható etil 2-izociano-acetát, terc-butilizonitril) alkalmaztunk. A reakcióban képződő α -aminoacil-amid diasztereomerek aránya (dr) a királis karbonil vegyület, valamint a használt aminosav szerkezetétől függően 1.5 és 9 értékek között változott.

Organokatalitikus reakciók tanulmányozása

A kutatócsoport az általuk kifejlesztett, s világszerte alkalmazott kinin-alapú organokatalizátor alkalmazási lehetőségét vizsgálta az organokaszád reakciók területén. Jelentősen bővíteni tudták a katalizátorcsalád alkalmazási körét, s számos olyan komplex molekula szintézisét valósították meg, amelyek szintetikus szempontból elérhetetlenek voltak. Az általuk előállított molekulák fő felhasználási területe a gyógyszerfejlesztés lehet.

A nemrégiben felfedezett frusztrált Lewis sav-bázis párok területe egy alapvetően új stratégiát hozott a kismolekulák aktiválásában, amelyek közül kiemelkedik a hidrogén aktiválása. A koncepció megfogalmazása mellett, egy gyógyszeripari szempontból jelentős molekulacsalád esetén demonstrálták is a tervezési elv hatékonyságát. Számos kinolin gyűrűs vegyület, illetve alkaloid hatékony, szelektív redukcióját valósították meg. Részletes mechanizmus kutatásuk pedig egy érdekes reakcióút felismeréséhez vezetett, amely alapja lehet a jövőbeni katalitikus rendszerek tervezésének.

A méretkizárásos elv további kiaknázását valósították meg az ún. hidroszililezési folyamatokban, itt nem H_2 -t hanem trialkil-szilánokat alkalmaztak redukáló szerként. A méretkizárásos elvnek köszönhetően olyan szelektív reakciók voltak megvalósíthatók oxo vegyületek körében, amelyek eddig sem katalitikusan, sem sztöchiometrikus redukálószerrel esetén sem volt elérhető a szintetikus vegyészeti számára.

Vizsgálták annak lehetőségét, hogy egyes, gyógyszerkémiai szempontból fontos, egzotikus szerkezeti felépítésű aromás rendszerek kialakítása megoldható-e organokatalitikus módon. Végül több szintetikus módszert fejlesztettek ki 3, 4 illetve 5 szubsztituált aromás vegyületek előállítására, amely módszerben az aromás gyűrűt két egymást követő kondenzációs lépéssel alakították ki.

A palládium katalizált C-C kötés kiépítése a modern szerves kémia nélkülözhetetlen elemévé vált. Előállítottak néhány alkaloid ciklopropán származékát, ami egyedülálló ezen a területen. Sikert a rangszámkülönbségek összegén alapuló, analitikai módszerek és modellek rangsorolására szolgáló eljárás elméleti megalapozása és validálása, véletlenszerűségi teszt elméleti eloszlásának levezetése és gyakorlatban alkalmazható számítógépes program kifejlesztése. A rangsorolás, nemcsak kémiai tárgykörben használható, hanem általánosan, pl. egyetemek, bankok, országok rangsorolására is.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

A kutatások egyik célja olyan szintetikus eljárások kifejlesztése, amely lehetővé teszi a toxikus fémek helyettesítését, illetve mennyiségük jelentős csökkentését szintetikus kémiai gyakorlatban. E célkitűzések nagymértékben megegyeznek az EU által is megfogalmazott „beyond 2020” megfogalmazásokkal.

A kutatók részt vettek elsősorban a középiskolásoknak szervezett tudományt népszerűsítő programokban. Számos ismeretterjesztő előadást tartottak a kémia évében.

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* folyóirat és a *Kémia Portálja* online magazin (<http://www.kemiaportal.hu>) és a *Lángész* tudományos ismeretterjesztő portál (<http://www.langesz.hu>) szerkesztésében. Két ismeretterjesztő cikket publikáltak a *Biokémia* és *Kémiai Panoráma* folyóiratokban. Három előadást tartottak doktoranduszoknak, gyógyszerbiokémikusoknak és sztereo-kémikusoknak.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2011-ben

Az intézet kutatói a Semmelweis Egyetemen működő MTA Neuromorfológiai és Neuroendokrinológiai Laboratóriumával „A Glu-GABA cserefolyamatban résztvevő célfehérjék anatómiai és immunhisztokémai lokalizációja” című témában eredményesen dolgoztak együtt.

Részt vettek „A Glu-GABA cserefolyamat hatása in vivo neuronális aktivitásra” című téma vizsgálatában az MTA Pszichológiai Intézet kutatóival kooperálva.

A Creative Labor Kft. partnerrel közösen, nanoSEN9 projekt keretében közös kutatás-fejlesztési tevékenységet végeztek „Sejtvonalak előállítása immunfestési metodika tesztelésére” című témában.

A LuminoChem Kft. céggel az „Új Na⁺ ion-szelektív fluoreszcens festékek fejlesztése” című témában eredményesen dolgoztak együtt nanoSEN9 projekt keretében.

A Nanochem Kft. partnerrel együttműködve részt vettek – nanoSEN9 pályázati támogatással – az „Ultraérzékeny fluoreszcens detektor fejlesztése” című téma megvalósításában.

Az intézet tudományos együttműködést folytat a BioBlocks Magyarország Kft.-vel a „Növényi alkaloidok α -kimotripszin kötődésének vizsgálata” című témában a szintetizált indolokinolin alkaloidok enzimkötődésének sikeres kimutatása és részletes vizsgálata céljából. Az együttműködés során egy közös publikáció született.

A Virtua Drug Kft. partnerrel közösen eredményesen kutatnak a „Gyógyszer-humán szérumban albumin kötődési kölcsönhatások jóslására alkalmas on-line platform létrehozása” című témában. A gyógyszer-szérumban albumin kötődés jóslására röntgenkristallográfiai adatok és a szupport vektor gép modell együttes alkalmazásával egy nyilvános, webalapú on-line platformot hoztak létre. A közös eredményeket egy publikációban ismertették.

A Cyclolab Kft.-vel együttműködve az „Új ciklodextrinek királis szelektor hatékonyságának és komplex képző sajátságainak vizsgálata” című témában a szintetizált ciklodextrin származékok részletes vizsgálatát végezték el. Az együttműködés során egy publikáció jelent meg.

Együttműködést alakítottak ki a Richter Gedeon Nyrt.-vel a „Neurosteroidok alegység-szelektív, GABA-A receptorokat potenciáló hatásáról” című témában, s eredményeiket közös közleményben publikálták.

Az EGIS Gyógyszergyár megbízásából vegyületek hatásvizsgálatát végezték el TBPS és GABA kölcsönhatására membrán preparátumban.

A HepaRG, humán hepatoma sejtvonal transzporter proteinjeinek jellemzésének kutatásaiban együttműködő partner a Biopredic International (Rennes, Franciaország) szervezet volt. A HepaRG sejtvonal helyettesítheti a nagyon korlátozottan rendelkezésre álló humán primer hepatocitákat in vitro toxikológiai vizsgálatokban. Igazolták, hogy az efflux transzporterek gyógyszer-interakciós vizsgálataira hasonló eredményre vezettek a két sejttípusban.

A „Komplex sejtkultúra- és membránvezikula-alapú in vitro szolgáltatáscsomag fejlesztés kolesztatikus anyagok nagy érzékenységgel preklinikai szűrésére” című témában a Solvo Biotechnology céggel eredményesen kooperálnak (GOP 111-09/1). Hepatobiliáris uptake és efflux transzporterek expressziójának változását határozták meg a kultúra idejének függvényében. A gyógyszer-interakciók vizsgálatára alkalmas tesztek dolgoztak ki humán és patkány hepatociták felhasználásával. Egy tudományos publikáció született az együttműködés során.

A „Redox szabályozás az endoplazmás retikulum lumenében” című témában a Semmelweis Egyetemmel működik együtt az intézet ETT pályázat keretében. Olyan gyógyszerek hatását vizsgálták a bilirubin-glukuronidok (BG) eliminációjára, amelyek klinikai alkalmazásuk során kolesztázist okoztak. Több vizsgált hatóanyag jelenlétében a BG szinuszoidális transzportja megnőtt, aminek következtében a transzport eltolódott a szinuszoidális tér irányába. Ez jellegzetes kolesztatikus hatás, amely konjugált hiperbilirubineamiaként jelentkezik.

Az Uzsoki Utcai Kórházzal együttműködve az “ER – stressz kialakulásának vizsgálata metabolikus szindrómában” című témában módszert dolgoztak ki, amely során tumoros májból rezekcióval eltávolított szövet egészséges részből izoláltak hepatocitákat. Májfunkciós vizsgálatokkal igazolták, hogy a műtéti mintákból jó életképességű sejtkultúra készíthető.

A Delta Services Kereskedelmi és Szolgáltató Kft.-vel együttműködve a „Virtuális Laboratórium gyógyszerinterakciók vizsgálatára” című témában transzport kísérletekkel támasztották alá, hogy in silico vizsgálatok alapján humán ABCG2 és ABCB1 transzporterek szubsztrátjainak jószolgálatú gyógyszerek eliminációjában valóban ezek a transzporterek játszanak-e szerepet. A témában egy közös publikáció jelent meg.

A „Hepatobiliáris transzporterek szerepe a gyógyszerindukált kolesztázis patomechanizmusában” címmel egy PhD-hallgató képzése és a disszertáció kísérletes munkája folyik a Semmelweis Egyetem PhD Doktori iskolájának keretében.

A „Személyre szabott gyógyszeres terápia kialakítása a beteg gyógyszer-lebontó képessége alapján” című témában az intézet együttműködik a Fővárosi Önkormányzat Egyesített Szent István és Szent László Kórházzal, a Gottsegen György Országos Kardiológiai Intézettel, a Semmelweis Egyetem, Transzplantációs és Sebészeti Klinikával, Semmelweis Egyetem Pszichiátriai és Pszichoterápiás Klinikával, Heim Pál Kórházzal, a Madarász Utcai Gyermekkorházzal és a Fejér Megyei Szent György Kórházzal. A CYPtestTM alkalmazásával vizsgálják a betegek gyógyszer-lebontó (méregtelenítő) képességét, és közösen kialakítják a betegek egyéni gyógyszeres terápiáját. Hat közös publikációt jelentettek meg.

Intézmények közötti együttműködési megállapodás keretében az intézet kooperál az MTA Szegedi Biológiai Kutatóközpont Enzimológiai Intézetével „DNS metilációjának meghatározása” című és a „K-vitamin transzportjának tanulmányozása” című témákban. A korábban kidolgozott LC/MS/MS alapú metilációs profilmeghatározást alkalmaztuk számos biológiai mintán. Az eredményekről két cikkben számolnak be. Módszert dolgoztak ki K-vitamin és metabolitjának LC/MS/MS alapú meghatározására. A módszert sikeresen alkalmazták éles biológiai mintákon. A kutatás eredményeit két publikációban közzétették.

Kutatás-fejlesztési tevékenységet végeztek a Servier Kutatóintézettel és a Richter Gedeon Nyrt.-vel.

A Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetemen részt vettek a Szerves Kémia és Technológiai Tanszék oktatási tevékenységében és kutatásában. A kutatási téma címe: „Aszimmetrikus biotranszformációk folyamatos csőreaktorban” volt.

A magyar – indiai kétoldalú kutatási egyezmény keretében, a „Szintetikus kémiai kutatások heterociklusok körében” című témában eredményes együttműködést alakított ki az indiai egyetemmel (Sardar Patel University, Vallabh Vidyanagar–388120, Gujarat, India). A kutatómunka lehetővé tette egy új, izokinolinnal kondenzált triciklusos gyűrűváz egyszerű szintézisének kidolgozását. Eredményeiket egy közleményben tették közzé.

A „Synthesis and biological activity of new nitrogen-, sulfur-, and oxygen containing condensed heterocyclic compounds” címmel örmény-magyar kétoldalú akadémiai egyezménnyel az Örmény Tudományos Akadémia Finom Szerves Kémiai Intézetével működött együtt az intézet. A telített heterociklusos vegyületcsalád tagjainak néhány, a magyar laboratóriumban kidolgozott és sikeresnek bizonyult átalakításaira került sor.

Az „Új célpontok és új gyógyszerjelöltek az epilepszia leküzdésére: a gamma-aminovajsav transzport fehérjék altípusainak megkülönböztetésére szolgáló szelektív spirociklusos gátlószerek tervezése” című témában (ERA-2010 Chemistry) sikeresen pályázatot készítettek el.

A Turku-i Egyetem Farmakológiai Tanszék kutatójával közös kutatómunkát végeztek a rekombináns GABA-A receptorkötődés tanulmányozására.

A „HepaRG, humán hepatoma sejt vonal transzporter proteinjeinek jellemzése” kutatási témában az intézet a Biopredic International szervezettel (Rennes, Franciaország) kooperál. A HepaRG sejt vonal helyettesítheti a korlátozottan rendelkezésre álló humán primer hepatocitákat in vitro toxikológiai vizsgálatokban. Igazolták, hogy az efflux transzporterek gyógyszer-interakciós vizsgálatai hasonló eredményre vezettek a két sejt típusban.

A „Bioaktív emlőrák ellenes glikózaminoglikán oligoszacharidok kifejlesztése emlőrák kezelésére” címmel az intézet eredményes kutatási tevékenységet fejtett ki (TÉT 10-1-2011-0053). Együttműködő partner a szingapúri egyetemmel (Department of Anatomy, National University of Singapore, Singapore) volt.

Nemzetközi konzultációkat és tudományos előadásokat tartottak a Lonza (Svájc) és Sanofi (Franciaország) cégeknél.

Egy akadémiai csereprogram keretében az intézet együttműködik a Poznani Műszaki Egyetemmel (Lengyelország) „Hibrid nanorendszerek inverz gázkromatográfiás és kemometriai jellemzése” című témában, amelynek keretében perlit és abrazív töltőanyagok csoportosításával és hasonlóságainak kimutatását végezték. A közös munka eredményeként eddig öt publikáció jelent meg.

Az „Eltérő kemometriai és analitikai módszerek összehasonlítása” című témában különböző analitikai mérési, mintakezelési, extrakciós stb. módszereket rangsoroltak és hasonlítottak össze. Együttműködő szervezet a Novi Sad-i egyetem volt. Egy közös publikáció jelent meg.

Az intézet kutatói előadásokat tartottak a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar Doktori Iskolájában.

IV. A 2011-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Az intézet 2011-ben „Új szintézismódszerek kidolgozása és alkalmazása célzott hatásterületen aktív heterociklusos molekulák szintézisére” című témával Az OTKA pályázat támogatási mértéke 30 M Ft volt. 2011-ben a multidrog-rezisztenciát gátló új vegyületcsaládot fejlesztettek ki, valamint elvégezték az új átrendeződések kimutatását és elméleti értelmezését a heterociklusos kémia területén. Egy speciális kísérleti technika: a „flash vákuum pirolízis” felhasználásával a gyűrűtranszformáció kialakítását is megvalósították.

A „Bioaktív rákellenes glikózaminoglikán oligoszacharidok kifejlesztése emlőrák kezelésére” című témában sikeres TÉT Pályázatot nyertek el. A pályázati támogatás mértéke 54 M Ft, 2011-ben: 20 MFt.

„A 4,5,6,7-(klórmetil)indolok előállítása és alkalmazásuk indolvázis alkaloidok szintézisében” című témával sikeresen pályáztak (OTKA). Előállították az ergolinvázis alkaloidok néhány képviselőének ciklopropán származékát.

A „D3/D2 parciális receptor agonisták vizsgálata dopamin, GABA és glutaminsav kibocsátási mintázatok meghatározásával akut agyszeletben” címmel pályázatot (Richter témapályázat) nyert el az intézet. A pályázati támogatás mértéke 4 M Ft.

A GOP-1.1.1-09/1-2009-0001 sorszámú pályázat keretében 200 M Ft-ot nyert az intézet, amelyből 2011-ben 79 millió Ft volt a támogatás „Egyéni gyógyszeres terápia kialakítását támogató molekuláris diagnosztikai szakértői rendszer és szolgáltatás kidolgozása” című témában. 2011-ben befejezték a CYPtestTM eljárás módszereinek (CYP-fenotipizálás és CYP-genotipizálás) beállítását és validálását, valamint megkezdték a klinikai kipróbálást.

A „Virtuális laboratórium gyógyszerinterakciók vizsgálatára” címmel elnyert pályázat (KMOP 1.1.1-09/1-2009-0044) keretében 2011-ben feltérképezték 10 hatóanyag citokróm P450 enzimeken keresztül megvalósuló gyógyszerinterakcióját. A támogatás mértéke: kb. 140 M Ft.

Az intézet a „Különböző analitikai és kemometriai módszerek összehasonlítása” című témában 1,46 M Ft támogatást nyert, melyből tárgyében 0,73 M Ft-ot kapott (TÉT, RS-9/2009).

V. A 2011-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Daragics K, Szabó P, Fügedi P
Some observations on the reductive ring opening of 4,6-*O*-benzylidene acetals of hexopyranosides with the borane trimethylamine-aluminium chloride reagent
CARBOHYDRATE RESEARCH 346:(12) 1633-1637. (2011)
2. Varga Sz, Jakab G, Drahos L, Holczbauer T, Czugler M, Soós T
Double diastereocontrol in bifunctional thiourea organocatalysis: iterative Michael-Michael-Henry sequence regulated by the configuration of chiral catalysts
ORGANIC LETTERS 13:(20) 5416-5419. (2011)

3. Németh K, Tárkányi G, Varga E, Imre T, Mizsei R, Iványi R, Visy J, Szemán J, Jicsinszky L, Szente L, Simonyi M
Enantiomeric separation of antimalarial drugs by capillary electrophoresis using neutral and negatively charged cyclodextrins
JOURNAL OF PHARMACEUTICAL AND BIOMEDICAL ANALYSIS **54**:(3) 475-481. (2011)
4. Molnár T, Dobolyi Á, Nyitrai G, Barabás P, Héja L, Emri Zs, Palkovits M, Kardos J
Calcium signals in the nucleus accumbens: Activation of astrocytes by ATP and succinate
BMC NEUROSCIENCE **12**:96. (2011)
5. Temesvári M, Paulik J, Kóbori L, Monostory K
High-resolution melting curve analysis to establish CYP2C19*2 single nucleotide polymorphism: comparison with hydrolysis SNP analysis
MOLECULAR AND CELLULAR PROBES **25**:(2-3) 130-133. (2011)

VI. A Biomolekuláris Kémiai Intézet főbb mutatói 2011-ben

1. Létszámadatok

Átlaglétszám*:	0	Ebből kutató*:	0
PHD v. CSc*:	0	MTA doktora v. DSc*:	0
MTA levelező tag*:	0	MTA rendes tag*:	0
Akadémikusok száma (a fenti kettő összesen):	0		
Az intézethez kötődő akadémikusok száma:	0		
35 év alatti, intézeti állományban levő kutatók száma*:	0	kutatónők száma*:	0

2. Publikációk¹

Az év folyamán megjelent tudományos², oktatási és tudományos ismeretterjesztő³ publikációk száma összesen:

48
41

2.1 Az év folyamán megjelent tudományos publikációk száma:

2.1.1 Szakfolyóiratban megjelent tanulmányok, cikkek száma⁴

hazai tudományos folyóiratban magyarul:	0	~ idegen nyelven:	0
külföldi folyóiratban magyarul:	0	~ idegen nyelven:	41
mindezekből impakt faktoros publikáció magyarul:	0	~ idegen nyelven:	40
recenzió, kritika magyarul:	0	~ idegen nyelven:	0

2.1.2 Könyv⁵, könyvfejezet⁶

könyv/monográfia ⁷ magyarul:	1	~ idegen nyelven:	0
tanulmánykötet magyarul:	0	~ idegen nyelven:	0
könyvrész és könyvfejezet magyarul:	0	~ idegen nyelven:	2

2.1.3 Konferenciacikk- és kiadvány

magyarul:	0	~ idegen nyelven:	3
-----------	---	-------------------	---

2.1.4 Egyéb publikáció⁸

tanulmánykötet szerkesztése, szöveggondozás magyarul:	0	~ idegen nyelven:	1
sorozatszerkesztés magyarul:	0	~ idegen nyelven:	0
atlasz ⁹ magyarul:	0	~ idegen nyelven:	0
tematikus térkép magyarul:	0	~ idegen nyelven:	0
kritikai kiadás: 5 szerzői ¹⁰ ívig:	0		
kritikai kiadás: 5 szerzői ív felett:	0		
szótári szócikkállomány magyarul:	0	~ idegen nyelven:	0
lexikoncikk ¹¹ magyarul:	0	~ idegen nyelven:	0
szakfordítás: 5 ívig:	0		
szakfordítás: 5 ív felett:	0		
bibliográfia magyarul:	0	~ idegen nyelven:	0

adatbázis¹² magyarul: ~ idegen nyelven:
 atalógus¹³ magyarul: ~ idegen nyelven:

2.2 Oktatási anyag

felsőoktatási tankönyv vagy jegyzet¹⁴ magyarul: ~ idegen nyelven:

2.3 Tudományos ismeretterjesztő írás cikk magyarul: ~ idegen nyelven:

könyv, könyvrészlet magyarul: ~ idegen nyelven:

3. Hatástényező és idézettségi mutatók

összesített impakt faktor:¹⁵

összes független hivatkozás száma:

összes hivatkozás száma:¹⁶

kapott recenzió, kritika:

4. Tudományos fokozat, illetve cím megszerzése 2011-ben

PhD: MTA doktora cím:

5. Szellemi alkotások védelme¹⁷

nemzeti úton megadott oltalmak száma:¹⁸ megadott külföldi oltalmak száma¹⁹:

értékesített szabadalmak száma:

szertői jogvédelem alá tartozó alkotások száma²⁰:

**6. Részvétel a tudományos közéletben
Tudományos rendezvények**

nemzetközi rendezvényen tartott előadások száma: ~posztterek száma²¹:

hazai rendezvényen tartott előadások száma: ~posztterek száma:

hazai rendezvények szervezése: nemzetközi rendezvények szervezése:

Szakértői tevékenység

tanácsadói tevékenységek száma²²:

opponensi vélemény összesen ebből külföldre:

egyéb szakértői vélemény: ebből külföldre:

egyéni szaklektori vélemény összesen: ebből külföldre:

Részvétel tudományos testületben

szerkesztőségi tag nemzetközi szakfolyóiratban:

szerkesztődégi tag hazai szakfolyóiratban:

nemzetközi tud. bizottság tagja: nemzetközi tud. bizottság vezetője:

hazai tud. bizottság tagja: hazai tud. bizottság vezetője:

7. Az intézetet és a tudományt népszerűsítő tevékenység

nyilvános esemény megrendezése²³:

kulturális rendezvények²⁴:

ismeretterjesztő előadások száma:

tudományos ismeretterjesztő műsorok szerkesztése TV-ben, rádióban:

8. A hazai felsőoktatásban végzett tevékenység

rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma²⁵:

ebből doktori iskolákban oktatók száma: doktori iskolát vezetőik száma:

doktori iskolában törzstagok száma:

elméleti kurzusok száma²⁶: gyakorlati kurzusok száma:

témavezetések száma (TDK-dolgozat): t

témavezetések száma (BA, illetve BSc diplomamunka):

témavezetések száma (MSc, illetve MA diplomamunka):

témavezetések száma (PHD-disszertáció)

9. Egyéb adatok

9.1 Kutatói mobilitás

A kutatóhely vendégtevékenységet folytató munkatársainak száma

hazai egyetemen vagy kutatóintézetben: vállalatnál:

külföldi egyetemen vagy kutatóintézetben: vállalatnál:

Vendégkutatók száma a kutatóhelyen

hazai kutatók száma félévénél rövidebb ideig: félévénél hosszabb ideig:

külföldi kutatók száma félévénél rövidebb ideig: félévénél hosszabb ideig:

A kutatóhelyen más hazai kutatók által kutatómunkával eltöltött idő²⁷:

A kutatóhelyen külföldi kutatók által kutatómunkával eltöltött idő:

9.2 Vállalati kapcsolatok az aktuális évben

A kutatóhellyel szerződéses kapcsolatban álló közép- és kisvállaltok száma:

A kutatóhellyel szerződéses kapcsolatban álló nagyvállalati partnerek száma:

10. Pénzügyi adatok

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege*:

M Ft

Fiatalkutatói álláshelyek száma*:

Az időszak folyamán a teljes saját bevétel (pályázatok, szabadalmak, szerződések, stb.) összege

(az akadémiai költségvetési támogatáson kívül)*: M Ft

saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel*:

Hazai pályázatok:

Az év folyamán művelt OTKA-témák száma:

A tárgyévre vonatkozó bevétel*:

M Ft

Az év folyamán művelt NKTH-pályázat témáinak száma:

NKFP:

A tárgyévre vonatkozó bevétel*:

M

Ft Egyéb:

A tárgyévre vonatkozó bevétel*:

M

Ft

Az év folyamán művelt ÚMFT-témák száma:

A tárgyévre vonatkozó bevétel*:

M Ft

Az év folyamán művelt egyéb hazai témák száma:

A tárgyévre vonatkozó bevétel*:

M

Ft Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma:

EU-forrásból:

A tárgyévre vonatkozó bevétel*:

M

Ft Egyéb:

A tárgyévre vonatkozó bevétel*:

M

Ft

Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:

A tárgyévre vonatkozó bevétel*:

M Ft

A *-gal jelölt adatokat kérjük, ne töltsék ki. Ezekbe a rovatokba az éves pénzügyi beszámoló alapján a Pénzügyi Főosztály adatai kerülnek.

I. A kutatóhely fő feladatai 2011-ben

Az intézet feladata a nemzetközi színvonalú tudományos kutatás folytatása főként a katalízis, a nanokémia és felületkémia területén.

A heterogén katalíziskutatások a megújuló energiaforrások hasznosítására, az energiakonverzió hatékonyságának javítására, a pórusos anyagok szintézisére és módosítására, a felületi és szerkezeti tulajdonságok meghatározására, valamint a fizikai-kémiai és katalitikus tulajdonságok közötti összefüggések tanulmányozására vonatkoznak. Intenzív kutatásokat végeznek az alkoholoknak, elsősorban üzemanyagként, H₂-forrásként és tüzelőanyag cellákban történő hasznosítása céljából. Figyelmet fordítanak a katalizátorok felületén lejátszódó folyamatok, valamint a reagensek és a katalizátorok kölcsönhatásának vizsgálatára is. Az intézet egészségvédelemmel összefüggő kutatási irányai között kiemelkedő az orvosi célú szerves és szervetlen alapú nanorendszerek előállítása, amely alkalmas a hatóanyagok és szenzormolekulák célzott bevitelére, valamint az előállított és jellemzett nanorendszerek biológiai hatásának és toxicitásának vizsgálatára.

A széles spektrumú felületkémiai kutatásoknak köszönhetően az intézet részt vesz bioszenzorok fejlesztésében, tervezett tulajdonságú nanorészecskéket és nanoszerkezetű bevonatokat készít és jellemez, az elektromos energiátárolás új eszközeit fejleszti (szuperkondenzátorok), illetve intelligens anyagokat (öngyógyító és elnyújtott védő hatású bevonatok, mikrokapszulák) állít elő.

II. A 2011-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Biológiai nanokémiai kutatások

Új kinázgátlót tartalmazó liposzómás és micellás rendszereket állítottak elő és jellemeztek. A különböző méretű és összetételű, sztérikusan stabilizált liposzómák héjszerkezetére pontos leírást adtak az ESRF (European Synchrotron Radiation Facility) ID02 mérőállomásán kivitelezett kisszögű röntgenszórás adatok alapján. A modell-membrán rendszerekben a polialmasav, dendrimer, illetve a TRIS puffer által foszfolipid kettősrétegek szerkezetében okozott változásokat jellemezték.

A multilamellás vezikula modellrendszerek mellett változatos összetételű kétdimenziós lipid szerveződéseket – oldatfelszínre terített Langmuir-monorétegeket, szilárd hordozós monorétegeket, valamint hordozott lipid kettősrétegeket – állítottak elő és rezgési spektroszkópiával determinálták az egyes szerkezeti jellemzőiket. Meghatározták a lipid-rétegek (DPPG/DPPCd₆₂) és kémiai anyagok, polimerek (hialuronsav, PAMAM G5.0 (amino) és G4.5 (karboxilát) dendrimer) 0.05 mg/ml koncentrációban) közötti kölcsönhatásokat. Célzott hatóanyag-bevitelre alkalmas szilárd, kompakt és mag-héj összetételű nanohordozókat fejlesztettek ki és jellemeztek. Terápiás fibrinolízis céljára proteázal töltött liposzómákat állítottak elő, illetve azok elhelyezkedését tanulmányozták a fibrin mátrixban.

A nemesfém kolloid rendszerek biomedicinális alkalmazása az irányított gyógyszerbevitelnél nyújt segítséget, mely az egyik legfontosabb megoldandó feladat a modern terápiás eljárásokban. Ehhez olyan kolloidálisan stabil hordozó részecskék szükségesek, amelyek egyrészt képesek megkötni a hatóanyag molekulákat, másrészt a kolloidális stabilitásukat megőrzik a biológiai környezetben is. Ilyen rendszereknek számos egyéb feltételnek is meg kell felelniük. Egyik potenciális lehetőség a kolloidális arany részecskéknek gyógyszerhordozó anyagként történő alkalmazása. A biológiai környezetben megkívánt kolloidális stabilitás biztosításához új típusú stabilizáló anyagok és új szintézismódszerek is szükségesek. A tématerülethez kapcsolódóan új szintézis módszert dolgoztak ki, amelyben cukorszírsav-etoxilátumokat alkalmaztak az arany nanorészecskék kolloid rendszereinek stabilizálására. Megállapították, hogy az ezekkel a molekulákkal borított arany részecskék rendkívül hosszú távú, 12 hónapos stabilitással rendelkeznek. A kolloidok stabilitásukat nemcsak az eredeti, vizes közegükben őrzik meg, hanem fiziológiás só koncentrációt tartalmazó körülmények között is. A stabilitás időtartama a felhasznált felületaktív anyagban lévő etilén-oxid lánc hosszától függően 5-30 nap között változott. Az elért eredményekre alapozva már hatóanyagot tartalmazó terápiás készítmények előállítása is tervezhetővé válik. Megvalósult a tervezett mikrofluidikai „lab-on-a-chip” biológiai sejtvizsgálatok céljaira kifejlesztett multifunkcionális eszköz, amely szimultán elektrokémiai és optikai stimulációra, valamint adatgyűjtésre alkalmas. Az eszköz gazdasági hasznosítására tervet készítettek.

Felületmódosítási és nanoszerkezet-vizsgálatok

Szénalapú szuperkondenzátorok kutatási terén tanulmányozták különböző anyagminőségű és fajlagos felületű elektródok (szénzövet, aktív szén, szénnanocső (CNT)) elektrokémiai jellegzetességeit. Megállapították, hogy a CNT alapú elektródok a kis pórusellenállásuk és jó vezetőképességük következtében kiemelkedően nagy teljesítménysűrűséggel rendelkeznek, nagy frekvenciájú alkalmazásra kiválóak, míg az aktív szén, illetve szénzövet alapú elektródoknak – a nagyobb fajlagos felületüknek köszönhetően – energiatároló képességük kiváló. Megállapították továbbá, hogy a CNT növesztése során az alkalmazott katalizátor összetételének és koncentrációjának szisztematikus változtatásával a szénnanocső átmérője és falvastagsága, valamint a CNT-réteg sűrűsége szabályozható. Az optimalizáció során sikerült 60 F/g specifikus kapacitást elérniük, mely megközelíti az egyfalú szénnanocső szerves elektrolitokban elméletileg elérhető maximális kapacitását (80F/g).

A réz korróziójának csökkentését vizsgálták 5-IPBDT inhibitorral. A kutatás során szkennning elektronkémiai mikroszkóp (SECM) sikerült az 5-(4'-izopropilbenzilidén)-2,4-dioxotetrahidro-1,3-tiazolnak (5-IPBDT), mint korróziós inhibitornak a réz felületén történő időbeli réteg kialakulását követni és egyúttal igazolni, hogy az 5-IPBDT egy jó korróziós inhibitor.

Széles körben tanulmányozták a nanokémiai eljárások alkalmazhatóságát nikkelt, kobalt, mangán és vas nanorészecskék, valamint az ezekből felépülő nanoszerkezetű kompozit anyagok előállítási lehetőségeit. Módszert dolgoztak ki az izometrikus, illetve pálcika és egyéb speciális alak-anizometriával rendelkező nikkelt nanorészecskék előállítására. Tanulmányozták ezen anyagok mágneses jellemzőinek változását a szemcseméret és az alak-anizotropia függvényében. Megállapították, hogy a pálcika alakú részecskékénél a mágneses hiszterézis görbéből származtatható koercitív erő értéke mintegy 2/3-dal nagyobb, mint a gömb alakú részecskék esetén. E kutatási eredmény azért is lényeges, mivel a fém nanorészecskék, közöttük is a nikkelt számos vezető kutatási terület számára rendkívül fontos, így például alapanyagként használható optikai, elektronikai eszközökben, katalitikus eljárásokban valamint mágneses anyagokat igénylő berendezésekben. Kiemelkedően nagy fontosságú terület az állandó mágnesek új generációját jelentő nanoszerkezetű állandó

mágnanyagok fejlesztése, a részecskék mágneses anizotrópiájának növelése oly módon, hogy a szemcseméret egyidejűleg a nanoméret-tartományban maradjon. A kutatási eredmények egyrészt új lehetőségeket tárnak fel ezen anyagok kémiai úton történő előállításához, másrészt bővítik a mágneses részecskék fizikai/kémiai tulajdonságairól rendelkezésre álló ismereteket.

Pásztázó elektrokémiai mikroszkóppal kimutatták a mikrokapszulák korrózióvédő hatását acéllemezeken. Kutatásokat végeznek a mikrokapszulák bevonatban való alkalmazási lehetőségeinek kidolgozására, vizsgálják a kapszulák fizikai tulajdonságait, foglalkoznak a hatóanyagot elhúzó időben leadó mikrogömbök mátrix anyagának vizsgálatával, a hatóanyag kioldódásával, a mikrorészecskék festékbe építhetőségének és a biolerakódás időbeli alakulásának megismerésével is.

Elemzik a komplex hatású – korrózió és biolerakódás gátló – nanorétegek kialakításának lehetőségét fémfelületen molekuláris, önszerveződő és Langmuir-Blodgett filmekkel, s polimer rétegekkel; valamint tanulmányozzák a szilárd hordozóra felvitt rétegek tulajdonságait, illetve a rétegek kialakításának (rétegszám, koncentráció, utókezelés) hatását a fémek kioldódására.

Hidrogén-energia kutatások

A polimer elektrolit membrán (PEM) tüzelőanyag cellák elektrokatalizátorainak fejlesztése során irányított felületi reakcióval – jól szabályozott körülmények között – Pt_3Sn (fcc) ötvözet fázist alakítottak ki, ami rendkívül aktívnak mutatkozott szénmonoxid (CO) elektrooxidációjában, így az anód katalizátorok CO-toleranciáját jelentős mértékben sikerült növelni; a CO-oxidációjának kiindulási potenciálja 500 mV-tal csökkent a csak Pt-t tartalmazó katalizátorhoz képest. Szintén a CO-tolerancia, valamint a hidrogén elektrooxidációja aktivitásának növekedését eredményezte az aktív szén módosítása $\text{Ti}_x\text{W}_y\text{O}_2$ elektromosan vezető vegyes oxidokkal, amelyek előállítására új módszert dolgoztak ki. Mintegy hatszoros aktivitásnövekedést sikerült elérni a módosítatlan katalizátorokhoz képest. A $\text{Ti}_x\text{W}_y\text{O}_2$ vegyes-oxidban a rutil/anatáz fázisarány változása nagy hatással van az elektrokatalitikus aktivitásra. A kifejlesztett katalizátorok és membrán elektród együttesek kiválóan teljesítettek a tüzelőanyag-cellákban. A hagyományosan alkalmazott 0.8 mg Pt/cm^2 nemesfém igényt mérsékeltek 0.55 mg Pt/cm^2 -re úgy, hogy közben a cella elektromos teljesítménye elérte, s túl is szárnyalta a kereskedelmi forgalomban kapható membrán-elektrod együttesekét: 0.5 V kapocsfeszültség mellett 1.2 A/cm^2 áramsűrűség értéket lehetett mérni. A kifejlesztett katalizátorokat hazai vállalkozások alkalmazzák elektromos motor meghajtáshoz az általuk kifejlesztett termékekben.

Kis mennyiségű átmeneti fémet (Me) tartalmazó $\text{Pt/TiMe}_x\text{O}_y$ fotokatalizátorok hatékonynak bizonyultak fotokatalitikus metanol reformálásban. A módosítatlan Pt/TiO_2 katalizátoron 4 ml/h míg a $\text{Pt/TiSn}_{0.005}\text{O}_2$ katalizátoron 30 ml/h hidrogéngáz fejlődött. A megnövekedett aktivitás elsődleges forrása, hogy a módosítók lényegesen befolyásolták a TiO_2 fényelnyelési tulajdonságait, azaz a félvezetők tiltott sáv szélességét. A környezetbarát módon, csak a napfény energiáját felhasználó eljárásban előállított hidrogén PEM tüzelőanyag-cellákban alkalmazható.

Hidrogénüzemű PEM cellák katalizátorai érzékenyek a hidrogénben gyakorta előforduló CO szennyezőre. Az alkalmazott katalizátorok CO toleranciájának növelése mellett szükséges a CO terhelés csökkentése is, amelynek egyik lehetősége a CO szelektív oxidatív (PROX reakció) eltávolítása. Az e célra alkalmazható arany katalizátorok működésének molekuláris szintű megértését célzó in situ modellkísérletek sorozatát hajtották végre. Megállapították, hogy az arany felület még alacsonyan koordinált hibahelyekkel ellátva sem képes aktiválni az oxigént, így a felületen adszorbeált CO oxidációjára nem kerül sor. A víz alacsony

hőmérsékleten fiziszorbeálódik mind a sima, mind a nanomorfológiával ellátott arany felületre. Bár az arany felület önmagában a vizet sem aktiválja, a víz adszorbeátumok hidrogénkötés jellegű kémiai kapcsolatot hoznak létre a felületen megkötött CO-val. Az eredmények a CO oxidáló arany katalizátorok bifunkciós jellegét támasztják alá, míg a CO adszorpciója az arany alacsony koordinációs számú hibahelyein valósul meg, az oxidálószer akár atomos oxigén, akár hidroxilcsoportok formájában az oxid hordozó szolgáltatja.

Az etanol és a dimetiléter adszorpcióját és bomlását vizsgálták hordozóra felvitt arany katalizátoron. Jelentős eredménynek számít, hogy CO-mentes hidrogént állítottak elő a hangyasav bontásával szén (Norit) hordozóra felvitt platina fémeken. A nitrogén-módosított TiO₂ felületen az etanol fotóindukált bomlása jelentősen megnőtt, hidrogén és acetaldehid volt a fő termék. Adalékolt Rh/Al₂O₃ katalizátoron a szintézisgáz képződését vizsgálták a CO₂ + CH₄ reakciójában. Elektron- foton- és ion spektroszkópiával (AES, XPS, LEIS, RAIRS), valamint STM-mel tanulmányozták a kétfémes nanoszerkezetek képződését és fizikai-kémiai sajátosságait egykristály titándioxid felületen. Az arany-ródium rendszer estében mag-héj szerkezet kialakulását figyeltek meg. Ennek eredményeképpen az arany vált dominánssá a felületen. Hasonló szerkezet alakul ki titanát nanokompozitokon (nanoszál és nanocső) is. Mindezek az eredmények energetikai szempontból hasznosíthatók.

Mikro- és mezopórusos anyagok kutatása

Katalitikus, termokémiai és biológiai átalakítással biomasszából könnyen lehet karbonsavakat előállítani. A karbonsavak karboxil csoportjának alkohollá történő szelektív hidrokonzverzióját vizsgálták újfajta, kétfémes, Ni- és In-tartalmú, Al₂O₃ hordozós katalizátorokon oktánsav modell reaktáns alkalmazásával 21 bar nyomáson 300-400 °C hőmérséklet tartományban. A katalizátort úgy állítják elő, hogy In₂O₃ port kevernek a jó hidrogénező aktivitású Ni/Al₂O₃ katalizátorhoz, majd pedig redukáló atmoszférában kezelik. Azt tapasztalták, hogy In hozzáadás hatására a Ni/Al₂O₃ katalizátor aktivitása, illetve szelektivitása drasztikusan megváltozik. Indium hatására a kiindulási szénhidrogénláncnál rövidebb szénláncú paraffint eredményező hidrodekarbonilezési reakció háttérbe szorul. Elsődleges reakcióvá válik a szerves sav alkohollá történő szelektív redukciója. Rámutatottak továbbá arra, hogy az alkohol dehidratálódása is, ami főként hordozó hatás, jelentősen visszaszorul. A kiemelkedően nagy alkohol szelektivitás igen széles nikkkel, ill. indium koncentráció tartományban fennáll. Az újfajta Ni₂In/Al₂O₃ katalizátor, a zsíralkoholok előállítására alkalmazott ipari hidrogénező Adkins katalizátorhoz (72 % CuCr₂O₄ and 28 % CuO) képest aktívabb, szelektívebb és kevésbé terheli a környezetet.

A zsírsavak hidrokonzverziójakor a katalizátoron kapott kedvező termékeloszlás aktív Ni₂In ötvözetfázis létrejöttéhez rendelhető. A hidrogénezési átalakulás függése a reaktánsok parciális nyomásától Langmuir-Hinschelwood kinetikára és sebesség meghatározó felületi reakcióra utal. Az indiumos adalékolás hatékony szerepének felismerése a karbonsavak redukciója során új utat nyithat a katalizátor fejlesztés területén.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

Az intézet kutatói részt vettek a Lángész projekt keretében megrendezett tudománynapokon, budapesti és vidéki óvodákba, középiskolákba látogattak el és tartottak interaktív előadásokat és kísérleti bemutatókat a nanotechnológiáról (Nanomozaik). A programot a Múzeumok Éjszakája című rendezvényen is népszerűsítették. Részt vettek a kémiai iránt érdeklődő kiemelkedő képességű középiskolásoknak szervezett, „AKI kíváncsi kémikus” elnevezésű programban.

Témavezetőként középiskolás diákokat oktattak és munkájukat irányították a következő három kiírt témában: „Hogyan épül fel a sejtmembrán?”, „Korszerű üzemanyagok előállítása katalitikus eljárással” és „A Családi házak energiaellátására alkalmas hidrogén tüzelőanyag-cellák”.

Az emberi és az állati táplálkozásra alkalmatlan biomassza egyre inkább kívánatos megújuló energia-, ill. nyersanyagforrás. Jelenleg a biomassza átalakítása értékes kémiai intermedierek, valamint könnyen szállítható energifajták (elektromos energia és vezetékes gáz) vagy energiahordozók (hidrogén és elsődlegesen folyékony üzemanyagok) minél gazdaságosabb előállítására irányul. Az etanol, közvetlenül felhasználható, mint motorhajtó anyag. A cukrok és a keményítő az etilalkohol előállítás régóta ismert nyersanyagai, ugyanakkor felhasználásuk nagymennyiségű üzemanyag előállítására jelentős élelmiszerár emelkedést okoz, továbbá számos szociális, gazdasági és környezetvédelmi problémát vet fel. Ezzel szemben a szerves hulladékok (pl. a cellulóztartalmú melléktermékek) hasznos törekvés. A biomassza feldolgozásának lehetséges módja termokémiai vagy biológiai lebontása levegőtől elzárt körülmények között. Mindkét esetben, főleg cellulóz tartalmú alapanyag feldolgozásakor, a fontos termékek a kismolekulájú karbonsavak, főleg az ecetsav.

A biológiai úton előállított folyadék állapotú termék biológiai úton biogázzá, heterogén katalitikus hidrogénezéssel pedig alkoholokká, elsősorban bioetanollá alakítható. A kutatás eredménye újszerű katalitikus eljárás tudományos megalapozása, mely a biokarbonsavak bioalkolokká való hatékony átalakítását teszi lehetővé.

A termokémiai biomassza feldolgozás, nevezetesen a pirolízis, cseppfolyós terméke a pirolízisolaj. A pirolízisolaj közvetlen hasznosítása korlátozott, gyakran káros a környezetre. A szerves savak kinyerése és alkohollá alakítása bizonyos pirolízis olajok egy részének hasznosítására jelenthet megoldást. Az olaj teljes tömegének ártalmatlanítására és hasznosítására alkalmas eljárás az olaj elgázosítása és a gáz felhasználása energiahordozóként, amivel az intézet évek óta foglalkozik. Együttműködő partnerével, a Terra Humana Kft.-vel közleményt jelentettek meg a „Figyelő” című hetilapban („Gázfröccsre várnak” 2011./32. szám - augusztus 11.) A kutatók eredményeikről az EuroNanoFórum 2011 budapesti nemzetközi rendezvényen számoltak be, illetve ismertették a megújuló energia kutatási eredményeiket Renewable Energy Handbook 2011 kiadványban.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2011-ben

A „Rendezetlen fehérjék vizsgálata kisszögű röntgenszórással” című téma keretében kutatási együttműködés valósult meg az MTA SZBK Enzimológiai Intézettel, s előméréseket végeztek a hamburgi Szinkrotron B1 mérőállomásán.

Eredményes kooperáció keretében (együttműködő partner: Richter Gedeon Nyrt.) a „Liposzómás hatóanyag szerkezeti jellemzése” című témában röntgenszórásos vizsgálatokat végeztek. E hazai gyógyszergyárral együttműködésben a „Hialuronsav és sóinak fizikokémiai jellemzése, és a bőr víz háztartását befolyásoló hatásának vizsgálata” című kutatás során a kisszögű röntgenszórásos, reológiai és morfológiai vizsgálatokat végeztek és meghatározták a hialuronsav-származékok szerkezetét.

A „PEM (proton exchange membran) típusú tüzelőanyag-cellák ötrétegű MEA (membrane electrode assembly) kutatás-fejlesztése új típusú anód katalizátorokkal” című kutatási témában a Kontakt-Elektro Ipari, Kereskedelmi Kft. partnerrel működött együtt az intézet. Membrán elektród együtteseket alakítottak ki a kifejlesztett $Ti_xW_yO_2$ -vel módosított anód elektrokatalizátorok segítségével. A katalizátorokat a gázdifúziós rétegre különböző technikákkal vitték fel (hagyományos tintasugaras nyomtató, impregnálás, szitanyomtatás).

Az MTA Izotópkutató Intézettel együttműködve, az „Inverz oxid/fém határfelületek genezise, jellemzése és alkalmazása modell rendszerben” című OTKA pályázatban az arany hordozón létrehozott vas-oxid réteg, úgynevezett „inverz modellkatalizátor” segítségével vizsgálatokat végeznek az arany/átmenetifém-oxid katalizátorok működési mechanizmusának jobb megértése érdekében. A közös munka eredményéről két publikációban számoltak be.

Az „Új biológiai szennyvíztisztító berendezések és technológia kutatása és fejlesztése” című NKFP támogatású konzorciális pályázat keretében, az *UWATECH Környezet- és Víztechnikai Kft.*-vel partnerrel egy közös előadásban számoltak be az eredményekről.

Az „Innovatív bio-energetikai és környezetvédelmi eljárás és prototípus fejlesztése” című témában (GOP-1.1.1-08/1-2008-0010), a Terra Humana Kft. résztvevővel három közös előadás révén kerültek bemutatásra az eredmények.

Az intézet a TÁMOP 4.2.1/B-09/1/KONV-2010-0003 4.1 és 4.2 alprojekthez kapcsolódó intézményi szakértői megbízás keretében a Pannon Egyetemen és az MK-VFI-MOL Ásványolaj- és Széntechnológiai Intézeti Tanszékével kutatásokat végeznek a „Benzinfrakciók további benzol- és aromástartalom csökkentése katalitikus úton” és „Motorbenzinek- és gázolaj-keverőkomponensek előállítására melléktermékként keletkező olefinekből” című témákban. A közös munka során két közös publikáció és egy előadás született.

Az EXCELL FP7 projekt keretében, az „Exploring cellular dynamics at nanoscale” című együttműködést alakítottak ki a Dán Műszaki Egyetemen (Danish Technical University, Koppenhága, Dánia) és a Potsdami Egyetemen (University of Potsdam, Potsdam, Németország). Megoldották galvanikus helyettesítés módszerével a szilíciumból kialakított mikrostruktúrák felületének aranyréteggel történő stabil bevonását. A bevonat adhézióját hőkezeléssel, az Au/Si eutektikus rendszer szabályozott, optimalizált kialakításával javították. A végső bevonat alkalmazhatóságát adhéziós és elektrokémiai mérésekkel elemezték. A kifejlesztett bevonat vizsgálataik alapján alkalmas háromdimenziós rendszerek teljes fémes bevonására és kompatibilis a fotolitográfia adta struktúra kialakítási lehetőségekkel is, így többfunkciós szenzorok kialakítására is módot nyújt. Az eredmények két poszterben kerültek bemutatásra. Megvalósították a biomimetikus, membránfehérje alapú redoxszenzor fejlesztését. A kidolgozott felületmódosítási stratégia alkalmas intracellulárisan alkalmazható elektródstruktúra bevonására is. Az eredményeket három poszterben és egy előadásban prezentálták.

A MoVTenNb vegyes oxidok kombinatorikus tervezése és katalitikus tulajdonságaik nagyáteresztő vizsgálatát végezték el a „Propán szelektív oxidációja” című kutatási szerződés keretében a németországi Süd Chemie AG (Heufeld) céggel együttműködve. Az akrilsav hozam a legjobb kompozíciókon meghaladja az 50 %-ot.

Az intézet MTA kétoldalú egyezményes kapcsolatot alakított ki a Bolgár Tudományos Akadémiával (Institute of Organic Chemistry, Bulgarian Academy of Sciences, Szófia, Bulgária) „Mikro- és mezopórusos szilikátok szerkezeti és savas tulajdonságainak módosítása és alkalmazásuk katalizátor és adszorbens anyagként” című témában. A kooperáció során két fő bolgár és két fő magyar kutató látogatást tett a partnerintézménynél. A közös munkát és annak eredményét publikációk összeállítása, valamint a projekt folytatásának előkészítése, az együttműködés munkatervének egyeztetése jellemzi. A témában öt közös publikáció jelent meg és egy előadásban ismertették a témához kapcsolódó eredményeket.

A „Monolit fém-zeolit katalizátorok fejlesztése” című pályázatban (TÉT, AR-4/2008; együttműködő partner: INCAPE, FIQ, UNL-CONICET, Santa Fe, Argentína) egy fő argentin kutató egy hónapos tanulmányúton volt a magyar intézetnél. Az eredményekről két közös publikációt jelentettek meg és négy közös előadást is tartottak.

Az MTA-CNR egyezmény keretében, a „A Fischer-Tropsch Mechanizmus vizsgálata” címmel Institute of Nanostructured Materials, National Research Council of Italy kutatói között kölcsönös tanulmányútra került sor. Az együttműködés során elkészítették és benyújtották a FESR Basilicata pályázatot „Összetett lézer technológia” címmel.

A Magyarország Románia Határon Átnyúló Együttműködési Program (HURO/0901/090/2.2.2) keretében „A bio-etanol és a bio-metán konverziója” című kutatási témában vizsgálták az etanol katalitikus átalakítását hordozós kobalt és különböző foszforvolframát katalizátorokon, amiről egy közös dolgozatban számoltak be.

A „Lonsdaleite szintézis nagy nyomáson és magas hőmérsékleten” című kutatási téma keretében az intézet kutatói az együttműködő japán partnernél (Geodynamics Research Center, Ehime University) voltak tanulmányúton (MTA-JSPS bilaterális rövid idejű mobilitás). Szintetizálták a pályázatban előállítani tervezett lonsdaleite fázist. A kutatás hozzájárult a lonsdaleite szerepének jobb megértéséhez a gyémánt képződés során., továbbá a lonsdaleite kedvező fizikai és mechanikai tulajdonságai új, fejlett technológiai alkalmazásoknak nyithatnak teret.

A kutatóhelynek szoros kapcsolata van a Szegedi Tudományegyetemmel, részt vesz a Természettudományi Kar Doktori Iskolájának munkájában, vizsgáztatásban és PhD-témavezetésben.

IV. A 2011-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

2011-ben az intézet egy kutatói ösztöndíjat (Researcher Excellence Grant – Joint Research Project, European Association of National Metrology Institutes) nyert el a „Metrological characterisation of micro-vesicles from body fluids as non-invasive diagnostic biomarkers”, és „Chemical and optical characterisation of nanomaterials in biological systems” témákban. A pályázat 2012-ben indul. A pályázati támogatás összege 168 000 EUR; 2011-ben 0 EUR. 2011-ben a „Biomimetikus nanoszenzorok alkalmazása proteolitikus folyamatok követésére” című OTKA pályázattal 11,28 M Ft támogatást nyert el. A pályázat 2012-ben kezdődik. A pályázati támogatás 2011-ben 0 Ft.

A „Katalitikus hidrogéntermelés megújuló energiaforrásokból” című sikeres OTKA pályázattal az intézet 23,55 M Ft támogatást szerzett. 2011-ben 6 M Ft volt a támogatás mértéke. A pályázat keretében 2011-ben végzett munka fontosabb eredménye: a redukív előkezelés hatására oxigén vakanciák (F-centrum hibahelyek) keletkeznek a hordozón, amelyek jelentősen befolyásolják a katalitikus aktivitást. Az F-centrumok hatására bizonyos felületi reakciók magasabb hőmérsékleten már a hordozón is lejátszódnak, amelyek eredményeképp felületi acetátokat és acetil-csoportokat sikerült DRIFT spektroszkópiával azonosítani. Az in situ DRIFT eredmények arra utalnak, hogy a felületi acetátok magasabb hőmérsékleteken (400°C felett) demetanizálódás révén karbonátokká alakulnak. Ugyanakkor az is valószínűsíthető, hogy a makroszkópiusan megfigyelhető metánképződés nem ennek a felületi reakciónak tulajdonítható.

Az intézet elnyert egy NKFP támogatású konzorciális pályázatot az “Új biológiai szennyvíztisztító berendezések és technológia kutatása és fejlesztése” címmel. A pályázat támogatási mértéke összesen 67 M Ft, 2011-ben 6 M Ft. A projekt egy 200-20 000 lakos-egyenérték (l.e.) kapacitású, nagyhatásfokú, gazdaságos és környezetbarát kommunális szennyvíz-tisztító (SZVT) technológia kifejlesztésére irányul. A projekt célja a jelenlegi eljárásokban használt részegységeknél (bio-reaktor, levegőztető, iszapleválasztó, vízszagtalanító/fertőtlenítő) hatásosabb és gazdaságosabb berendezések kifejlesztése. Elkészítették a demonstrációs kísérleti berendezés terveit, beszerezték a referencia berendezésként üzemelő forgó-merülő tárcsás technológia egységeit. Megkezdődött Rezipen a demonstrációs és kísérleti szennyvíztisztító építése. A projekt eredményeit szóbeli előadás formájában bemutatták a Magyar Kémikusok Egyesülete szervezésében a X. Környezetvédelmi Analitikai és Technológiai konferencián „Korszerű kommunális szennyvíztisztító technológia kifejlesztése és alkalmazása a Balaton térségében” című előadás prezentálásával.

Az „Innovatív Bio-energetikai és környezetvédelmi eljárás és prototípus fejlesztés” címen (GOP) az intézet, mint a Terra Humána Kft. kutató-fejlesztő partnere összesen 27,3 M Ft támogatásban részesült. A projektben végzett kutatások: nemesfémment 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 gyártás technológiájának kidolgozása, katalizátor készítés a reformáló reaktor prototípusához.

A „Katalitikus és gázszenzorikai 2D modellrendszerek” című OTKA pályázati témában dekorált Rh nanoszerkezeteket növesztettek TiO_2 (110) felületen. A szerkezetet STM technikával jellemezték. A témában megjelent egy dolgozat.

A „Jól definiált, alacsony szimmetriájú felületi szerkezetek előállítása és spektroszkópiai jellemzése” című OTKA pályázati kutatás során megállapították, hogy TiO_2 (110) felületen a Rh-Mo kölcsönhatásakor ötvözet szerkezet alakul ki. Az eredményeket két publikációban ismertették.

A „Szénhidrogének és alkoholok reakciójának katalitikus és felületkémiai vizsgálata” című OTKA pályázat során az etanol és dimetiléter adszorpcióját és bomlását vizsgálták hordozóra felvitt arany katalizátoron. Jelentős eredménynek számít, hogy CO-mentes hidrogént állítottak elő a hangyasav bontásával szén (Norit) hordozóra felvitt platina fémeken. A nitrogén-módosított TiO_2 felületen az etanol fotóindukált bomlása jelentősen megnőtt, hidrogén és acetaldehid volt a fő termék. A pályázati eredményként négy publikáció jelent meg a témában.

Az intézet OTKA pályázatot nyert el a „Hidrogén előállítása biomasszából származó anyagok felhasználásával” című kutatási témával. A pályázat keretében vizsgálták a $\text{CO}_2 + \text{CH}_4$ gázelegy, a biogáz két fő komponensének az átalakítását különböző adalékolt Rh/ Al_2O_3 katalizátorokon; megállapították, hogy a V_2O_5 jelentősen növeli a katalizátor aktivitását. Tanulmányozták az etanol konverzióját TiO_2 -ra és titanátokra felvitt Au-Rh katalizátorokon. Az együttműködés során három publikáció jelent meg.

A 2011-ben elnyert OTKA-NKT-Marie Curie pályázat „Mesterséges és természetes nanogyémántok szerkezete”(HUMAN-MB08A) címmel 2012.01.01-től kezdődik.

V. A 2011-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Goerigk G, Varga Z
Comprehensive upgrade of the high-resolution small-angle neutron scattering instrument KWS-3 at FRM II
JOURNAL OF APPLIED CRYSTALLOGRAPHY **44**: 337-342. (2011)
2. Wacha A, Varga Z, Vainio U, Hoell A, Bóta A
Small-angle X-ray scattering experiments and computer simulations to characterise anisotropy of activated carbons prepared from wood
CARBON **49**:(12) 3958-3971. (2011)
3. Vargha V, Chetty A, Sulyok Z, Mihály J, Keresztes Z, Tóth A, Sajó I et al. (3)
Functionalisation of polypropylene non-woven fabrics (NWFs)
JOURNAL OF THERMAL ANALYSIS AND CALORIMETRY
DOI 10.1007/s10973-011-1940-8
4. Szabó T, Molnár-Nagy L, Bognár J, Nyikos L, Telegdi J
Self-healing microcapsules and slow-release microspheres in paints
PROGRESS IN ORGANIC COATINGS **72**:(1-2) 52-57. (2011)
5. Szijjártó GP, Tompos A, Margitfalvi JL
High-throughput and combinatorial development of multicomponent catalysts for ethanol steam reforming
APPLIED CATALYSIS A-GENERAL **391**:(1-2) 417-426. (2011)
6. Gergely A, Pászti Z, Mihály J, Szabó L, Kálmán E
Transformation of multi-walled carbon nanotubes to amorphous nano-spheres, micron-size rods and flakes by oxidative sulfation reaction
DIAMOND AND RELATED MATERIALS **20**:(5-6) 826-832. (2011)
7. Lónyi F, Solt HE, Valyon J, Boix A, Gutierrez LB
The activation of NO and CH₄ for NO-SCR reaction over In- and Co-containing H-ZSM-5 catalysts
JOURNAL OF MOLECULAR CATALYSIS A-CHEMICAL **345**:(1-2) 75-80. (2011)
8. Kollár M, Kolev I, Mihályi MR, Mavrodinova V
Transformation of alkylaromatics over delaminated MCM-22 zeolites and their composites with mesoporous MCM-41 silicate
APPLIED CATALYSIS A-GENERAL **393**:(1-2) 59-70. (2011)
9. Majzik Z, Balázs N, Berkó A
Ordered SMSI decoration layer on Rh nanoparticles grown on TiO₂(110) surface
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C **115**:(19) 9535-9544. (2011)
10. Sarusi I, Fodor K, Baán K, Oszkó A, Pótári G, Erdőhelyi A
CO₂ reforming of CH₄ on doped Rh/Al₂O₃ catalysts
CATALYSIS TODAY **171**:(1) 132-139. (2011)

VI. A Nanokémiai és Katalízis Intézet főbb mutatói 2011-ben

1. Létszámadatok

Átlagléttség szám*:	<input type="text" value="0"/>	Ebből kutató*:	<input type="text" value="0"/>
PHD v. CSc*:	<input type="text" value="0"/>	MTA doktora v. DSc*:	<input type="text" value="0"/>
MTA levelező tag*:	<input type="text" value="0"/>	MTA rendes tag*:	<input type="text" value="0"/>
Akadémikusok száma (a fenti kettő összesen):	<input type="text" value="0"/>		
Az intézethez kötődő akadémikusok száma:	<input type="text" value="0"/>		
35 év alatti, intézeti állományban levő kutatók száma*:	<input type="text" value="0"/>	kutatónők száma*:	<input type="text" value="0"/>

2. Publikációk¹

Az év folyamán megjelent tudományos², oktatási és tudományos ismeretterjesztő³ publikációk száma összesen:

51
47

2.1 Az év folyamán megjelent tudományos publikációk száma:

2.1.1 Szakfolyóiratban megjelent tanulmányok, cikkek száma⁴

hazai tudományos folyóiratban magyarul:	<input type="text" value="1"/>	~ idegen nyelven:	<input type="text" value="0"/>
külföldi folyóiratban magyarul:	<input type="text" value="0"/>	~ idegen nyelven:	<input type="text" value="46"/>
mindezekből impakt faktoros publikáció magyarul:	<input type="text" value="0"/>	~ idegen nyelven:	<input type="text" value="41"/>
recenzió, kritika magyarul:	<input type="text" value="0"/>	~ idegen nyelven:	<input type="text" value="0"/>

2.1.2 Könyv⁵, könyvfejezet⁶

könyv/monográfia ⁷ magyarul:	<input type="text" value="0"/>	~ idegen nyelven:	<input type="text" value="0"/>
tanulmánykötet magyarul:	<input type="text" value="0"/>	~ idegen nyelven:	<input type="text" value="0"/>
könyvrész és könyvfejezet magyarul:	<input type="text" value="0"/>	~ idegen nyelven:	<input type="text" value="1"/>

2.1.3 Konferenciacikk- és kiadvány

magyarul:	<input type="text" value="2"/>	~ idegen nyelven:	<input type="text" value="0"/>
-----------	--------------------------------	-------------------	--------------------------------

2.1.4 Egyéb publikáció⁸

tanulmánykötet szerkesztése, szöveggondozás magyarul:	<input type="text" value="0"/>	~ idegen nyelven:	<input type="text" value="0"/>
sorozatszerkesztés magyarul:	<input type="text" value="0"/>	~ idegen nyelven:	<input type="text" value="0"/>
atlasz ⁹ magyarul:	<input type="text" value="0"/>	~ idegen nyelven:	<input type="text" value="0"/>
tematikus térkép magyarul:	<input type="text" value="0"/>	~ idegen nyelven:	<input type="text" value="0"/>
kritikai kiadás: 5 szerzői ¹⁰ ívig:	<input type="text" value="0"/>		
kritikai kiadás: 5 szerzői ív felett:	<input type="text" value="0"/>		
szótári szócikkállomány magyarul:	<input type="text" value="0"/>	~ idegen nyelven:	<input type="text" value="0"/>
lexikoncikk ¹¹ magyarul:	<input type="text" value="0"/>	~ idegen nyelven:	<input type="text" value="0"/>
szakfordítás: 5 ívig:	<input type="text" value="0"/>		
szakfordítás: 5 ív felett:	<input type="text" value="0"/>		

bibliográfia magyarul: ~ idegen nyelven:
 adatbázis¹² magyarul: ~ idegen nyelven:
 atalógus¹³ magyarul: ~ idegen nyelven:

2.2 Oktatási anyag

felsőoktatási tankönyv vagy jegyzet¹⁴ magyarul: ~ idegen nyelven:

2.3 Tudományos ismeretterjesztő írás cikk magyarul: ~ idegen nyelven:
 könyv, könyvrészlet magyarul: ~ idegen nyelven:

3. Hatástényező és idézettségi mutatók

összesített impakt faktor:¹⁵
 összes független hivatkozás száma:
 összes hivatkozás száma:¹⁶
 kapott recenzió, kritika:

4. Tudományos fokozat, illetve cím megszerzése 2011-ben

PhD: MTA doktora cím:

5. Szellemi alkotások védelme¹⁷

nemzeti úton megadott oltalmak száma:¹⁸ megadott külföldi oltalmak száma¹⁹:
 értékesített szabadalmak száma:
 szerzői jogvédelem alá tartozó alkotások száma²⁰:

**6. Részvétel a tudományos közéletben
Tudományos rendezvények**

nemzetközi rendezvényen tartott előadások száma: ~posztterek száma²¹:
 hazai rendezvényen tartott előadások száma: ~posztterek száma:
 hazai rendezvények szervezése: nemzetközi rendezvények szervezése:

Szakértői tevékenység

tanácsadói tevékenységek száma²²:
 opponensi vélemény összesen ebből külföldre:
 egyéb szakértői vélemény: ebből külföldre:
 egyéni szaklektori vélemény összesen: ebből külföldre:

Részvétel tudományos testületben

szerkesztőségi tag nemzetközi szakfolyóiratban:
 szerkesztődégi tag hazai fszakolyóiratban:
 nemzetközi tud. bizottság tagja: nemzetközi tud. bizottság vezetője:
 hazai tud. bizottság tagja: hazai tud. bizottság vezetője:

7. Az intézetet és a tudományt népszerűsítő tevékenység

nyilvános esemény megrendezése²³:

kulturális rendezvények²⁴:

ismeretterjesztő előadások száma:

tudományos ismeretterjesztő műsorok szerkesztése TV-ben, rádióban:

8. A hazai felsőoktatásban végzett tevékenység

rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma²⁵:

ebből doktori iskolákban oktatók száma: doktori iskolát vezetőik száma:

doktori iskolában tőrzstagok száma:

elméleti kurzusok száma²⁶: gyakorlati kurzusok száma:

témavezetések száma (TDK-dolgozat):

témavezetések száma (BA, illetve BSc diplomamunka):

témavezetések száma (MSc, illetve MA diplomamunka):

témavezetések száma (PHD-disszertáció):

9. Egyéb adatok

9.1 Kutatói mobilitás

A kutatóhely vendégtevékenységet folytató munkatársainak száma

hazai egyetemen vagy kutatóintézetben: vállalatnál:

külföldi egyetemen vagy kutatóintézetben: vállalatnál:

Vendégkutatók száma a kutatóhelyen

hazai kutatók száma félévnél rövidebb ideig: félévnél hosszabb ideig:

külföldi kutatók száma félévnél rövidebb ideig: félévnél hosszabb ideig:

A kutatóhelyen más hazai kutatók által kutatómunkával eltöltött idő²⁷:

A kutatóhelyen külföldi kutatók által kutatómunkával eltöltött idő:

9.2 Vállalati kapcsolatok az aktuális évben

A kutatóhellyel szerződéses kapcsolatban álló közép- és kisvállaltok száma:

A kutatóhellyel szerződéses kapcsolatban álló nagyvállalati partnerek száma:

10. Pénzügyi adatok

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege* : M Ft

Fiatal kutatói álláshelyek száma* :

Az időszak folyamán a teljes saját bevétel(pályázatok, szabadalmak, szerződések, stb.) összege

(az akadémiai költségvetési támogatáson kívül)* : M Ft

saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel* :

Hazai pályázatok:

Az év folyamán művelt OTKA-témák száma: A tárgyévre vonatkozó bevétel* : M Ft

Az év folyamán művelt NKTH-pályázat témáinak száma:

NKFP: A tárgyévre vonatkozó bevétel* : M Ft

Egyéb: A tárgyévre vonatkozó bevétel* : M Ft

Az év folyamán művelt ÚMFT-témák száma: A tárgyévre vonatkozó bevétel* : M Ft

Az év folyamán művelt egyéb hazai témák száma: A tárgyévre vonatkozó bevétel* : MFt

Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma:

EU-forrásból: A tárgyévre vonatkozó bevétel* : M Ft

Egyéb: A tárgyévre vonatkozó bevétel* : M Ft

Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:

A tárgyévre vonatkozó bevétel* : M Ft

A *-gal jelölt adatokat kérjük, ne töltsék ki. Ezekbe a rovatokba az éves pénzügyi beszámoló alapján a Pénzügyi Főosztály adatai kerülnek.

Kémiai Kutatóközpont
SZERKEZETI KÉMIAI INTÉZET

1025 Budapest, Pusztaszeri út 59-67., 1525 Budapest, Pf. 17.
Telefon: 438–1120, Fax: 438–1143
e-mail: kubinyi.miklós@tk.mta.hu, honlap: <http://www.chemres.hu>

I. A kutatóhely fő feladatai 2011-ben

Az intézet fő kutatási feladata az anyagtudományi és a biológiai kutatások területeiről származó molekulák és szupramolekuláris rendszerek szerkezetére vonatkozó kutatások folytatása volt. Klasszikus molekuláris dinamikai potenciálok fejlesztését végezték el az önszerveződő rendszerek tanulmányozására. A tömegspektrometria főbb kutatási területei az alapkutatásokat, a szerves- és biokémiai alkalmazásokat, valamint az orvosbiológiai kutatásokat ölelik fel. Az intézet kiemelt szerepet vállalt a hazai magasszintű szerves kémiai és biokémiai kutatások analitikai hátterének biztosításában. Partnereikkel való együttműködéseikből közös publikációk születtek. Az intézet széleskörű együttműködést folytat külföldi kutatóhelyekkel, s ennek eredményeként 2011-ben számos közös közlemény jelent meg rangos nemzetközi folyóiratokban. A kutatóhely munkatársai előadásokat tartanak az egyetemeken a szerkezeti kémiai vonatkozású kurzusok keretében, s laboratóriumi gyakorlatokat tartanak az intézet műszerein, valamint tagjai az egyetemi doktori iskoláknak és tanácsoknak. Az intézet és a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem közös oktató-kutató Lézerspektroszkópiai Laboratórium működtet.

Az NMR laboratórium – számos kutatócsoporttal kooperálva – több területen kiemelkedő eredményt ért el (katalizátorok működése, peptidok, fehérjék szerkezete, polimerek szerkezete) a magmágneses spektroszkópiai módszerek széles körének alkalmazásával (oldat- és szilárdfázisú NMR, fehérjevizsgálathoz szükséges technikák).

2011-ben is az intézet egyik legeredményesebb kutatási területe az új, szilárd fázisú szupramolekuláris rendszerek, többek között aranykomplexek tervezése, építése (crystal engineering), azok alkalmazási lehetőségeinek (gázok megkötése, hangolható fényemisszió) kutatása.

II. A 2011-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Szerkezeti biológiai és kémiai kutatások

Módszert dolgoztak ki igen kis (nanogramm) mennyiségű fehérjék triptikus emésztésére, s ezt sikerrel alkalmazták mikrovezikulumok proteomikai vizsgálatában. A módszer jobbnak bizonyult, mint a hagyományos, nagy térfogatban végzett emésztési eljárás. A módszer kifejezetten előnyös orvosi kutatásokban is (pl. szívbetegekből nyert AGP vizsgálatára), mivel a biológiai eredetű minták általában igen kis mennyiségben állnak rendelkezésre.

Algoritmust és számítógépes programot fejlesztettek ki az izolált glikoproteineken található oligoszaccharid struktúrák glikozilációs mintázatának, azaz a fehérje egyes glikozilációs helyein a különböző cukorszerkezetek minőségi és mennyiségi eloszlásának meghatározására. A program segítségével sikeresen meghatározták standard és klinikai minták glikozilációs mintázatát.

A klinikai vizsgálatok során egészséges és érelmeszesedéses, illetve aneurizmás betegekből nyert α -1 savas glikoprotein (AGP) glikozilációs mintázatát határozták meg és hasonlították össze. Megállapították, hogy a három csoport mintázata jelentős mértékben eltér egymástól. A módszer prediktív ereje mintegy 90 % .

Sikerült kimutatni, hogy a glikoproteinek cukorszerkezete befolyásolja, modulálja a protein-protein kölcsönhatásokat. Megállapították, hogy a cukorláncon bekövetkező látszólag kis változás a protein-protein kapcsolat specificitását változtatja meg.

Relaxációs NMR-spektroszkópai vizsgálatokkal feltérképezték a humán epesav-kötő fehérje főláncát jellemző dinamikai folyamatokat és ezek ligandumkötődés hatására történő változását. A szabad fehérjében azonosítottak egy lassú, ms időskálán zajló konformációs cserefolyamatot, amely lehetővé teszi a ligandumok kötőüregbe jutását. Az NMR-spektroszkópai és biofizikai vizsgálatok alapján modellt állítottak fel a ligandumkötődés mechanizmusára vonatkozóan, hozzájárulva ezzel az intracelluláris epesav-transzport molekuláris szinten történő jobb megértéséhez.

A peptidek szekvenciája és fémkomplexeik szerkezeti és termodinamikai stabilitása közötti összefüggés ismerete elengedhetetlen, a peptidek biológiai funkciójának, valamint a fémek jelenlétében bekövetkezett szerkezeti és konformációs változásainak megértésében. A hisztidin oldallánc mellett a szabad N-terminális amino-csoport is szerepet játszik számos protein, közöttük a human serum albumin (HSA) vagy az amiloid precursor protein fémgekötésében. Elvégezték a Gly-Gly-Gly-Hisztamin (GGGHa) és az N-terminális végén védett Boc-Gly-Gly-Gly-Hisztamin (BGGGHa) összehasonlító egyensúlyi és szerkezetvizsgálatát nikkell(II)- és réz(II)ionokkal ESR-spektroszkópia módszer alkalmazásával. Megállapították, hogy míg a BGGGHa esetén az egyfogú imidazol koordinációt követően valósul meg az amid-csoportok lépcsőzetes deprotonálódása, addig a GGGHa esetén a legtöbb komplexben makrokelát-koordináció valósul meg, az imidazol és az amino csoportok egyidejű kötődésével, nagyobb stabilitást adva ezeknek a komplexeknek.

A kétértékű, különösen a réz, ionok jelenléte lényeges változást okoz a membránok kettős lipidrétegében, amely változások összefüggésbe hozhatók egyes idegrendszeri zavarok kialakulásával. A Cu^{2+} ionok ESR-spektruma az ionok környezetével való kölcsönhatását tartalmazza és megfelelő interpretáció esetén annak lokális elhelyezkedésére vonatkozóan lényeges információk nyerhetők. Megállapították, hogy egyértelműen azonosítható a spektrumban egy izotrop (gyors forgású) és egy anizotrop (erősen hőmérséklettől függő forgási sebességű gátolt forgású) Cu-komplex jele. Egy modellszámítás alapján meghatározták az izotrop és anizotrop komponensek arányát. Az Eyring-Polanyi és a Van t'Hoff egyenletek felhasználásával meghatározták a réz ion kötődésére jellemző termodinamikai jellemzőket (adszorpciós és deszorpciós entalpia és az entrópia változásának értékei).

Különböző Mn-koncentrációval bíró $\text{MnxZn}_{1-x}\text{Fe}_2\text{O}_4$ mágneses nanoporokon elvégzett mérések alapján bemutatták, hogy az elektron paramágneses rezonancia (EPR), illetve a ferromágneses rezonancia (FMR) módszere milyen módon alkalmazható a nanorészecskéket mágneses szempontból jellemző fizikai mennyiségekről információ kinyerésére.

Nagyszámú, bifunkcionális tiokarbamid részt és tercier amin bázist tartalmazó organokatalizátor asszociátumot állítottak elő. Különösen új ezek szilárd fázisban való átalakulásának és származékaik kristályainak megszerkesztése. Nehezen kristályosítható sokfémű sórendszerek (pl. új ferrocénium-reineckátok) kristályait növesztették és határozták meg. Kalixarének és zárványkomplexeik szerkezeti tulajdonságait vizsgálták. Többmolekulás

rendszerekben szupramolekuláris effektusok által kiváltott morfotrópia első példáit mutatták be. Kémiai eszközökkel a kristályszerkezetet alakították át és új, megkívánt tulajdonságú anyagot állítottak elő.

Fotokrómi spirópiránok fémionokkal történő komplexképzési kinetikáját és egyensúlyi állandóját határozták meg. Kimutatták, hogy a fotokrómi sajátságok alapvetően megváltoznak kukurbit[8]uril makrociklusba-ékelődés hatására.

Részt vettek a vizes oldatokban jelen lévő hidroxidion új molekuláris dinamikai potenciáljainak fejlesztésében. A kölcsönhatási potenciálok segítségével felületi és az oldatban lévő hidroxidionok szerkezetét is tanulmányozták. Vizsgálták a $ZnCl_2$ vizes oldatnak elsősorban az extrém tömény oldatokban kialakuló oldatbeli szerkezetét, valamint a víz szerkezetét diffrakciós módszerek segítségével porózus anyagokban (MCM-41).

Új kvantumkémiai módszer fejlesztettek ki síkhullám bázison az atomon lokalizált bázisfüggvények megtalálására.

Kvantumkémiai számítások segítségével kimutatták, hogy egy újonnan előállított, nitroalkánok és aldehidek sztereoszektív kapcsolására sikeresen alkalmazható organokatalizátor többszörös H-hidak kialakításával fejti ki katalitikus hatását.

Az effektív atompályák „fuzzy atom” formalizmus keretében való előállítására korábban javasolt módszerüket alkalmazták az SCF-egyenletek numerikus megoldásával kapott molekulapályák feldolgozására. Megállapították, hogy a számottevően betöltött atompályák száma mindig annyinak adódik, ahány pálya szerepel az adott atom klasszikus minimális bázisában. A javasolt módszerrel finomabb effektusok (a polarizációs függvények jelentősége, hipervalens atomok sajátosságai, stb.) is jól vizsgálhatók.

Multikonfigurációs eljárással meghatározták a CH_2BrI molekula intenzív lézertérrel történő disszociatív fotoionizációja során keletkező termékek kinetikus-energia eloszlását és azonosították a különböző energiájú termékeket eredményező mechanizmusokat. Az elméleti számításokkal sikerült értelmezni a kinetikus energiáknak az ionizáló impulzus fázis-modulációjától való függését.

Egyszerű tioészter- $(H_2O)_n$ modelleken végzett kvantumkémiai számítások segítségével megmutatták, hogy organokatalitikus enolizációs folyamatok kimenetelét a katalitikus hatást kiváltó hidrogén-híd donor csoportok térbeli pozíciója jelentősen befolyásolhatja.

Az eredmények rámutattak arra, hogy a katalizátorfejlesztés során a H-hidakon túlmenően más jellegű stabilizáló katalizátor-szubsztrátum kölcsönhatásokat is figyelembe kell venni.

Kvantumkémiai számítások segítségével felderítették a Pechmann-reakció lehetséges mechanizmusait. A számított szabadenergiaprofilok alapján megállapították, hogy a három lehetséges oxo utat nem lehet elkülöníteni, viszont a két lehetséges enolos út nagy biztonsággal kizárható. Az eredmények alapján számos kísérleti megfigyelés értelmezhetővé vált.

Az intézetben szintetizált új 1-cianoizobenzofuránok esetében számításokkal igazolták, hogy a cianocsoport nem változtatja meg az alapvegyület kinoidális karakterét.

Multikonfigurációs kvantumkémiai módszerrel meghatározták a $[Fe(terpy)_2]^{2+}$ komplex spin-átmeneteihez tartozó főbb potenciális-energia felületeket. Az eredmények segíthetnek megérteni a $[Fe(terpy)_2]^{2+}$ komplex magas spinű állapotának relatív stabilitását.

Kétdimenziós kísérleti NMR-vizsgálatokhoz kapcsolódó kvantumkémiai számításokkal meghatározták a $(bpy)_2(\mu-dpp)Ru(CN)_4$ komplex két izomerjének szerkezetét és értelmezték azok spektroszkópiái tulajdonságait.

Ab initio MD-számítások segítségével azonosították a Wacker-reakció katalitikusan aktív Pd(II) specieszének szerkezetét és a hozzávezető reakciólépéseket. A számítások rámutattak a ligandumok eltérő transz-hatásának fontosságára. A katalitikusan aktív komplexben az olefin

a víz ligandummal szemben található, és ez döntő hatással van a további lépések sztereokémiájára. A szimulációk segítségével a lehetséges ligandumcserék ($\text{Cl}^- - \text{H}_2\text{O}$, $\text{Cl}^- - \text{C}_2\text{H}_4$, $\text{H}_2\text{O} - \text{C}_2\text{H}_4$) mechanizmusát is feltárták.

Ab initio MD-szimulációk segítségével leírták a CO_2 lúgos közegben lejátszódó oldódását.

Ab initio kvantumkémiai és elméleti reakciódinamikai módszerekkel megállapították, hogy elektronbecsapódás hatására a metán több, magasan gerjesztett elektronállapotba kerül, melyek általában kötött állapotok és a disszociáció nemadiabatikus átmeneteken keresztül, alacsonyabb elektronállapotokból játszódik le.

Klasszikus- és kvantummechanikai reakciódinamikai módszerekkel kiszámították, hogy az égések kémiájában alapvető $\text{H} + \text{O}_2$ reakció sebességi együtthatója a lángok hőmérsékletén két nagyságrenddel megnő, ha az O_2 molekula elektrongerjesztett állapotba kerül. E folyamat lehetővé teszi egyes égési folyamatok gyorsítását

Szupramolekuláris kémia, önszerveződő rendszerek kutatása

Napjainkban a cianid-hidas Au-CN-M kétfémes szupramolekulák széleskörű kutatási érdeklődésre tartanak számot, mivel szerkezeti változatosságuk mellett gyakran különleges ioncsere, mágneses, lumineszcens, vapokróm, kettőstörő és negatív hőtágulást mutató tulajdonságokkal rendelkeznek. A kidolgozott szilárdfázisú oldószermentes mechanokémiai eljárás lehetővé tette $[\text{Au}(\text{CN})_2]$ -alapú, többfémes koordinációs polimerek gyors, egyszerű és hatékony előállítását. Az így előállított egyik komplex illékony szerves vegyületek jelenlétében erőteljes színváltozást mutatott. A vapokróm vegyületek szenzorok fejlesztésében nyerhetnek alkalmazást.

Elvégezték az aranykomplexek szerkezetének meghatározását a kialakuló szupramolekuláris formák geometriai jellemzésére, valamint jellemezték a komplexek szolvátburok szekezet.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

Az IUCr Newsletter lapban, a magyar krisztallográfiai műhelyeket bemutató írást készítettek. Az European Crystallographic Association Végrehajtó Bizottság téli ülésére negyedik alkalommal került sor Budapesten, s vendégprofesszor látogatott az intézetbe.

Tudományos ismeretterjesztő cikket jelentettek meg az Élet és Tudomány folyóiratban (LXVI. évf. 7. szám „Munkára fogott baktériumok – Fehérjegyár a laborban” cím). Számos cikket közöltek a Kémiai Panorámában („Molekuláris ízvarázs”; „Folyadék-kristályos kijelzők” és „Módosított élelmiszerek” című publikációk).

A Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem (BME) Diákköri Konferenciáján hallgatóik két első és egy harmadik díjat nyertek el.

Az „AKI kíváncsi kémikus” című, tudománynépszerűsítő nyári tábor keretében két középiskolás diák bekapcsolódhatott a fotokróm anyagokon végzett kutatómunkába.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2011-ben

Az intézet kutatói az „Antimikrobiális peptidok hatásmechanizmusának vizsgálata” című témában közös kutatási tevékenységet folytattak az Eötvös Loránd Tudományegyetem (ELTE) Szerves Kémia Tanszék, az ELTE-MTA Peptidkémiai Kutatócsoport és az University of Karlsruhe (Germany) kutatóhelyekkel. Az együttműködés keretében meghatározták – az oldat- és szilárd fázisú NMR-spektroszkópiai vizsgálatok kombinációjával – a maximin-4 nevű antimikrobiális peptid konformációját különböző összetételű membrán mimetikumokban. Vizsgálataikkal új ismereteket tártak fel az ígéretesnek tekinthető új antibiotikum-jelölt működési mechanizmusáról, mely a hagyományos antibiotikumokkal

szembeni fokozódó rezisztencia megoldásában nyújthat hasznos segítséget. Az eredményekről két publikáció jelent meg.

A Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem (BME) Vegyészmérnöki és Biomérnöki Karának Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszékével együttműködve a „Módosított természetes alapú polimerek folyadék és szilárd fázisú NMR analízise” című témában kaprolaktonnal ojtott cellulóz- acetát mintákat vizsgáltak. Meghatározták az ojtási hatásfokot és az ojtott oldalláncok hosszúságát, valamint vizsgálták a lignin és ligningyanták szerkezetét.

A „Hidrogének kölcsönhatása biológiai szempontból jelentős vegyületekkel” című témában ugyancsak a Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszékével együttműködve (OTKA pályázat) vizsgálták a kétdimenziós szilárd fázisú ^1H módszerek felhasználásával polimer mátrix és kismolekulák kölcsönhatását. A megkezdett munkát 2012-ben egy újabb OTKA (K101861) pályázat keretében is végezni fogják. A tárgyévben eredményeikről egy poszter formájában számoltak be.

A „Makromolekuláris hatóanyag-hordozó mátrixok és szilárd fázisú készítmények vizsgálata szilárd fázisú NMR-spektroszkópiával” című témában a polimer alapú mátrixban szerves és szervetlen hatóanyagok szerkezetét kutatták. Együttműködő partner a Szegedi Tudományegyetem Gyógyszertechnológiai Intézete volt. Az egyetemmel közös vizsgálatokat végeztek az átmenetifém komplexek területén, eredményeikről pedig három közlemény jelent meg.

Tudományos együttműködés keretében az ELTE Kémiai Intézetének Fizikai Kémiai Tanszékével a „Poli-elektrolitok és felületaktív anyagok kölcsönhatásának vizsgálata oldat fázisú NMR-spektroszkópiával” című témában kutatás-fejlesztési tevékenységet végeztek.

Az intézet a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetemmel közös laboratóriumot üzemeltet a „Molekuláris optikai szenzorok és kapcsolók spektroszkópiai vizsgálata” című projekt keretében. Fotokróm spiropiránok fémkomplexeinek egyensúlyi és kinetikai paramétereit határozták meg. Tanulmányozták az akridin tartalmú fluoreszcenciás gazdamolekulák komplexképzését fémionokkal, illetve királis vendégmolekulákkal. A téma keretében három közös publikáció jelent meg.

A Pannon Egyetemmel együttműködve „Tervezett fotofizikai tulajdonságokkal bíró ruténium-komplexek előállítása és jellemzése” című pályázatban megmérték az újonnan szintetizált ruténium-bipiridil komplexek spektrális és fotofizikai tulajdonságainak oldószer- és szubsztituens-függését és kvantumkémiai számításokkal értelmezték a megfigyeléseket. Az eredményeket egy közös publikációban jelentették meg.

A „Kapcsolható átmenetifém-komplexek vizsgálata” című témában a KFKI Részecske- és Magfizikai Kutatóintézet (RMKI) közösen a multikonfigurációs módszerrel meghatározták a $[\text{Fe}(\text{terpy})_2]^{2+}$ komplex spin-átmeneteihez tartozó főbb potenciális-energia felületeit.

Külföldi egyetemekkel (Université de Provence, Marseille, Franciaország; The Ohio State University, USA; Université Paris Descartes, Franciaország) együttműködve a „Reaktív oxigén specieszek és biológiai fontosságú komplexek ESR-vizsgálata” témában három közös publikációt jelentettek meg.

A „Living polimerizáció ESR vizsgálata” témában a Science & Technology of Polymers at CIQA (Saltillo Area, Mexico) partnerrel TÉT pályázat keretén belül végeztek kutatómunkát.

Az „Alkaloidok fény hatására végbemenő folyamatai biológiai fontosságú rendszerekben” című témában feltárták alkaloidok fotokémiai átalakulásának mechanizmusát és kinetikáját. Meghatározták a fluoreszcenciás sajátságok változásának okát biológiai fontosságú anyagok jelenlétében. Együttműködő partnerével – Max-Planck-Institute for Bioinorganic Chemistry (Mülheim an der Ruhr, Germany)– három közös publikációban számoltak be az eredményekről.

Az „Ionos folyadékok és vízdoldható kalixarének kölcsönhatásának termodinamikája” témában az intézet együttműködést alakított ki a Laboratory of Complex Polymer Systems, CNRS East Paris Institute of Chemistry and Materials Science, (Thiais, France). Feltárták az 1-alkil-3-metil-imidazólium típusú ionos folyadékok és 4-szulfonátokalixarének kölcsönhatását meghatározó tényezőket. Az eredményeket két közös publikációban jelentették meg.

Az intézet terjeszti a Cambridge Szerkezeti Adatbázist (Cambridge Crystallographic Data Centre, UK) – Magyarországon. Nemzeti Társult Központként évente szabályos licencszerződéssel képviseli a Adatbázist és közvetíti a sublease intézményeknek. A hazai jelentős kutatóegyetemek (BME, DE, ELTE, PPK, SOTE, SzTE) a Társútközponton át kapják meg az adatbázist. Megjelent egy közös publikáció témához kapcsolódóan.

Az „Izostrukturalitás és molekuláris izometritás vizsgálatok” című témában németországi kapcsolat révén az Institute for Organic Chemistry, Technical University Bergakademie (Freiberg, Németország) ritkán vizsgált peremen és laterálisan szubsztituált kalixarének konformációs viselkedésének és zárványkomplex képzését vizsgálták és jellemezték. A témában két közös publikáció jelent meg.

Az „Átmeneti fémek komplexeinek szerkezetvizsgálata és fejlődőgáz analízise vékonyfilmek előállítására” című témában az észtországi Department of Materials Science, Tallinn University of Technology intézettel végzett kutatás alapján előállították és jellemezték az indium komplex prekuzort. Eredményeiket egy közleményben prezentálták.

A „Study of H-bond network in condensed phase” című pályázat keretében svédországi Angstroem Laboratory, University of Uppsala kutatóival együttműködve vizsgálták a hidroxidion hidratációját klasszikus kvantumkémiai és ab initio molekuláris dinamikai szimulációval. A hiperkoordinált hidroxidion esetén a valós (H-kötéses) és nem H-kötéses komplexeket egyértelműen szét lehetett választani. Egy közös publikáció jelent meg a kooperáció eredményeként. Továbbá az „Alumínium nitrát – nonahidrát kristályszerkezetének vizsgálata elméleti módszerekkel” című téma keretében közösen vizsgálták a nanohidrát kristályban lévő vizek dipólusmomentumának változását a tiszta gázfázisú vízhez képest. Kimutatták, hogy az alumínium első koordinációs szférájában levő vízmolekulák dipólusmomentuma jelentősen nagyobb (4,1 D), mint a gázfázisban. Új, minimalizációs elvet dolgoztak ki.

Az „Investigation of zinc containing solutions and surfaces” című OTKA pályázat keretében megmérték a ZnCl₂ vizes oldatainak neutron diffrakcióját. Az extrém koncentrációjú oldatokban Zn–O–Zn láncok képződését figyelték meg. A témában négy közös publikáció jelentett meg az intézet Folyadékszerkezet Laboratóriuma.

A „Catalysis in water: A Computational Chemistry Challenge” címmel a Universitat Autònoma de Barcelona intézettel közösen (TÉT pályázat) felderítették a Wacker reakció mechanizmusának első 3 lépését. Megállapították a katalitikusan aktív [PdCl₂(H₂O)(C₂H₄)] komplex térszerkezetét és képződésének mechanizmusát. További szimulációkkal tisztázták a

hidroxi-palladáció sztereokémiáját és szabadenergia-viszonyait, azaz kizárták a belső mechanizmust és magyarázatot adtak a külső-mechanizmusra. Rámutattak a ligandumok transz-hatásainak jelentőségére. Az eredményekről két közös publikációban számoltak be.

A „Enolát/enoil katalízis: Enolizáló organokatalizátorok fejlesztése” című témában alátámasztották a projekt egyik alapvető munkahipotézisét, miszerint az organokatalitikus enolizációs folyamatok kimenetelét a katalitikus hatást kiváltó hidrogén-híd donor csoportok térbeli pozíciója jelentősen befolyásolhatja. Együttműködő partner a finnországi University of Jyväskylä volt. A témában két közös publikáció jelent meg.

A „Halomethán molekulák disszociatív fotoionizációjának vizsgálata időfelbontásos mérésekkel, illetve kvantumkémiái és kvantumdinamikai számításokkal” című pályázat keretében az alábbi intézményekkel dolgozott együtt az intézet: Department of Physics, Stony Brook University, New York, USA; Institute of Theoretical Chemistry, University of Vienna, Bécs, Ausztria; Instituto de Química Física Rocasolano, CSIC, Madrid. Értelmezték a CH_2BrI molekula intenzív lézertérrel történő disszociatív fotoionizációja során keletkező termékek kinetikus-energia eloszlását és a kinetikus energiáknak az ionizáló impulzus fázis-modulációjától való függését, melyről egy közleményben számoltak be.

„A H atom és O_2 molekula reakciójának dinamikai vizsgálata” című pályázat keretében az intézet együttműködő partnere a University of New Mexico, Albuquerque, NM, USA volt. Klasszikus- és kvantummechanikai reakciódinamikai módszerekkel kiszámították, hogy az égések kémiájában alapvető $\text{H} + \text{O}_2$ reakció sebességi együtthatója a lángok hőmérsékletén két nagyságrenddel megnő, ha az O_2 molekula elektrongerjesztett állapotba kerül. E folyamat lehetővé teszi egyes égési folyamatok gyorsítását.

A „Metán elektronbecsapódás hatására lejátszódó disszociációjának elméleti vizsgálata” című témában az intézettel, ab initio kvantumkémiái és elméleti reakciódinamikai módszerekkel megállapították, hogy elektronbecsapódás hatására a metán több, magasan gerjesztett elektronállapotba kerül, melyek általában kötött állapotok és a disszociáció nemadiabatikus átmeneteken keresztül, alacsonyabb elektronállapotokból játszódik le. A kooperáló partner Department of Chemistry, Northwestern University, Evanston, IL, USA volt.

Az „Energiadekompozíciós és kötésrendszámítási módszerek” című kutatásaikat az Department of Chemistry and Institute of Computational Chemistry, University of Girona (Spanyolország) intézménnyel közösen végezték. Jelentős eredményeket értek el az atomi teljes spinek (spin-négyzetek) precíz definíciója terén, különös tekintettel az alternatív definíció kritikus értelmezésére és a spin-négyzetek 3-dimenziós felbontása terén.

IV. A 2011-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Az intézet az akadémiai infrastrukturális pályázat felhíváson a „Foszforeszcencia-egység FLS 920 berendezéshez” címmel. A pályázat keretében beszerezték és installálták a foszforeszcencia-egységet. A támogatás mértéke 6,5 M Ft.

A „Travel grant, Boehringer Ingelheim Fonds” pályázat keretében a „Crystallographic studies with a bacterial enzyme, 3-isopropylmalate dehydrogenase” című témában 1800 EUR támogatást kapott az intézet. Több mint 20 adatkészletet gyűjtöttek a berlini szinkrotronnal, ebből 6 új fehérje-ligandum komplex szerkezetét meghatározták, köztük a működő enzimre legjobban hasonlító komplex szerkezetét.

„A glikozilációs folyamatok feltérképezése és kapcsolata a rákos megbetegedések patofiziológiájával” témában. Az OTKA pályázati támogatás mértéke összesen 85,5 M Ft, amelyből 2011-ben 18 M Ft támogatást kapott az intézet. Mintaelőkészítési módszereket fejlesztettek vérszérumból történő proteomikai, glikoproteomikai vizsgálatokhoz. Kis mennyiségben rendelkezésre álló fehérjék és glikoproteinek emésztésére szolgáló protokollt dolgoztak ki. Elkezdték egy HPLC-alapú módszer kidolgozását, amelynek segítségével a vérplazmából glikoproteinek izolálása oldható meg. Algoritmust és számítógépes programot fejlesztettek az izolált glikoproteineken található oligoszacharid struktúrák glikozilációs mintázatának meghatározására. Vizsgálták glikopeptidek MS/MS fragmentációját, vizsgálták speciális cukorstruktúrák MS és MS/MS kimutathatóságát, és optimalták a kísérleti körülményeket a helyes glikopeptid találatok növelésére és az “álpozitív” találatok csökkentésére. A kidolgozott analitikai módszereiket felhasználták proteinek biológiai mátrixból történő vizsgálatára. A mikrovezikulumok vizsgálatával kapcsolatos eredményeiket publikálták is. Kifejlesztették az “in silico golgi model” első verzióját. Ennek segítségével néhány enzimkinetikai paraméterrel a glikozilációs mintázat sikeresen leírható. A következő lépésben ennek finomhangolása történik. Az eredményeket nemzetközi konferenciákon és tudományos publikációkban mutatták be.

„A sejtek közti kommunikáció újonnan azonosított mikrovezikulum-útjának vizsgálata” című témában sikeres OTKA pályázatot dolgoztak ki. A támogatás összege 24 M , melyből tárgyévben 6 M Ft volt a támogatás mértéke. A membrán vezikulumok kutatásával egyre szélesebb körben foglalkoznak világszerte, hogy megértsék szerepüket a sejtek közötti kommunikációban. A kutatócsoportban egér csecsemőmirigyből izolált különféle membrán vezikulumok fehérje összetételét vizsgálták és mintegy 240 különböző fehérjét azonosítottak. Megállapították, hogy az apoptotikus testek hasonló fehérje összetétellel rendelkeznek, mint a mikrovezikulumok, és az azonosított fehérjék ismerete arra enged következtetni, hogy mindkettő fontos szabályozó szerepet tölt be a csecsemőmirigy működésében.

„A zöldkémia eszköztárának alkalmazása és fejlesztése - szerves foszforkémiai reakciók megvalósítása környezetbarát körülmények között” című sikeres OTKA pályázattal 24 M Ft támogatást kapott az intézet, melyből 2011-ben 4,5 M Ft realizálódott. A pályázat keretében a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetemen a környezetbarát (zöld) kémia eszköztárának alkalmazásával előállított különböző, főleg foszfortartalmú szerves vegyületek és ezek fémkomplexeinek szerkezetvizsgálatát végezte el a kutatócsoport.

V. A 2011-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Kubinyi M, Varga O, Baranyai P, Kállay M, Mizsey R, Tárkányi G, Vidóczy T
Metal complexes of mercyanine form of nitrobenzospiran: structure, optical spectra, stability
JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE 1000:(1-3) 77-84. (2011)
2. MiskolcZY Zs, Megyesi M, Tárkányi G, Mizsei R, Biczók L
Inclusion complex formation of sanguinarine alkaloid with cucurbit[7]uril: Inhibition of nucleophilic attack and photooxidation
ORGANIC AND BIOMOLECULAR CHEMISTRY 9:(4) 1061–1070. (2011)
3. Jobbágy C, Tunyogi T, Pálinkás G, Deák A
A versatile solvent-free mechanochemical route to the synthesis of heterometallic dicyanoaurate-based coordination polymers
INORGANIC CHEMISTRY 50:(15) 7301-7308. (2011)

4. Turiák L, Ozohanics O, Marino F, Drahos L; Vekey K
Digestion protocol for small protein amounts for nano-HPLC-MS(MS) analysis
***JOURNAL OF PROTEOMICS* 74:(7) 942-947. (2011)**
5. Rahaman H, Madarász Á, Pápai I, Pihko PM
Dual hydrogen-bond/enamine catalysis enables a direct enantioselective three-component domino reaction
***ANGEWANDTE CHEMIE INTERNATIONAL EDITION* 50:(27) 6123-6127 (2011)**
6. Tőke O, Bánóczy Z, Király P, Heinzmann R, Bürck J, Ulrich AS, Hudecz F
A kinked antimicrobial peptide from *Bombina maxima*. I. Three-dimensional structure determined by NMR in membrane-mimicking environments
***EUROPEAN BIOPHYSICS JOURNAL* 40:(4) 447-462. (2011)**

VI. A Szerkezeti Kémiai Intézet főbb mutatói 2011-ben

1. Létszámadatok

Átlagléttség szám*:	<input type="text" value="0"/>	Ebből kutató*:	<input type="text" value="0"/>
PHD v. CSc*:	<input type="text" value="0"/>	MTA doktora v. DSc*:	<input type="text" value="0"/>
MTA levelező tag*:	<input type="text" value="0"/>	MTA rendes tag*:	<input type="text" value="0"/>
Akadémikusok száma (a fenti kettő összesen):	<input type="text" value="0"/>		
Az intézethez kötődő akadémikusok száma:	<input type="text" value="1"/>		
35 év alatti, intézeti állományban levő kutatók száma*:	<input type="text" value="0"/>	kutatónők száma*:	<input type="text" value="0"/>

2. Publikációk¹

Az év folyamán megjelent tudományos², oktatási és tudományos ismeretterjesztő³ publikációk száma összesen:

2.1 Az év folyamán megjelent tudományos publikációk száma:

2.1.1 Szakfolyóiratban megjelent tanulmányok, cikkek száma⁴

hazai tudományos folyóiratban magyarul:	<input type="text" value="3"/>	~ idegen nyelven:	<input type="text" value="0"/>
külföldi folyóiratban magyarul:	<input type="text" value="0"/>	~ idegen nyelven:	<input type="text" value="62"/>
mindezekből impakt faktoros publikáció magyarul:	<input type="text" value="0"/>	~ idegen nyelven:	<input type="text" value="62"/>
recenzió, kritika magyarul:	<input type="text" value="0"/>	~ idegen nyelven:	<input type="text" value="0"/>

2.1.2 Könyv⁵, könyvfejezet⁶

könyv/monográfia ⁷ magyarul:	<input type="text" value="0"/>	~ idegen nyelven:	<input type="text" value="0"/>
tanulmánykötet magyarul:	<input type="text" value="0"/>	~ idegen nyelven:	<input type="text" value="0"/>
könyvrész és könyvfejezet magyarul:	<input type="text" value="0"/>	~ idegen nyelven:	<input type="text" value="1"/>

2.1.3 Konferenciacikk- és kiadvány

magyarul:	<input type="text" value="0"/>	~ idegen nyelven:	<input type="text" value="0"/>
-----------	--------------------------------	-------------------	--------------------------------

2.1.4 Egyéb publikáció⁸

tanulmánykötet szerkesztése, szöveggondozás magyarul:	<input type="text" value="0"/>	~ idegen nyelven:	<input type="text" value="0"/>
sorozatszerkesztés magyarul:	<input type="text" value="0"/>	~ idegen nyelven:	<input type="text" value="0"/>
atlasz ⁹ magyarul:	<input type="text" value="0"/>	~ idegen nyelven:	<input type="text" value="0"/>
tematikus térkép magyarul:	<input type="text" value="0"/>	~ idegen nyelven:	<input type="text" value="0"/>
kritikai kiadás: 5 szerzői ¹⁰ ívig:	<input type="text" value="0"/>		
kritikai kiadás: 5 szerzői ív felett:	<input type="text" value="0"/>		
szótári szócikkállomány magyarul:	<input type="text" value="0"/>	~ idegen nyelven:	<input type="text" value="0"/>
lexikoncikk ¹¹ magyarul:	<input type="text" value="0"/>	~ idegen nyelven:	<input type="text" value="0"/>
szakfordítás: 5 ívig:	<input type="text" value="0"/>		
szakfordítás: 5 ív felett:	<input type="text" value="0"/>		

bibliográfia magyarul:	<input type="text" value="0"/>	~ idegen nyelven:	<input type="text" value="0"/>
adatbázis ¹² magyarul:	<input type="text" value="0"/>	~ idegen nyelven:	<input type="text" value="0"/>
atalógus ¹³ magyarul:	<input type="text" value="0"/>	~ idegen nyelven:	<input type="text" value="0"/>

2.2 Oktatási anyag

felsőoktatási tankönyv vagy jegyzet ¹⁴ magyarul:	<input type="text" value="1"/>	~ idegen nyelven:	<input type="text" value="0"/>
---	--------------------------------	-------------------	--------------------------------

2.3 Tudományos ismeretterjesztő írás cikk magyarul:	<input type="text" value="0"/>	~ idegen nyelven:	<input type="text" value="0"/>
könyv, könyvrészlet magyarul:	<input type="text" value="0"/>	~ idegen nyelven:	<input type="text" value="0"/>

3. Hatástényező és idézettségi mutatók

összesített impakt faktor: ¹⁵	<input type="text" value="181.410"/>
összes független hivatkozás száma:	<input type="text" value="1276"/>
összes hivatkozás száma: ¹⁶	<input type="text" value="1536"/>
kapott recenzió, kritika:	<input type="text" value="0"/>

4. Tudományos fokozat, illetve cím megszerzése 2011-ben

PhD:	<input type="text" value="2.000"/>	MTA doktora cím:	<input type="text" value="0.000"/>
------	------------------------------------	------------------	------------------------------------

5. Szellemi alkotások védelme¹⁷

nemzeti úton megadott oltalmak száma: ¹⁸ :	<input type="text" value="0"/>	megadott külföldi oltalmak száma ¹⁹ :	<input type="text" value="0"/>
értékesített szabadalmak száma:	<input type="text" value="0"/>		
szervi jogvédelem alá tartozó alkotások száma ²⁰ :	<input type="text" value="0"/>		

**6. Részvétel a tudományos közéletben
Tudományos rendezvények**

nemzetközi rendezvényen tartott előadások száma:	<input type="text" value="27"/>	~posztterek száma ²¹ :	<input type="text" value="22"/>
hazai rendezvényen tartott előadások száma:	<input type="text" value="38"/>	~posztterek száma:	<input type="text" value="9"/>
hazai rendezvények szervezése:	<input type="text" value="1"/>	nemzetközi rendezvények szervezése:	<input type="text" value="3"/>

Szakértői tevékenység

tanácsadói tevékenységek száma ²² :	<input type="text" value="0"/>		
opponensi vélemény összesen	<input type="text" value="19"/>	ebből külföldre:	<input type="text" value="8"/>
egyéb szakértői vélemény:	<input type="text" value="12"/>	ebből külföldre:	<input type="text" value="8"/>
egyéni szaklektori vélemény összesen:	<input type="text" value="105"/>	ebből külföldre:	<input type="text" value="96"/>

Részvétel tudományos testületben

szerkesztőségi tag nemzetközi szakfolyóiratban:	<input type="text" value="4"/>		
szerkesztőségi tag hazai fszakfolyóiratban:	<input type="text" value="0"/>		
nemzetközi tud. bizottság tagja:	<input type="text" value="5"/>	nemzetközi tud. bizottság vezetője:	<input type="text" value="0"/>
hazai tud. bizottság tagja:	<input type="text" value="9"/>	hazai tud. bizottság vezetője:	<input type="text" value="4"/>

7. Az intézetet és a tudományt népszerűsítő tevékenység

nyilvános esemény megrendezése²³:

kulturális rendezvények²⁴:

ismeretterjesztő előadások száma:

tudományos ismeretterjesztő műsorok szerkesztése TV-ben, rádióban:

8. A hazai felsőoktatásban végzett tevékenység

rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma²⁵:

ebből doktori iskolákban oktatók száma: doktori iskolát vezetőik száma:

doktori iskolában tőrzstagok száma:

elméleti kurzusok száma²⁶: gyakorlati kurzusok száma:

témavezetések száma (TDK-dolgozat): t

témavezetések száma (BA, illetve BSc diplomamunka):

témavezetések száma (MSc, illetve MA diplomamunka):

témavezetések száma (PHD-disszertáció)

9. Egyéb adatok

9.1 Kutatói mobilitás

A kutatóhely vendégtevékenységet folytató munkatársainak száma

hazai egyetemen vagy kutatóintézetben: vállalatnál:

külföldi egyetemen vagy kutatóintézetben: vállalatnál:

Vendégkutatók száma a kutatóhelyen

hazai kutatók száma félévénél rövidebb ideig: félévénél hosszabb ideig:

külföldi kutatók száma félévénél rövidebb ideig: félévénél hosszabb ideig:

A kutatóhelyen más hazai kutatók által kutatómunkával eltöltött idő²⁷:

A kutatóhelyen külföldi kutatók által kutatómunkával eltöltött idő:

9.2 Vállalati kapcsolatok az aktuális évben

A kutatóhellyel szerződéses kapcsolatban álló közép- és kisvállaltok száma:

A kutatóhellyel szerződéses kapcsolatban álló nagyvállalati partnerek száma:

10. Pénzügyi adatok

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege*:

M Ft

Fiatalkutatói álláshelyek száma*:

Az időszak folyamán a teljes saját bevétel (pályázatok, szabadalmak, szerződések, stb.) összege

(az akadémiai költségvetési támogatáson kívül)*: M Ft

saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel*:

Hazai pályázatok:

Az év folyamán művelt OTKA-témák száma:

A tárgyévre vonatkozó bevétel*:

M Ft

Az év folyamán művelt NKTH-pályázat témáinak száma:

NKFP:

A tárgyévre vonatkozó bevétel*:

M Ft

Egyéb:

A tárgyévre vonatkozó bevétel*:

M Ft

Az év folyamán művelt ÚMFT-témák száma:

A tárgyévre vonatkozó bevétel*:

M Ft

Az év folyamán művelt egyéb hazai témák száma:

A tárgyévre vonatkozó bevétel*:

M Ft

Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma:

EU-forrásból:

A tárgyévre vonatkozó bevétel*:

M Ft

Egyéb:

A tárgyévre vonatkozó bevétel*:

M Ft

Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:

A tárgyévre vonatkozó bevétel*:

M Ft

A *-gal jelölt adatokat kérjük, ne töltsék ki. Ezekbe a rovatokba az éves pénzügyi beszámoló alapján a Pénzügyi Főosztály adatai kerülnek.