

**A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
KUTATÓHELYEINEK
2012. ÉVI TUDOMÁNYOS EREDMÉNYEI**

I.

Matematika és természettudományok

Budapest
2013

A Magyar Tudományos Akadémia matematikai és természettudományi kutatóhelyeinek
beszámolóí alapján – az intézmények vezetőinek aktív közreműködésével –
szerkesztették az MTA Titkársága
Kutatóintézeti Főosztályának, valamint a
Támogatott Kutatócsoportok Irodájának munkatársai

Szarka László főosztályvezető

Herczeg György
Haranginé Lukács Réka
Redler László
Sugár Éva

Idei Miklós

Tartalomjegyzék

Előszó	5
A táblázatokkal kapcsolatos megjegyzések	6
<i>Matematikai és természettudományi kutatóközpontok és intézetek</i>	8
MTA Atommagkutató Intézet	9
Az MTA Atommagkutató Intézet főbb mutatói és pénzügyi adatai 2012-ben	22
MTA Csillagászati és Földtudományi Kutatóközpont	24
Földrajztudományi Intézet	27
Földtani és Geokémiai Intézet.....	36
Geodéziai és Geofizikai Intézet.....	42
Konkoly Thege Miklós Csillagászati Intézet	52
Az MTA CSFK főbb mutatói és pénzügyi adatai 2012-ben	62
MTA Energiatudományi Kutatóközpont	69
Atomenergia-kutató Intézet.....	71
Izotópkutató Intézet	81
Az MTA EK főbb mutatói és pénzügyi adatai 2012-ben.....	93
MTA Rényi Alfréd Matematikai Kutatóintézet	98
Az MTA RAMKI főbb mutatói és pénzügyi adatai 2012-ben.....	112
MTA Számítástechnikai és Automatizálási Kutatóintézet	114
Az MTA SZTAKI főbb mutatói és pénzügyi adatai 2012-ben.....	129
MTA Természettudományi Kutatóközpont	131
Anyag- és Környezetkémiai Intézet	138
Enzimológiai Intézet	150
Kognitív Idegtudományi és Pszichológiai Intézet.....	162
Molekuláris Farmakológiai Intézet.....	171
Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Intézet	183
Szerves Kémiai Intézet	194
Az MTA TTK főbb mutatói és pénzügyi adatai 2012-ben	202
MTA Wigner Fizikai Kutatóközpont	211
Részecske- és Magfizikai Intézet	214
Szilárdtest-fizikai és Optikai intézet.....	227
Az MTA Wigner FK főbb mutatói és pénzügyi adatai 2012-ben	241
<i>Matematikai és természettudományi támogatott kutatócsoportok</i>	246
MTA–BME Gépek és Járművek Dinamikája Kutatócsoport	247
MTA–BME Irányítástechnikai Kutatócsoport.....	250

MTA–BME Kondenzált Anyagok Fizikája Kutatócsoport	253
MTA–BME Műszaki Analitikai Kémiai Kutatócsoport	256
MTA–BME Szerves Kémiai Technológia Tanszéki Kutatócsoport	259
MTA–BME Sztochasztika Kutatócsoport	262
MTA–BME Vízgazdálkodási Kutatócsoport.....	265
MTA–DE Homogén Katalízis és Reakciómechanizmusok Kutatócsoport	268
MTA–DE Részecskefizikai Kutatócsoport.....	271
MTA–ELTE Egerváry Jenő Kombinatorikus Optimalizálási Kutatócsoport.....	273
MTA–ELTE Elméleti Fizikai Kutatócsoport.....	276
MTA–ELTE Fehérjemodellező Kutatócsoport.....	279
MTA–ELTE Geológiai, Geofizikai és Űrtudományi Kutatócsoport	282
MTA–ELTE Peptidkémiai Kutatócsoport	285
MTA–ELTE Statisztikus és Biológiai Fizika Kutatócsoport.....	288
MTA–ME Anyagtudományi Kutatócsoport	290
MTA–MTM–ELTE Paleontológiai Kutatócsoport	293
MTA–PE Levegőkémiai Kutatócsoport	296
MTA–SZTE Analízis És Sztochasztika Kutatócsoport.....	299
MTA–SZTE Bioszervetlen Kémiai Kutatócsoport	302
MTA–SZTE Mesterséges Intelligencia Kutatócsoport	305
MTA–SZTE Sztereokémiai Kutatócsoport	308
MTA–SZTE Szupramolekuláris és Nanoszerkezetű Anyagok Kutatócsoport.....	311
A matematikai és természettudományi támogatott kutatócsoportok főbb mutatói és pénzügyi adatai 2012-ben	314
<i>Matematikai és természettudományi Lendület-kutatócsoportok</i>	<i>338</i>
MTA–ATOMKI Lendület Rács Kvantum-színdinamika Kutatócsoport	339
MTA–CSFK Lendület Exobolygók és Csillagszerkezet Kutatócsoport	340
MTA RAMKI Lendület Kriptográfia Kutatócsoport	342
MTA–Rényi Intézet Lendület Alacsony Dimenziós Topológia Kutatócsoport.....	344
MTA–WIGNER FK Lendület Félvezető Nanoszerkezetek Kutatócsoport.....	346
MTA–Wigner FK Lendület Kvantummérés Kutatócsoport	349
MTA–BME Lendület Egzotikus Kvantumfázisok Kutatócsoport	351
MTA–ELTE Lendület Biofizikai Kutatócsoport	353
MTA–ELTE Lendület Dinoszaurusz Kutatócsoport.....	354
MTA–SZTE Lendület Foldamer Kutatócsoport	357
Az egyetemi Lendület-kutatócsoportok főbb mutatói 2012-ben	359

ELŐSZÓ

E kötet egyike az MTA 2013. május 6-7-i közgyűlésére készült „*Beszámoló a Magyar Tudományos Akadémia kutatóhelyeinek 2012. évi tevékenységéről*” c. előterjesztés mellékleteinek: a három kötet tudományterületek (matematika és természettudományok, élettudományok, humán és társadalomtudományok) szerint mutatja be a szerkezetében megújult kutatóintézet-hálózat (10 kutatóközpont és 5 kutatóintézet) eredményeit, valamint a legalább 1 éve működő akadémiai támogatású kutatócsoportok és egyetemi Lendület-kutatócsoportok munkáját.

A Magyar Tudományos Akadémiáról szóló 1994. évi XL. törvény értelmében az MTA kutatóhelyei évente beszámolnak tevékenységükről.

Az akadémiai kutatóhálózat szerkezeti megújulása (a kutatóintézet-hálózat átszervezése, egyetemi Lendület- és új támogatott kutatócsoportok létrejötte) szükségessé tette a tudományos beszámolási rendszer újragondolását. Az éves beszámolók elkészítése 2013-ban már az új kutatóközpontokon keresztül történt, így a központtá szerveződés a beszámolóban is tükröződik. Ugyanakkor – az összehasonlíthatóság érdekében – egyelőre megőriztük az intézeti beszámolási szintet is.

A támogatott kutatócsoportok beszámolási anyagai és a tudományos beszámoló struktúrája lényegében megegyezik a kutatóintézetekével. Csak attól az 53 kutatócsoporttól kértünk éves számadást, amely 2012. január 1-jétől kezdte meg munkáját (a 2012. július 1-jével indult kutatócsoportoktól nem). Tekintettel arra, hogy a Lendület-kutatócsoportok továbbra is a július 1-jétől a következő év június 30-áig terjedő munkaévről készítenek szakmai jelentést, e beszámolókötetekben ezek csak rövid ismertetéssel szerepelnek.

Újdonság, hogy 2013-tól a publikációs és idézettségi adatokat a Magyar Tudományos Művek Tára (MTMT) adatbázisából való lekérdezés (és nem önbevallás) alapján közöljük. A pénzügyi adatok a Gazdasági Igazgatóság által kidolgozott új szerkezetben kerülnek bemutatásra.

2012-ről összefoglalóan megállapítható, hogy – a szerkezeti megújulásnak és az ezt elismerő parlamenti költségvetési támogatásnövekedésnek köszönhetően – az új lehetőségek éve volt. 2012 júliusában 21 akadémiai támogatású kutatócsoport és 37 új Lendület-kutatócsoport alakult (a januárban szerveződött 53 támogatott- és 28 Lendület-kutatócsoporton felül). Az akadémiai kutatóintézet-hálózatban 2012-ben – közel egy évtizedes, egyre fokozódó elmaradást némileg enyhítve – 2 Mrd Ft-nyi kutatási infrastruktúra-fejlesztés történt. Jelentős összeg állt rendelkezésre – a főigazgatói, igazgatói pályázatokhoz kapcsolódóan – az új szerkezetű kutatóintézet-hálózat tartalmi megújítására is. A pályázati úton elnyert különféle támogatások hatásáról, azaz arról, hogy az akadémiai kutatóhálózat az új lehetőségekkel hogyan tudott élni, a következő évi beszámolóban tudunk jelentést tenni. Ahogy az új központok beszámolóiból is látható, az intézményvezetők és a munkatársak jelentős erőfeszítéseket tettek a kutatóközpontként való működés feltételeinek megteremtésére. Noha már szinte mindenhol elindult és megerősödött az interdiszciplináris együttműködés, az integráció valódi eredményei egy-két éven belül fognak igazán láthatóvá válni.

A kutatóintézet-hálózat és a kutatócsoport-hálózat 2012. évi beszámolóinak gyűjteményes kötetei az MTA megújult szerkezetű kutatóhálózatának első évi tevékenységéről adnak áttekintést.

Budapest, 2013. április

Németh Tamás
főtitkár

A TÁBLÁZATOKKAL KAPCSOLATOS MEGJEGYZÉSEK

A táblázatban szereplő adatok egy részét a központok, intézetek vagy a csoportok adták meg. A központok, intézetek pénzügyi és létszámadatait a Gazdasági Igazgatóság, a csoportokét pedig a TKI szolgáltatta a pénzügyi beszámolók alapján. A publikációs és idézettségi adatokat a Magyar Tudományos Művek Tára (MTMT) adatbázisából való lekérdezés (és nem önbevallás) alapján közöljük. Az idézettségi adatok – a nemzetközi gyakorlatra áttérve – a beszámolási évet megelőző évre (most 2011-re) vonatkoznak. Többéves pályázatoknál mindig az adott évre eső összeg került feltüntetésre forintban.

A beszámolók táblázataiban indexszel megjelölt számok jelentései:

¹ Az éves gazdasági beszámolóban szereplő átlagos statisztikai állományi létszám.

² A kutatói besorolásban lévő közalkalmazottak 2012. évi tényleges átlagléttszáma. Az átlagléttszámba beletartoznak a részmunkaidőben foglalkoztatottak is. Ezekben az esetekben a részmunkaidősök létszáma a ledolgozott órák alapján lett teljes munkaidős létszámmá átszámítva.

³ Itt tájékoztatásul külön megadjuk azoknak az akadémikusoknak a tényleges számát, akik az intézettel munkaviszonyban nem állnak ugyan, de tudományos munkájuk kapcsolódik az intézet tevékenységéhez.

⁴ Akadémiai fiatal kutatói álláshelyen és egyéb álláshelyen levő 35 év alattiak együtt.

⁵ A publikációk közé sorolhatók mindazon tudományos, oktatási és tudományos ismeretterjesztő publikációk, amelyeket a kutatóhely statisztikai állományi létszámába besorolt munkatársai jelentettek meg a beszámolási évben, és a publikáción szerepel a kutatóhely neve. Az egyes publikációtípusok meghatározásánál az MTMT definícióit vettük alapul (típus_jelleg_besorolás_v3.0).

⁶ A teljes publikációnak tekinthető közleményfajták felsorolása az MTA elnökség doktori határozata (MTA_doktori_határozat -kivonat) alapján:

1. Folyóiratban megjelentek: szakcikk/tanulmány, összefoglaló cikk, rövid közlemény, sokszerzős vagy csoportos szerzőségű közlemény, forráskiadás, recenzió/kritika, műkritika, esszé.
2. Könyvek: szakkönyv, monográfia, kézikönyv, forráskiadás, kritikai kiadás, atlasz.
3. Könyvben megjelent: szaktanulmány, esszé, forráskiadás, recenzió/kritika, műkritika, műtárgyleírás, térkép.
4. Konferenciaközlemény: folyóiratban, könyvben, egyéb konferenciakötetben (általában több mint két oldal).

⁷ A 2012-es összesített impaktfaktorhoz a folyóiratok legutóbbi (2012-ben közzétett, de a 2011-es évre vonatkozó) impaktfaktorát használjuk.

⁸ A kutatóhelyhez rendelt összes eddigi publikációra 2011-ben kapott (a megjelenési év 2011) hivatkozások száma. Nem számít a hivatkozások közé a disszertációkból, általános bibliográfiákból, ismeretterjesztő vagy nem besorolható művekből (vagy szóbeli közlésből) származó hivatkozás. A Kémiai Kutatóközpont négy intézetének hivatkozásait a jelenlegi

TTK Anyag- és Környezetkémiai Intézet adatai között szerepeltetjük, de ez természetesen a korábbi négy intézet összesített hivatkozásainak száma.

⁹ A tárgyévben kiállított oklevelek alapján.

¹⁰ Nemzeti úton megadott oltalmak: szabadalom, formatervezési minta, használati minta, védjegy, földrajzi árujelző, növényfajta-oltalom, kiegészítő oltalmi tanúsítvány.

¹¹ Megadott külföldi oltalmak: hatályosított európai szabadalom, közösségi védjegy, nemzetközi, Madridi Megállapodás szerinti védjegy, közösségi növényfajta-oltalom.

¹² Azokat az előadásokat és poszttereket is ideszámítottuk, amelyek nem jelentek meg konferencia-kiadványban, de dokumentálhatók.

¹³ Itt csak a kormány szintű vagy ezzel ekvivalens országos és nemzetközi, nem megbízási díjért végzett szakpolitikai tanácsadó tevékenységet, bizottsági részvételt soroltuk fel.

¹⁴ Mindazon személyek száma, akik hazai felsőoktatási intézményben rendszeresen (nem feltétlen heti rendszerességgel), tantervi keretek között oktatnak. A külföldi egyetem számára végzett oktatási tevékenységet, a felkérésre tartott előadásokat és a szakdolgozat, diplomamunka, PhD-téma vezetését a beszámoló III., illetve IV. pontjában találjuk. Az adatok a 2011/2012-es tanév második és a 2012/2013-as tanév elő szemeszterére vonatkoznak.

¹⁵ A 2012. évben a kutatóhely részére a Magyar Államkincstár által kiutalt összes költségvetési támogatást csökkentettük a következő tételekkel:

- a központi beruházási támogatás,
- a felújítási és infrastrukturális támogatás,
- a más tárcáktól bármilyen céllal átadott támogatás,
- a pályázati programok támogatása,
- a kutatóhálózati megújítás támogatása

összegével.

¹⁶ 2012. december 31-én az MTA-keretből a kutatóhely rendelkezésére álló fiatal kutatói álláshelyek száma.

¹⁷ Az ÚMFT-re, az egyéb hazai pályázatokra (ÚSZT, Széll Kálmán terv stb.) és az EU-s pályázatokra kapott bevétel összege.

¹⁸ A tárgyévre vonatkozó kutatási- és egyéb vállalkozási bevétel, valamint minden egyéb, eddig nem szerepelt kutatási és nem kutatási bevétel összege.

**MATEMATIKAI ÉS TERMÉSZETTUDOMÁNYI KUTATÓKÖZPONTOK ÉS
KUTATÓINTÉZETEK**

MTA TERMÉSZETTUDOMÁNYI KUTATÓKÖZPONT

1025 Budapest, Pusztaszeri út 59-67.; 1525 Budapest, Pf. 17.
telefon: (1) 438 1130; fax: (1) 438 1147
e-mail: szepvolgyi.janos@ttk.mta.hu; honlap: <http://www.ttk.mta.hu>

I. A kutatóközpont egészét érintő kutatási és tudományszervezési eredmények 2012-ben

Az MTA TTK megalakulásával egy olyan multidiszciplináris alapokon szervezett kutatóhely jött létre, ahol a művelt tudományterületek között – az egy szervezeten belüli működés következtében – könnyen továbbfejlődhetnek az érintett intézetek között már meglévő kutatói együttműködések, ugyanakkor több témában új közös kutatások is elindulhattak.

E kezdeményezéseket a TTK vezetése mind gazdálkodási, mind tudományszervezési oldalról igyekezett támogatni. A konkrét együttműködésekről és azok eredményeiről intézetenkénti bontásban, az alábbiakban számolunk be.

TTK AKI

Az intézet a korábbiakban is fontosnak tartotta a különböző akadémiai intézetek közötti együttműködések. E törekvések a Természettudományi Kutatóközpont létrejöttével, majd az intézeti szervezet stabilizálásával még kiterjedtebbé váltak. A jelenlegi és a jövőbeli közös kutatási eredmények alapjául szolgál, hogy az MTA TTK intézeteinek kutatói különböző iskolákból nőttek ki, ismereteikkel hasznosan kiegészítik egymást, és a rendelkezésre álló többféle módszerrel a megoldandó problémákat komplexen, esetenként multidiszciplinárisan tudják megközelíteni.

A tárgyévben az alábbi témákat művelték a TTK intézeteivel együttműködve:

A SzKI-ben előállított, heteroatomot tartalmazó polimer kotérhálók termikus stabilitását jellemezték az intézetben. Az eredményekről a tárgyévben publikáció jelent meg.

Alumínium/kerámia kompozitok kifejlesztésén dolgoznak az MFA-val közösen. A cél a féktárcsák kopásállóságának a csökkentése. A projektben az intézet a próbatestek szinterelését végzi.

Mikrohullámú elnyelésű társított kerámia anyagokat fejlesztenek ki. A munkához az MFA a NiZn-ferrit porok préselésével járul hozzá.

Az SzKI kutatóival közös NKFP-pályázatban, vizes közegben fokozatosan hidrolizáló, L-almasav alapú, komonomerként speciális tulajdonságú (pl. antibakteriális hatású) poliésztereket állítottak elő. Az anyagokat közösen jellemezték, és vizsgálták felhasználási lehetőségeiket. Az eredmény alapján szabadalmi bejelentés és kozmetikai ipari termék készült.

Az AKI Felületmódosítás és Határfelületek Osztálya és az MFA Mikrotechnológia Osztálya között együttműködés alakult ki a lágylitográfiai módszerek közé tartozó mikrokontaktmásolás témában. Az MFA-ban fotolitográfias módszerekkel előállított szilícium mestermintázatok alapján készült, a mikrométer alatti tartományban strukturált felületeket az intézetben adott mintázatú, heterogén fehérjerégegek enzim-hatásra történő változásának vizsgálatára alkalmazzák.

Az SzKI kutatóival közösen hexagonális és monoklin szerkezetű WO_3 fotokatalitikus tulajdonságait vizsgálták összefüggést keresve a katalitikus tulajdonságok és a szerkezeti jellemzők között. Az 1H MAS NMR vizsgálatokkal megállapítható volt az ammónium csoportok jelenléte a mintákban. Az eredményből a tárgyévben publikáció született.

A 2012-ben elnyert OTKA-pályázatok keretében az alábbi három témában kezdődött közös tevékenység:

Funkcionalizált nanorészecskéken alapuló multiszenzorokat fejlesztenek ki és ezekre alapozva bioanalitikai eljárásokat dolgoznak ki. Az MFA Mikrotechnológia Osztályán meglévő szenzorstruktúra kialakítási tapasztalat és gyakorlat, valamint AKI Felületmódosítás és Határfelületek Osztályán rendelkezésre álló elektrokémiai háttér jó alapot nyújt a közös munkához.

Bioaktív, csontpótlásra alkalmas hidroxapatitok szilárdságának növelési lehetőségeit vizsgálják különböző erősítőfázisok hozzáadásával. Az MFA-val közösen az intézet a nano-hidroxapatit alapú minták hőkezelését végzi.

Lipid jellegű molekulákból víz-levegő határfelületen Langmuir molekuláris filmek készítésének tanulmányozása, majd a megfelelő paraméterek kiválasztása után a molekuláris rétegek szilárd hordozóra történő átvitele az intézet munkatársainak feladata. A lipidszerkezetet az MFI-ben röntgen- és neutronszórással tanulmányozzák, hogy annak belső mobilitásáról szerezzenek ismereteket. Ezzel segítik a sejtmembránok szerkezetének, működésének megértését és modellezését. A strukturális változások térbeli és időbeli követésével gyógyszermolekulák sejtbe juttatási lehetőségeit igyekeznek feltárni.

Jelenleg tervezik az MFI-vel közösen a „Nanopórusos szilikátok megfelelő hordozók bioaktív molekulák tárolására és kontrollált kibocsátására” című témát. A különböző módosítási eljárásokkal előnyösen lehet befolyásolni a gyógyszer hatóanyagok szervezetbe juttatását. A Gyógyszertranszport és Toxicitási Laboratóriummal együttműködve az intézetben előállított nanopórusos szilikát alapú készítmények biokompatibilitását, toxicitását tervezik tesztelni.

Rendelkezésre állnak olyan ismeretek, melyek további lehetőséget jelentenek a TTK intézeteinek jövőbeni közös kutatásaira, illetve eredményeiknek valamilyen termékben történő megtestesülésére:

A korábban kifejlesztett, szilícium-oxid alapú, késleltetett hatóanyag leadást biztosító gyógyszerhordozó a későbbiekben más hatóanyaggal is alkalmazható.

Orvostechikai (kontrollált hatóanyag leadás) felhasználásra alkalmas funkcionális polimereket dolgoznak ki.

Gyógyszerek csomagolására alkalmas kompozit anyagokat fejlesztenek ki.

Az intézet havi rendszerességgel szemináriumokat tart, melyek nyitottak, azon szívesen látják az érdeklődőket az MTA TTK többi intézetéből is.

Az intézet már négy alkalommal rendezett kutatótábort a kémia iránt érdeklődő tehetséges középiskolás diákoknak. A második évtől a kutatótábor kilépett az intézet keretei közül, és azóta az MTA KK intézetei, ill. az MTA TTK kémiai intézetei részvételével szervezi a kutatótáborokat. Az évekket elelőtt még középiskolás diákok ma már egyetemistaként járnak vissza az intézetekbe nyári gyakorlatokra, valamint tudományos diákköri munka végzésére.

TTK EI

A *Membránfehérje Bioinformatika Munkacsoport* 2012 júliusában alakult, miután a csoportvezető az Akadémia elnöke által létrehozott Lendület pályázatot nyert. A csoport megalakulása részben átszervezéssel, a Fehérjeszerkezet munkacsoportból érkezett, részben új munkatársak felvételével történt. Mind a csoport által végzett laboratóriumi és elméleti munka egy része a kutatóközponton belüli együttműködés segítségével valósul meg. A laboratóriumi munkák a Membránfehérje munkacsoporttal együttműködve, az elméleti munkák egy része a csoportvezető korábbi csoportjával való együttműködésben valósul meg. Ez utóbbi munkából már egy cikk is született.

Az Enzimológiai Intézet *Sejt Architektúra Munkacsoportjának* kapcsolata a Központi Kémiai Kutatóintézettel (mai nevén: Molekuláris Farmakológiai Intézet, Szerves Kémiai Intézet)

hosszú múltra tekint vissza, mivel „Az életminőség javítása” című Nemzeti Kutatás és Fejlesztés MediChem projektben 2001–2006 között ideális lehetőséget biztosított a konzorciumban résztvevők közötti kollaborációra. A gyógyszerkutatás-orientált projekt első periódusában a munkacsoport egy új rákellenes molekula, a KAR-2 molekuláris mechanizmusát azonosította, míg a második periódus legjelentősebb eredménye egy, a csoport által akkor felfedezett és azonosított agy-specifikus fehérje szerkezeti jellemzése volt. A konzorcium keretében kapott kutatási eredmények nemzetközi folyóiratokban kerültek publikálásra.

A Tubulin Polymerization Promoting Proteinnek (TPPP/p25) elnevezett rendezetlen szerkezetű fehérje felfedezését követően 2004-ben az immun-hisztokémiai vizsgálatok alapján bebizonyosodott, hogy bizonyos neurológiai rendellenességek kialakulásának részese a fehérje. Következésképpen a csoport központi témájává vált napjainkig a TPPP/p25 sokszínű sajátságainak kutatása. A TPPP/p25 idegrendszeri relevanciája eredményeképpen a TTK Molekuláris Farmakológiai Intézetének igazgatójának javaslatára a Sejt Architektúra csoport előadása közös, neurológiai témájú szekcióba került, ami a két intézet közötti lehetséges kollaborációs munka kialakulását vetíti előre.

A genomiális DNS metilációs mintázatának vizsgálatára indult közös munka még 2011-ben az Aktív Transzportfehérjék munkacsoport és a Genom Stabilitás munkacsoport vezetője, ill. a Gyógyszer-kölcsönhatások laboratórium tudományos főmunkatársának (MTA Kémiai Kutatóközpont) részvételével. A kísérletek 2012-ben az egyesült kutatóközpont keretein belül folytatódtak. Az Enzimológiai Intézetben előállított biológiai minták tömegspektrometriás elemzését a Molekuláris Farmakológiai Intézet Biokémiai Farmakológiai osztálya végzi. A közös munkából 2012-ben megjelent egy közlemény az *Epigenetics* folyóiratban. A további kutatás elősegítése érdekében az érintett kutatók pályáztak egy új tömegspektrométer műszerre az MTA műszerpályázatán, de sikertelenül.

A csoport folytatta az MDR-szelektív vegyületek fejlesztésére irányuló kutatásait. Kiemelkedő jelentőségű fejlemény, hogy 2012 januárjában elindult az ERC Starting Grant pályázat. 2012-ben számos új MDR-szelektív vegyületet azonosítottak; felállították a nagy áteresztőképességű szkrín futtatására alkalmas HTS labort; ígéretes kísérleteket végeztek egyes MDR-szelektív vegyületek *in vivo* hatásának igazolására. Kihasználták a Természettudományi Kutatóközpontban megjelenő szinergiákat, és együttműködést kezdtek a Szerves Kémiai Intézet, Organokatalízis Laboratóriumával.

Részletesen vizsgálták az ABCB6 fehérje sejten belüli lokalizációját. A TTK Molekuláris Farmakológiai Intézettel közösen megállapították, hogy az ABCG2 megjelenése a vörösvérsejtek membránjában korrelál farmakológiailag releváns polimorfizmusokkal.

Nemzetközi együttműködésben folytatták az antimaláriás gyógyszerekkel szemben kialakuló rezisztencia molekuláris alapjainak vizsgálatát.

A *Szerkezeti Biofizika Munkacsoport* együttműködést alakított ki az MTA TTK Szerves Kémiai Intézet Fehérjekrisztallográfiás Kutatócsoportjával. A munkacsoport által enzimológiai és fehérjekémiai módszerekkel vizsgált 3-izopropilmalát dehidrogenáz (IPMDH) enzim és annak mutánsai nagyfelbontású térszerkezetének meghatározását a Szerves Kémiai Intézet Fehérjekrisztallográfiás Kutatócsoportjának egy tudományos munkatársa végzi a Molekuláris Farmakológiai Intézet központi Fehérje laboratóriumában.

A genom metabolizmus és DNS-javítás területeken olyan kutatási irányok indultak, melyek a kémiai biológia és a fejlődésbiológia módszertanait használják. Ezen belül közvetlen tömegspektrometriai kutatások indultak el a Szerves Kémiai Intézettel együttműködésben a *Staphylococcus aureus* patogenicitási szigeteinek repressziós és de-repressziós mechanizmusaiért felelős fehérje-fehérje komplexek vizsgálatában.

Elnyertek és sikeresen üzembe állítottak egy műszeregyüttest, amely segítségével a XXI. századnak megfelelő infrastruktúrával vizsgálhatók szerkezeti biológiai kérdések a TTK-ban.

TTK KPI

A KPI kutatásainak együtteséből az intézet Összehasonlító Pszichofiziológiai Kutatócsoportjának tematikája illeszkedik a Természettudományi Kutatóközpont egyéb intézeteinek tudományterületeihez. E kutatócsoport együttműködést alakított ki a *Molekuláris Farmakológiai Intézettel* az alábbi témákban:

Az intrinsic optikai jel kérgi eredetének vizsgálata.

A kérgi és hippokampális serkenési és gátlási folyamatok vizsgálata *in vitro* körülmények között.

E témakörök elsődlegesen „felfedező” jellegűek. A vizsgálatokban résztvevő kutatók közösen nyújtottak be Európai Unió (FP7) pályázatot, és együtt szerepeltek akadémiai infrastrukturális pályázaton.

A *Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Intézettel* az alábbi témákban jött létre együttműködés: Fluidikai funkcióval ellátott agyi elektródok tervezése.

Mély agyi elektródok tervezése.

Agyi elektródok implantációjának vizsgálata.

Az elektród impedancia csökkentésének kutatása.

E témakörök elsődlegesen műszaki fejlesztés jellegűek. A vizsgálatokban résztvevő kutatók közös TÁMOP (KTIA) pályázatot nyújtottak be.

A Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Intézet döntési elmélettel foglalkozó kutatócsoportja szakértőként meghívta munkatársunkat a kutatómunka belső értékeléséről tartott ülésére.

A Kutatóközpont két közös rendezvényt tartott, melyeken a KPI is bemutatta kutatásait a Kutatóközpont munkatársainak. Az egyik a Mátraházán a fiatal kutatók vizsgálatait bemutató rendezvény volt, a másik a Kutatóközpont tudományos előadássorozata. Mindkét esetben tapasztalhattuk a Kutatóközpont munkatársainak komoly érdeklődését.

A KPI – a kutatóközpontok kialakítási elveinek megfelelően – az együttműködési törekvések mellett megőrizte diszciplináris autonómiáját. Gazdálkodása ugyanakkor beolvadt a Kutatóközpont működésébe. A Kutatóközpont gazdasági vezetése két kihelyezett munkatársat biztosított a KPI-nek. Feladatuk igen sokrétűnek bizonyult, de munkájuk biztosította a koordinált működést. A 2012. év a gazdálkodás tekintetében egyrészt a tapasztalatszerzés éve volt, másrészt annak a várhatóan két és fél évnek az egyike, mely az átmenetet jelenti az önálló gazdálkodás és a „Q2 épület” egységesebb gazdálkodása között. A KPI-ben kialakult álláspont szerint a jelenlegi gazdálkodási rendszer nem tekinthető statikus állapotnak, hanem az átmenet dinamikájának része. Ennek megfelelően – legalább is a KPI esetében – fokozatosan csökkenteni kellene a központi telephelyen elhelyezkedő intézetek és az azon kívüli KPI adminisztrációja közötti eltéréseket. Ezt az is indokolja, hogy az a gazdasági munkatárs, akinek jelentős gyakorlata volt szervezési, pályázati és tervezési kérdésekben, decemberben távozott a Kutatóközpontból.

A KPI munkatársai kompetenciájuk határain belül igyekeztek maximálisan részt venni az épület laboratóriumainak kialakításában. A számunkra nyújtott lehetőségek mellett konzultáltunk a tervezőkkel, és igyekeztünk érvényre juttatni a kutatásaink szempontjából lényeges kialakítás szempontjait.

TTK MFI

A 2012. esztendőben megkezdődött a kutatások fókuszált területekre történő összpontosításának és az ehhez szükséges kritikus tömeg megteremtésének ösztönzése, melynek célja stratégiai partnerség kialakítása a gyógyszeriparral. Ennek érdekében új technológiai platformok jöttek létre, amelyek a következők: 1) új kutatási infrastruktúra, az optofiziológia; 2) gyógyszerek és különböző toxikus anyagok hatásainak *in vivo* monitorozására alkalmas transzgenikus modell organizmusok létrehozása és alkalmazása, valamint 3) nanoanyagok toxicitásának rendszerszerű vizsgálata. A Molekuláris Farmakológiai Intézet meglévő kompetenciái és az általa kezdeményezett új technológiai platformok lehetővé teszik az MTA TTK-ban előállított, humán terápiás és diagnosztikai potenciállal rendelkező új molekulák és funkcionális anyagok tervezését, az előállított anyagok hatásának értékelését *in vitro*, *ex vivo* és *in vivo* biológiai vizsgálatokban.

A 2012. esztendőben megkezdődött a nemzetközileg kiemelkedő színvonal fokozása a sejtbiológiai alapkutatások területén. Ennek megfelelően, 2012 júliusában megalakult a Molekuláris Sejtbiológiai Laboratórium, miután a laboratórium vezetője az Akadémia elnöke által létrehozott Lendület pályázatot nyert. A csoport megalakulása új munkatársak felvételével történt. A munka - amelyből már egy cikk is született -, főként a Molekuláris Farmakológiai Intézet különböző laboratóriumai közötti együttműködés segítségével valósul meg.

A 2012. esztendőben megkezdődött a graduális és posztgraduális kutató-képzés kiválósági központ fejlesztésének elősegítése az Eötvös, a Műszaki és a Semmelweis egyetemekkel együttműködve. A célkitűzés megvalósítását szolgálták a Molekuláris Farmakológiai Intézet gyakorlati képzésében résztvevő diplomamunkások (14/2012) és PhD hallgatók (23/2012), a Molekuláris Farmakológiai Intézet kutatóinak részvétele a graduális és posztgraduális oktatásban (ELTE, BME, SOTE), a „Molekuláris Farmakológiai Szemináriumok” sorozat neves külföldi és hazai előadókkal, az angol nyelven tartott „Journal Club”, az Enzimológiai Intézettel közösen szervezett „Immunkávé” előadások a kiemelkedő eredmények ismertetésére, a Molekuláris Farmakológiai Intézet fiatal kutatói részvételének szorgalmazása az MTA TTK „Doki Suli”, a Kutatóközponti Szakmai Napok, a Gárdos Symposium, a Kutatók Éjszakája, a Magyar Tudomány Ünnepe rendezvényeken, valamint hazai és külföldi konferenciákon.

Az MTA TTK szintű integráció eddigi eredményeiként számos közös publikáció jelent meg (KPI, EI), közös MTA Műszerpályázatok összintézeti együttműködésben, továbbá EU FP7 pályázatok (ERC Synergy Optophysiology) kerültek benyújtásra a KPI, MFA, AKI, SZKI kutatóhelyek részvételével. Közös előadás és szeminárium sorozatok indultak az EI közreműködésével. Egyes Molekuláris Farmakológiai Intézeti kutató laboratóriumok magas szintű szolgáltató tevékenységet is végeztek (bioMS, hatás vizsgálat, vizsgálati modellek, gyógyszer-hordozók, központi Fehérjelabor infrastruktúra), ami elősegítette a Molekuláris Farmakológiai Intézeten belüli, valamint az MTA TTK centrumon belüli (EI, AKI, SZKI), továbbá a gyógyszeripari és biotechnológiai együttműködéseket.

TTK MFA

Az MFA, mint multidiszciplináris rendszerintegrátor, a korábbi évekhez hasonlóan az MTA TTK-ban is érdekelt az intézetközi együttműködésekben. Értelemszerűen az anyagtudományi kutatások területén alakult ki szerves kapcsolat (AKI), de az MFA multidiszciplináris kutatásaiban az MFI, EI, KPI együttműködések is szerepet játszanak.

A Nanoszerkezetek Osztály az MFI-vel a koordinációjukkal benyújtott ERC Synergy pályázatokban a Fotonika Osztállyal együtt:

A 2012-es, nem támogatott pályázat címe: „*Complex estimation of the toxicological effects of nanomaterials*”,

A 2013-ban benyújtott, elbírálás alatt lévő pályázat címe: „*Generation of a Novel Nanosensor Platform for In Vivo Optical Monitoring of Physiological Ion and Solute Fluxes*”.

Együttműködtek a lepkeszárnyakban előforduló fotonikus nanoarchitektúrák gáz/gőz-érzékelési tulajdonságainak kutatásában.

A Fotonikai Osztály elektrokémiai felületmódosítások vizsgálatára az AKI-vel egy QCM-D (quartz crystal microbalance) eszközre pályázott MTA Infrastruktúra pályázaton, sikertelenül.

A Nanobioszenzorikai Lendület-Csoport az EI-vel folytat sikeres receptor-fejlesztést a nagyérzékenységű jelölésmentes bioérzékelő kutatásban biomolekulák protein adszorpciós és affinity binding kötésében.

A Mikrotechnológiai Osztályon több közös munka folyik a TTK társintézményeivel, a közös K+F munkákat többnyire az MFA-ban folyó mikrotechnológiai és a mikrofluidikai kutatásokat bemutató előadás inicializálta.

Az MFI-vel közösen „The dynamic connectome project: reverse-engineering the structure and information processing algorithms of neuronal networks” DYNCONN címmel FET Open pályázatot adtak be, melyben az MFA *in vitro* elektrodák hálózat és mikrofluidikai környezet kialakítását végzi idegszövetek működésének és a kapcsolatok fejlődésének kutatására. A 2012-ben sikertelen pályázatot idén tavasszal újra beadják.

A KPI-vel együtt az MFA új típusú eltemetett csatornás agyi mikroelektroda struktúrák *in vivo* tesztelése folyik.

A KPI-vel közösen folyik a mikroECoG elektródák (agyfelszínre közvetlenül ráültethető, polyimid fólia felületén kialakított elektródahálózat) fejlesztése és validálása.

A KPI-vel és AKI-vel közös, „Multifunkcionális mikrorendszerek fejlesztése *in vitro* és *in vivo* idegtudományi és orvosbiológiai célokra” c. KTIA AIK pályázatuk jelenleg bírálat alatt.

Az AKI-vel közösen fejlesztenek:

gázérzékelő struktúrákhoz nano-részecskékkel érzékenyített katalizátoranyagokat mikroszenzor alkalmazásra

mikrofluidikai elektrokémiai cellákat üveg-PDMS rendszerben

mikroelektrodahálózatot és cellákat sejtenyészetek vizsgálatára

üveg hordozón arany struktúrák kialakítása gázérzékelő célokra.

A Komplex rendszerek Osztálya próbált együttműködést kezdeményezni a KPI-vel az „Együttműködés és Versengés” témakörében.

A Vékonyréteg fizikai Osztály az SZKI-vel közösen egy atomi szerkezet-meghatározási PhD kutatást kívántak indítani, amiben új eredményeket a röntgen diffrakció és elektron diffrakció módszerek kombinálásával reméltek. Közös MTA Infrastrukturális pályázatuk a precessziós rendszerre nem nyert támogatást.

A Kerámia és nanokompozitok Osztály az AKI-vel nanokerámia K+F-ben működött együtt hazai és nemzetközi (OTKA, HM/FOI) projektekben a nanoszerkezetű kerámiatestek plazmaszinterelésének vizsgálatára, különös tekintettel a speciális magas hőmérsékletű és orvosbiológiai tulajdonságok kutatására.

TTK SZKI

A TTK év elején történt megalakulása óta az SZKI minden kutatóegysége elsődleges célul tűzte ki az együttműködések kezdeményezését és fenntartását a központ többi intézetével. Az SZKI tevékenységének jellegéből eleve adódik a kooperáció lehetősége:

a szintetikus kémiai laboratóriumok modell vegyületeket állítanak elő különböző tesztelések és mérések céljára, valamint az együttműködő intézet által javasolt szintéziseket végzik el, a polimerkémiai laboratórium új típusú anyagok előállításával az anyagtudomány számára szolgáltat értékes termékeket,

a műszeres szerkezetkutató egységek speciális szerkezet-meghatározási lehetőséget kínálnak az együttműködő partnerek számára,

az Elméleti Kémiai Csoport a TTK-ban egyedülálló módon foglalkozik kvantumkémiai és egyéb elméleti számításokkal, melyek szervesen egészítik ki a teljes központ kutatásait.

Néhány ilyen együttműködés már korábban kialakult, így pl. a 2000 és 2006 között megvalósult, az akkori NKTH által támogatott MEDICHEM programban a mai SZKI, MFI és EI egyaránt részt vett. Hasonlóképpen többéves együttműködés áll fenn az egykori Kémiai Kutatóközponton belül a mai MFI és SZKI között.

A tárgyévben a következő élő kooperációkról kell beszámolni:

Molekuláris Farmakológiai Intézet

A Gyógyszertranszport és Toxicitás Laboratórium és az SZKI Heterociklusos Kémiai Laboratóriuma közösen vizsgálta az központban szintetizált új fenotiazin-származékok multidrog-rezisztencia-gátló tulajdonságát és a vegyületek toxicitását. A napi kapcsolatra épülő együttműködés közös (egy megjelent és egy megjelenés alatt álló) publikációkhoz vezetett.

A Molekuláris Idegtudományi Laboratórium az SZKI Szénhidrátkémiai Laboratóriumával együtt vettek részt értékes projektben: neurokémiai fontosságú dendrimerek szénhidrát-komponenseinek szintézisében.

A Lézerspektroszkópai Laboratórium sikeres együttműködést valósított meg az SZKI Szénhidrátkémiai és Heterociklusos Kémiai Laboratóriumaival. E kooperáció keretében heterogyűrűs származékok fluoresszcens tulajdonságát kutatták. Az eredményekből két közös publikáció jelent meg 2012-ben.

A Kémiai Farmakológiai Laboratórium kimagasló jártasságra és szakértelemre tett szert a királis elválasztás területén, mellyel az SZKI Heterociklusos Kémiai és Organokatalízis Laboratóriumok kutatásaihoz jelentősen járult hozzá. Így valósult meg az enantiomer-tiszta N-hidroxibutilfenotiazinok izolálása is, melyet leíró közlemény a közeljövőben jelenik meg.

Enzimológiai Intézet

Élő, napi kapcsolat fejlődött ki 2012-ben a Lendület programos membránfehérjékkel foglalkozó laboratórium és az SZKI Organokatalízis Laboratórium között. Az SZKI kutatóegységében szintetizált vegyületeket a membránfehérje laboratórium állatkísérleteinél használja fel.

Az intézet több kutatóegysége végez közös kutatásokat az SZKI Röntgen Egykristály laboratóriumával a szerkezet-meghatározás területén.

Összefoglalva megállapítható, hogy az SZKI sokrétű együttműködések alakított ki a TTK más intézeteivel, melyeknek keretében elsősorban új anyagok szintézisével és szerkezetvizsgálatokkal járul hozzá a társintézetek kutatásaihoz. A rendszeresen megrendezésre kerülő Szerves Kémiai Szemináriumok, melyekre a teljes kutatóközpont megkapja a meghívást, kitűnő fórumot biztosítanak arra, hogy az SZKI-ben folyó kutatási irányokat a társintézetek megismerjék, és ezzel tovább szélesedő, központon belüli együttműködés valósuljon meg.

MTA TERMÉSZETTUDOMÁNYI KUTATÓKÖZPONT

ANYAG- ÉS KÖRNYEZETKÉMIAI INTÉZET

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

telefon: (1) 438 1130; fax: (1) 438 1147

e-mail: szepvolgyi.janos@ttk.mta.hu; honlap: <http://www.ttk.mta.hu>

I. A kutatóhely fő feladatai 2012-ben

Az intézet fő feladata 2012-ben magas színvonalú kémiai és interdiszciplináris kutatások végzése volt az anyagtudomány és anyagtechnológia, valamint a környezeti kémia kiemelt területein. Kutatómunkájukban a felmerülő tudományos kérdésekre komplex módon, többféle elméleti, kísérleti és vizsgálati módszer együttes alkalmazásával keresték a válaszokat.

A kutatási témák kiválasztásakor kiemelt figyelmet fordítottak a tudományos újszerűség mellett a gyakorlati vonatkozásokra is. Több témájukban az anyagtudományi és a környezetkémiai vonatkozások együttesen jelennek meg.

Anyagtudományi kutatásaikban a szerkezeti anyagok kémiai és szerkezeti jellemzőinek meghatározása, a kialakulásukhoz vezető folyamatok tanulmányozása mellett foglalkoztak különleges funkcionális anyagok előállításai módszereinek és alkalmazási lehetőségeinek kutatásával.

Környezetkémiai kutatásaikban a környezeti károk megelőzésére, illetve felszámolására alkalmas eljárások kifejlesztésére összpontosítottak, összekapcsolva ezt a melléktermékek és hulladékok értékes termékekké történő átalakításával. Fontos tématerület az intézetben a megújuló energiaforrások, valamint az újszerű energiátárolási és hasznosítási eljárások kutatása is.

Az intézet intenzív kapcsolatokat tart fent a hazai oktatási intézményekkel, munkatársai mind a graduális, mind a posztgraduális képzésben részt vesznek. Ezen túlmenően a BME-n és a Pannon Egyetemen kihelyezett kutatási részlegeket működtetnek.

II. A 2012-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Felületmódosítás plazmakémiai módszerekkel

Plazma-alapú ionimplantációval módosított PET és PA6 műszaki polimereken mélységfüggő kémiai változásokat észleltek, illetve javulást tapasztaltak a csúszósurlódási tulajdonságokban. Poláris funkciós csoportokat alakítottak ki dielektromos akadálykiszüléssel keltett levegőplazmával polipropilén felületén, valamint nitrogén plazma-alapú ionimplantációval hálószerkezetű üvegszerű szén felületén, lehetővé téve ezen anyagok újszerű felhasználási lehetőségeit.

XP spektroszkópiával jellemezték a kiindulási és a módosított polikaprolakton fóliák felületi rétegét. Megállapították, hogy a kisnyomású plazmás kezelés hatására a karboxil csoportok részlegesen hidroxil csoportokká alakíthatók, ami növeli a felület nedvesíthetőségét és hatékonyan elősegíti az oszteoblaszt sejtek adhézióját. Ugyanakkor a kezelt filmek továbbra is enzimatikusan lebonthatók maradnak. Hasonló kémiai átalakulásokat figyeltek meg poliuretán aktív-erős plazmás kezelését követően. A megnövekedett nedvesíthetőséget ez esetben is OH csoportok kialakulásához rendelték.

Kemometriai módszerek alkalmazása

Kemometriai módszerek segítségével rangsorolták és csoportosították a policiklusos aromás szénhidrogének Lee-féle retenciós indexeinek előrejelzésére szolgáló modelleket. Osztályozták a hazai ásványvizeket háromféle analitikai módszer adatait használva. A kifejlesztett módszer segítségével ásványvizek hamisítását lehet meggátolni.

Modellezték vízben oldott szerves anyagok szorpcióját különböző hordozókon, meghatározták a tüben történő újfajta extrakciós technika optimális paramétereit, és előrejelezték az átfolyási sebességet és az extrakciót jellemző C-paramétert. A retenciót előrejelezni képes modellek rangsorolása és csoportosítása az EU prioritási listáján szereplő, mérgező, és rákkeltő policiklusos aromás szénhidrogének kromatográfiás elemzését segíti. Az újfajta extrakciós technika gyorsítja és költséghatékonyá teszi a környezetvédelmi fontosságú szerves szennyezők elemzését.

Az ammónium-paravolframát előállítás szilárd-gázfázisú heterogén reakcióval

A kidolgozott eljárással ammónium-paravolframátot (APT), $(\text{NH}_4)_{10}[\text{H}_2\text{W}_{12}\text{O}_{42}] \cdot n\text{H}_2\text{O}$ -t állítanak elő úgy, hogy volfrámtartalmú port, előnyösen WO_3 -at, NH_3 és H_2O gőzzel érintkeztetnek. Az eljárás szobahőmérsékleten is alkalmazható, és mikrométer alatti szemcseméretű APT-t eredményezhet. A körülmények változtatásával szabályozható a termék kristályvíztartalma.

Nanoméretű szilícium-karbid előállítása termikus plazmában

Nanoméretű szilíciumkarbid rádiófrekvenciás (RF) termikus plazmában történő szintézisét vizsgálták SiO_2 és szén prekursorokból kiindulva. Meghatározták a maximális kihozatalhoz tartozó optimális működési paramétereket, valamint eljárást dolgoztak ki a kapott szilícium-karbid tisztítására. Laboratóriumi vizsgálataikra alapozva gyártási technológiát dolgoztak ki, és külföldi partnerekkel együtt egy komplex félüzemi gyártóegységet terveztek és építettek meg Olaszországban. A gyártási technológia előnye, hogy egy, az autógumik pirolízisekor keletkezett melléktermék (korom) újrahasznosítását teszi lehetővé. Vizsgálták az eljárás során kapott SiC por szinterelését tömbi termék előállításához. Megállapították, hogy olvadákfázisú szintereléssel SiO porból közel 100%-os elméleti sűrűségű kerámia állítható elő. Technológiát dolgoztak ki a szén szennyezőt tartalmazó SiC szinterelésére is.

Mikrokapszulák kialakítása

Eljárást dolgoztak ki olyan nano- és mikrorészecskék előállítására, amelyek vagy maganyagukban hatóanyagot tartalmazó kapszulák, vagy szilárd mátrixban elosztatott hatóanyagot tartalmazó gömbök. Bizonyították, hogy öngyógyító korrózióvédő bevonatokat lehet előállítani antikorróziós anyagot tartalmazó mikrokapszulák felhasználásával. A kapszulákba ezüst nanorészecskéket építve s ezeket bevonóanyagban elosztatva pedig biolerakódást gátló tulajdonságú festékeket kaptak.

A nem toxikus monomerekből felépülő homo- és ko-poli-(β -almasav) és származékainak szintézise lehetővé tette szintetikus oligomerek és polimerek előállítását, amelyekbe az almasavon kívül bizonyos ko-monomereket lehet beépíteni. Ezek természetes körülmények között (vizes oldatban, testszövetben) bekövetkező hidrolízisekor a testbarát almasavon kívül előre meghatározott tulajdonságú (gyulladáscsökkentő, mikroorganizmusok szaporodását gátló) anyagok válnak szabaddá, és fejtik ki hatásukat.

A biológiailag lebomló poli-almasav származékainak gyógyszerhordozóként való alkalmazása egyre növekvő fontosságú. A szintézis körülményeinek változtatásával kívánt tulajdonságú polimereket állítottak elő.

Szuperkondenzátorok fejlesztése

A felületre merőlegesen növesztett 80 µm hosszú szén nanocsövek (CNT) alkotta „sűrű erdő” szintézisét dolgozták ki alumíniumra a Drezdai Fraunhofer Intézettel és Drezdai Műszaki Egyetemmel együttműködésben. Az atmoszférikus nyomású CVD technológián alapuló eljárás folyamatos, szalagszerű, nagy mennyiségű gyártásra is alkalmas. Két különböző katalizátorösszetétel (Fe-Co és Fe-Mo) hatását tesztelték, és megvizsgálták, hogyan befolyásolja a katalizátor összetétele, az alkotók koncentrációja a szén nanocső erdő morfológiáját, sűrűségét, valamint az így előállított elektródok töltéstároló képességét. A CNT elektródokból készített szuperkondenzátorok fajlagos kapacitása, a katalizátor minőségétől függően 25.6 – 61.2 F g⁻¹; a tényleges belső ellenállása 0.42 – 0.15 mΩ g. Az ilyen elektromos tulajdonságú anyagok megfelelnek a nagy teljesítménysűrűségű szuperkondenzátorokban való alkalmazás követelményeinek.

Aranybevonatok készítése térbeli szilícium struktúrákon

Három dimenziós Si(111) és Si(100) struktúrákon galvanikus helyettesítés módszerével arany vékonyréteg bevonatokat alakítottak ki. Eutektikus kötést alkalmaztak a rétegek adhéziójának növelésére. A felületi rétegek orientációjának változását XRD módszerrel vizsgálták. Az eredmények alapján képet kaptak az adhézió erősségét elősegítő jellemzőkről, továbbá a rétegek elektródbevonatként történő alkalmazhatóságáról is. Fotoreziszt technológiával strukturált felületeken is alkalmazták a galvanikus helyettesítéssel történő arany leválasztás módszerét, és meghatározták a fotoreziszt/arany határfelületen kialakuló réteg egyenletlenségeit befolyásoló technológiai paramétereket.

Poliolefinek szerkezet-tulajdonság összefüggéseinek feltárása és tulajdonságainak módosítása

A kutatócsoport a témát két nagyvállalattal (TVK, Magyarország; Borealis, Austria) együttműködésben folytatta, ami biztosította az eredmények gyakorlati hasznosulását. Új stabilizátor rendszereket fejlesztettek ki, amelyek új multifunkciós stabilizátorok alkalmazásán alapulnak. Kutatást indítottak szabályozott leadású, nanocső hordozóval rendelkező, természetes vegyületekből álló stabilizátor rendszer kifejlesztésére. A Borealis céggel folytatott együttműködésben elveket dolgoztak ki a természetes erősítőszálat tartalmazó többkomponensű polipropilén kompozitok szerkezetének szabályozására, és megállapították a kompozitok szerkezete és tulajdonságai közötti összefüggéseket. Megállapították, hogy az alkalmazott száakkal csak korlátozott ütésállóság érhető el, és irányelveket dolgoztak ki a törési ellenállás növelésére. Az eredmények alapján előkészületben van egy szabadalmi bejelentés összeállítása.

Természetes és szintetikus polimerek és társított rendszereik

A természetes erősítőanyagot, töltőanyagot tartalmazó műanyagok kutatása ebben az évben elsősorban a PLA/fa kompozitok deformációs és tönkremeneteli mechanizmusának vizsgálatára irányult. Megállapították, hogy ellentétben az irodalmi állításokkal a PLA és a lignocellulóz erősítőanyagok közötti kölcsönhatás erős. Új kapcsolóanyagok alkalmazásával tovább növelték a határfelületi adhéziót ezekben a kompozitokban. Az erős adhézió miatt a fa törése a kompozitok szilárdságát meghatározó döntő tényező, ezért fenolgyanta impregnálással javították azt. Megállapították, hogy esetenként szerkezeti tényezők is befolyásolhatják a kompozitok szilárdságát. A korábban kidolgozott természetes szállal erősített keményítőtől készült táprudak szabadalmaztatása folyik. 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.

Heterogén katalitikus Wacker-eljárás

Kutatásaik a homogén fázisú oxidációs folyamat (közismert nevén Wacker-eljárás) heterogén katalitikus körülmények között történő megvalósítására irányulnak. A projekt célja nagy aktivitás mellett nagy szelektivitással működő, heterogenizált Wacker katalizátor kifejlesztése. Munkájuk célja alkének szelektív katalitikus oxidációjában felhasználható, újfajta katalizátorok előállítása és hatásmechanizmusuk megértése volt. A katalizátorok hordozójaként pillérrel kitámasztott réteges szerkezetű anyagokat (agyagásványokat, réteges kettős hidroxidokat), valamint nanoanyagokat (V_2O_5 nanocsövek, V_2O_5 nanorudak) alkalmaztak. A hordozók felületére rögzítették az oxidációs reakcióban aktív fázist, nevezetesen palládiumot és vanádium-oxidot. Megállapították, hogy a katalizátorokon az alkén oxidáció nagy konverzió mellett magas aldehid, ill. karbonsav szelektivitással játszható le. Katalitikus eljárással csökkenteni lehet fenti termékek előállításakor a káros melléktermékek keletkezését. Katalizátoraikon részletesen vizsgálták az etilén acetaldehiddé alakítását. Azt találták, hogy az acetaldehid termék közel 100%-os szelektivitással képződik, igen magas konverzió mellett. Eredményeik bizonyítják, hogy a Pd/vanádium-oxid redoxi rendszer az alkén-oxigén-víz reaktáns elegyre fejt ki a katalitikus hatást. Rendezett szerkezetű hordozó felületére rögzítve a redoxi rendszert kimagasló katalitikus aktivitás érhető el.

Nanopórusos szilikátok bioaktív molekulák hordozására és kontrollált kibocsátására

A szabályos, rendezett pórusokkal jellemezhető nanopórusos szilikátok, mint például az MCM-41 vagy SBA-15 bioaktív molekulák tárolására és szabályozott kibocsátására alkalmas hordozóanyagok. Az amino-, vagy karboxil csoportokkal felületmódosított szilikátok nagyobb mennyiségű hatóanyag tárolására képesek, mint a módosítatlan pórusos anyagok, és bioaktív hatóanyag kibocsátásuk is lassúbb. Megfelelő organoszilánok és szintézismódszerek kidolgozásával organofil funkciókat tudtak kapcsolni a hordozó felületén található -SiOH csoportokhoz. Kutatásaik az organofil módosítási eljárások megalapozására és optimalizálására irányultak. Azt találták, hogy a szilícium-dioxid nanorészecskéken kialakított különböző tulajdonságú hidrofil polimer bevonatok kedvezően befolyásolják a hatóanyag kibocsátási jellemzőket. Az elkészült kompozit hordozókat elsősorban gyulladáscsökkentő anyaggal (ibuprofen) vizsgálták, de antibiotikum molekula, mint például a szulfadiazin adszorpcióját is tanulmányozták. Kompozit anyagaik biológiai hasznosíthatóságát citotoxikológiai vizsgálattal is tesztelték, és megállapították, hogy a biológiailag inert szilikátok biokompatibilitása a funkciók beépítésével nem romlik, továbbá, hogy a polimer bevonatok is kedvező hatásúak. Kutatásaik új típusú nanomedicina termékek kifejlesztését alapozzák meg.

Reakciókinetikai, reakciódinamikai és fotokémiai kutatások

Lézeres reakciókinetikai kísérletekkel meghatározták az OH-gyök és a bioüzemanyagként javasolt γ -valerolakton (GVL) gázfázisú elemi reakciójának sebességi együtthatóját a hőmérséklet függvényében. Eredményeiket elsőként közölték a szakirodalomban. A sebességi együttható nagy érték, ami azt jelzi, hogy GVL reaktivitása hasonló az alifás észterekéhez, és a légkörben gyorsan lebomlik.

Folyadékfázisban végzett fotofizikai kísérleteikben a 9,10-bis-(feniletin)-antracén fluoreszcenciás tulajdonságainak és az oldószer törésmutatójának kapcsolatát tanulmányozták. Eredményeik alapján egyszerű, általános eljárást javasoltak a fluoreszcencia kvantumhatásfok meghatározásánál szükséges törésmutató-korrekciónak elvégzésére. A korrekció fontos például a nagyérzékenységű fluoreszcenciás analitikai eljárásokban.

Három, magas szintű elméleti módszer együttes alkalmazásával vizsgálták a belsőégésű motorok szénhidrogén üzemanyagát modellező metán elektron ütközések által kiváltott

disszociációját. Megállapították, hogy a metán molekula a gyújtást előidéző elektromos kisülésben keletkező nagysebességű elektronokkal ütközve elsősorban a nagyon reaktív CH₃ gyökre és H-atomra bomlik, amelyek képesek az üzemanyag/levegő keverék robbanására vezető láncreakciók elindítására.

Sűrűségfunkcionál-elméleti és multikonfigurációs ab initio számítások segítségével feltárták az Fe(II) 'be- és kikapcsolható' ('switchable') tetrazil-, bipyridil- és terpiridil komplexeinek számos, a spin-átmenetet meghatározó tulajdonságát. Az ilyen átmenetifém komplexeket jövőbeli nagy sűrűségű mágneses adathordozó- és más molekuláris eszközök lehetséges anyagaként tartják számon.

Elektrokatalitikusan aktív Pt₃Sn ötvözet fázis kialakítása

A Pt₃Sn fázis köztudottan igen aktív a CO elektrooxidációjában, és katalizálja az etanol elektrooxidációjának kezdeti lépéseit is. Polimer elektrolit membrán (PEM) tüzelőanyag-cellák anód elektrokatalizátorainak fejlesztése során csaknem teljesen tiszta, közel sztöchiometrikus összetételű, elektrokatalitikusan aktív fcc Pt₃Sn ötvözet fázist sikerült kialakítani aktív szén hordozón a Pt felületén adszorbeált hidrogén és Sn(C₂H₅)₄ közötti irányított felületi reakciókkal (CSRs). XRD felvételek bizonyították, hogy a Pt₃Sn ötvözet fázis mennyisége a CSR körülményeinek hangolásával szabályozható. A hidrogénben történő in situ kezelés hatására kizárólag kétfémes Sn-Pt ötvözet fázis alakul ki az XPS eredmények alapján, ami arra utal, hogy a Pt/C katalizátor módosítása Sn(C₂H₅)₄-vel szelektív, azaz nem kerül Sn az aktív szén hordozó felületére. Az így előállított kétfémes katalizátor hatékonyan működött mind a CO, mind a metanol elektrooxidációjában. Ön hozzáadására a CO oxidáció kiindulási potenciálja 500 mV-tal a negatívabb tartományok felé tolódik el, jelezve, hogy az önnel módosított minták CO toleranciája lényegesen jobb, mint a Pt/C katalizátoré. Nyilvánvalóvá vált, hogy a Pt₃Sn (fcc) fázis CO toleranciája és metanol elektrooxidációban mutatott aktivitása meghaladja a PtSn (hcp) fázisét.

Cérium-oxid rétegek növesztése modell felületeken

Cérium-oxid rétegek növekedésének Si(111) hordozón történő vizsgálata során kimutatták, hogy a cérium-oxid szobahőmérsékleten is reakcióba lép a Si(111) 7x7 felülettel, aminek eredményeképpen viszonylag vastag, szilikát jellegű réteg alakul ki a felületen. A rétegben a Ce³⁺ ionállapotok nagyon stabilak, 10⁻⁷ mbar alatti nyomású oxigénben nem oxidálhatók tovább. Az átmeneti rétegre reaktív párologtatással felületi rendezettséget nem mutató cérium-oxid réteg növeszthető, amelyben a domináns ionállapotok vákuumban illetve oxigénben végzett hőkezeléssel Ce³⁺ és Ce⁴⁺ között változathatók. A Si(111) felület és a cérium-oxid réteg között epitaxiális CaF₂ közbülső réteg elhelyezésének segítségével 1x1-es LEED képet mutató, majdnem kizárólag Ce⁴⁺ ionállapotokat tartalmazó cérium-oxid réteg növeszthető. A réteg szabad felületén a rendezetlen rétegnél drasztikusan kisebb mértékben lehet vákuumban végzett hőkezeléssel Ce³⁺ típusú hibahelyeket létrehozni, oxigénben végzett hőkezeléssel pedig eltüntetni.

Vizsgálatok műanyagok pirolitikus újrahasznosítására

Megállapították, hogy a brómozott epoxi égésgátlót, PVC-t és PET-et is tartalmazó hulladékok pirolízisekor a keletkező pirolízisolaj bróm- és klórtartalma jelentősen megnő. A halogéntartalmú komponenseket azonosították. Kimutatták, hogy a nitrogéntartalmú polimerek pirolízistermék összetételét nagymértékben befolyásolja a savas Y zeolitok jelenléte és mennyisége. A poli(N-vinilimidazol) termikus stabilitását és hőbomlását vizsgálva megállapították, hogy a polimer hőbomlása 340–500°C tartományban, egy fő lépésben megy végbe, a hőbomlás két főterméke az 1H-imidazol és az 1-vinilimidazol.

Biomassza anyagok optimális hasznosítását elősegítő kutatások

Gőzrobbantással kezelt fa és lágyszárú növények termoanalitikai vizsgálatával megállapították, hogy a gőzrobbantás hatással van a minták kémiai összetételére és a szerkezetére is. A hemicellulóz- és alkáliion-tartalom csökkenését mutatták ki a kezelt mintákban. A lignin molekulák funkciócsoportjaiban történt változásokat a metoxi-csoportok demetilizálásával és az alkil-csoportok lerövidülésével értelmezték. Reakciókinetikai modellezéssel felderítették egy mostanában terjedő biomassza tüzelőanyag, a részlegesen elszenesített fa reaktivitásának függését az előállítás körülményeitől.

Szennyezett talajvizek kármentesítése

A TVK Rt.-vel kötött kutatás-fejlesztési szerződés keretében olajjal (elsősorban poliaromás vegyületekkel) erősen szennyezett felszín alatti vízkészletek in-situ kezelésére, a szennyezés horizontális terjedésének gátlására irányuló kutatásokat végeztek. Az erősen lúgos szennyezett talaj/talajvíz célzott savas kezeléseivel jelentős mértékben sikerült csökkenteni a szennyezés migrációját. A laboratóriumi szintű vizsgálatok eredményei alapján a TVK Rt.-vel folytatandó egyeztetéseket követően várhatóan komplex kutatási terv kidolgozására és elindítására nyílik lehetőség.

b) Tudomány és társadalom

2009 és 2012 között az „Új biológiai szennyvíztisztító berendezések és technológia kutatása és fejlesztése” elnevezésű, Kutatási és Technológiai Innovációs Alap által támogatott konzorciális pályázat (TECH-09-A4-2009-0115 RFRSY09) feladatainak megvalósításában vettek részt. A projekt eredményeiről az Élet és Tudomány folyóirat 2012. július 18-án megjelenő számában (900–901 old.), valamint az INNOTÉKA magazin júniusi számában egy-egy ismeretterjesztő cikk jelent meg a nagyközönség számára, melyek tartalma a következő:

Az Európai Unió irányelve szerint 2015-ig minden tagállamnak gondoskodnia kell a szennyvíz biológiai és fizikai-kémiai tisztításáról. Az intézet karöltve a Budapesti Műszaki Egyetem kutatóival és cégekkel (Uwa Tech Környezet- és Víztechnika Kft., Euro-Open Kft., Multiprojekt Kft., Kémia Technológiai Transzfer Kft.) gazdaságos, környezetbarát, korszerű technológiát fejlesztett ki, amely alkalmas a kis lélekszámú falvak (~2000 fő), tanyák, üdülőkörzetek szennyvizének biológiai tisztítására. Az innovatív megoldások sorát tartalmazó kísérleti szennyvíztisztító telepet a Balaton-felvidéki Rezi községben építették fel.

A konzorcium az úgynevezett merülőtárcsás technológiát fejlesztette tovább. A fejlesztés központi eleme egy csillagkerék, amely 120 darab perforált, adszorbens szemcsékkel megtöltött műanyag csövet tartalmaz. Az aktív biofilmmel bevonódott, forgatott kerék egy harmada folyamatosan a szennyvízben, míg kétharmada a levegőben van, így a biofilm a levegőből az oxigént spontán módon veszi fel kevesebb külső energia igénybevételével, mint ami a hagyományos eleveniszapos bioreaktorok levegőztetéséhez szükséges. A konzorcium a bioreaktoron kívül további részegységeknél (iszapleválasztó, membránszűrő, víz szagtalanító/fertőtlenítő, oxigénes telítő) is új, a jelenlegi eljárásokban használt megoldásoknál hatásosabb és gazdaságosabb módszert alkalmazott. A technológiai sor végén az ivóvízzel összemérhető minőségű tisztított szennyvíz lép ki. A Rezi-ben működő kutató-fejlesztő-oktató-demonstrációs létesítményt 2012 végén le kellett állítani, mert nem sikerült a környék nagy vízközmű szolgáltatásainak támogatását az üzemeltetéshez megszerezni.

Interjú készült a hidrogén-energetikai témakörben az MTA TTK Anyag- és Környezetkémiai Kutatóintézetben folyó tüzelőanyag-cellákkal kapcsolatos kutatásokról. Az interjú a Magyar Hidrogén és Tüzelőanyag-cella Egyesület 2012 őszi hírlevelében jelent meg.

A BME nyílt napján demonstrációval és laborlátogatással népszerűsítették a polimer kémiát és fizikát a BSc, illetve MSc képzésre jelentkező tanulók és hallgatók számára.

A Tinnyei Általános Iskola és a budapesti Berzsenyi Gimnázium diákjai bemutatóval egybekötött laborlátogatásokon vettek részt az intézetben.

Az MTA Magyar Tudomány Ünnepe Tárt Kapuk rendezvényeinek sorában négy ismeretterjesztő előadást tartottak a felületkémia, a hőmérsékletmérés, a szuperkapacitások és az archeometria témákban.

A kémia és a régészet kapcsolata témában több szóbeli és írásbeli ismeretterjesztés történt: a Magyar Tudomány Ünnepe 2012 alkalmából hangzott el egy előadás, a Magyar Kémikusok Lapjában jelent meg egy dolgozat és a Delta című tudományos ismeretterjesztő TV sorozatban a Habán kerámiák archeometriai kutatását mutatták be.

Az intézet negyedik alkalommal szervezte meg az „AKI Kíváncsi Kémikus” nyári kutatótábort. Az egyhetes kutatótáborban 24, a kémia iránt érdeklődő, tehetséges középiskolás diák 10 témában folyó kutatásba kapcsolódhatott be.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2012-ben

Hazai kapcsolatok

Az intézet hazai kapcsolatrendszerében az egyetemek töltenek be nagyon fontos szerepet. A közös kutatások szervezeti kereteit három egyetem esetében közös laboratóriumok adják: Az intézet Alkalmazott Polimer Fizikai Kémiai Osztálya a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék közös szervezeti egysége, a Pannon Egyetem Műszaki Informatikai Karának Műszaki Kémiai Intézetével közös professzori laboratóriumot működtetnek, az Eötvös Loránd Tudományegyetem Kémiai Intézetével pedig a 2010-ben új közös laboratórium, a Környezeti Kémiai-fizikai Laboratórium kezdte meg munkáját.

A Pannon Egyetemmel funkcionális nanorészecskék témában dolgoznak együtt. Porfirinkomplexek szerkezetét és fotofizikáját vizsgálták. Az intézetben végzett kvantumkémiai számítások segítségével értelmezték az egyetemen előállított vízoldható porfirin-fémion komplexek tulajdonságait. Gázolajok aromástartalmának csökkentése és/vagy folyási tulajdonságainak javítása katalitikus úton témában szénhidrogének izomerizálására alkalmas Pt-tartalmú bifunkciós katalizátorokat szintetizáltak.

A Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki Karával műanyagok szerkezet – tulajdonság összefüggéseit kutatják. A BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszékkel közös OTKA projekt keretében olyan ismeretekhez jutottak, amelyek hozzájárulnak a cellulóz alapú bioetanol gyártás hatékonyabbá tételéhez. A BME Gépészmérnöki Kar, Energetikai Gépek és Rendszerek Tanszékkel energetikai célokra alkalmazható biomassza anyagok hőbomlási és égési tulajdonságait határozták meg.

Az Eötvös Loránd Tudományegyetemmel léggörkémiai és fotokémiai kutatásokat folytatnak. Nem formális együttműködésben a Semmelweis Egyetemmel elsősorban a gyógynövényekkel és azok fémiontartalmával kapcsolatban végeztek analitikai vizsgálatokat, az Óbudai Egyetemmel nanorétegek és nanokapszulák kialakításával kapcsolatos témákkal foglalkoznak.

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, a Semmelweis Egyetem és az Óbudai Egyetemen. Az ELTE, a BME, a

Pannon Egyetem és az Óbudai Egyetem hallgatóinak TDK, BSc, MSc és PhD munkáit irányították, nyári szakmai gyakorlatra fogadták őket.

Az egyetemek mellett ugyancsak fontosak a kapcsolatok az MTA kutatóhálózatán belüli intézetekkel, különösen a Természettudományi Kutatóközpont Molekuláris Farmakológiai Intézetével, a Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Intézettel és a Szerves Kémiai Intézettel. A kutatásokat az intézeti források mellett közösen elnyert OTKA pályázatokból fedezik, az eredmények jelentős számú publikációban mutatkoznak meg. Az MTA TTK-n kívül a Wigner Fizikai Kutatóközponttal a Fe(II) komplexek spin-állapotai közti átmeneteket kutatják.

Az utóbbi években megélénkültek a kapcsolatok a múzeumokkal is. Különböző muzeális értékű fémtárgyak és kerámiák összetételét határozták meg archeometriai kutatások céljából a Pest Megyei Múzeumok Igazgatósága, a Szépművészeti Múzeum és a Magyar Nemzeti Múzeum megbízásából.

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

Mintegy húsz magyarországi és néhány külföldi kis- és középvállalat megbízásából az intézet kutatási és fejlesztési feladatokat, méréseket végzett. Többen közülük igénybe vették az intézet akkreditált laboratóriumának szolgáltatásait. Kilenc nagyvállalattal – melyek közül négy külföldi, illetve 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 vagy szabadalmakban mérhetők.

Nemzetközi kapcsolatok

A „Hibrid nanorendszerek inverz gázkromatográfiás és kemometriai jellemzése” című témát kétoldalú akadémiai egyezmény keretében művelték a Poznani Műszaki Egyetem (Lengyelország) kutatóival közösen. A munka, amely az elmúlt években 7 közös publikációt eredményezett a gázkromatográfiás töltőanyagok csoportosítására és hasonlóságuk kimutatására irányult, és újfajta extrakciós eljárás kifejlesztéséhez vezetett. Különböző kemometriai és analitikai módszerek összehasonlítását az Újvidéki Műszaki Egyetemmel végezték. A kapcsolattartást TÉT együttműködés biztosította.

A kolozsvári Babeş-Bolyai Tudományegyetemmel az „Erdélyi borok származásának vizsgálata nyomelem-összetétel alapján” és a „Természetes savas források összetett kémiai és algológiai vizsgálata” témában dolgoztak együtt.

Biobutanol extraktív fermentációjában egy kombinált módszert hoztak létre a kínai New Energy Co. baktériumtörzseivel és az intézetben kidolgozott szeparációs technológiával. Az indiai Jodhpur Egyetem kutatóival kétoldalú akadémiai egyezmény keretében permanganát és kromát vegyületek és szerves anyagok reakcióinak kinetikáját jellemezték, továbbá részt vettek indiai PhD-hallgatók oktatásában is.

Szuperkondenzátorok fejlesztése a célja egy újonnan indult FP7 projektnek. Ennek keretében egy korábbi sikeres Európai Unió által finanszírozott témát folytatnak a drezdai Fraunhofer Institute for Material and Beam Technology és a Drezdai Műszaki Egyetem kutatóival közösen.

Több éve eredményesen dolgoznak együtt az Ulmi Egyetemmel. Különböző fém/folyadék modell rendszereken tanulmányozták, hogy az elektrokémiai kettősréteg átrendeződése milyen időfüggést mutat. Kombinált működésű atomerő-mikroszkópia módszerének kialakítása, ill. tökéletesítése céljából nagy áramérzékenységű bipotenciosztátot fejlesztenek ki a Berni Egyetem munkatársaival együttműködve.

A „Légkörkémiá és éghajlatváltozás: halogén- és oxigéntartalmú szerves molekulák reakciókinetikai és fotokémiai vizsgálata” című témában elnyert Magyar–görög TÉT pályázatkeretében 2013-ban kezdik meg munkájukat.

Molekulák elektron-ütközés hatására történő disszociációjának elméleti vizsgálata témában több évtizede működnek együtt az USA-beli Northwestern University kutatóival. Megállapították, hogy a belső égésű motorokban a gyújtószikra hatására milyen arányban képződnek a különböző reaktivitású gyökök.

A Bécsi Egyetemmel közösen végzett számítások biztosították az elméleti hátteret a Stony Brook University-n (New York, USA) végzett ún. „photon locking” eljárás első kísérleti megvalósításához vibrációs hullámfüggvények esetén. Ugyancsak molekuladinamika számításokat végeztek a Bécsi Egyetem mellett a Dán Műszaki Egyetem kutatóival közösen. Fe(II) komplexek spin-állapotai közti átmeneteket vizsgáltak elektron-szerkezeti számításokkal. A munkában hazai kutatók mellett részt vettek a spanyolországi Universitat Rovira i Virgili munkatársai is.

A műanyagok kutatása területén több nemzetközi projektben vettek részt. Gyógyászatban használt polimerek szerkezet-tulajdonság összefüggéseivel foglalkoztak egy TÉT megállapodás keretein belül. (Az együttműködő partner a University of Twente volt.) Az Európai Unió által finanszírozott témában PP és PLA/fa kompozitokat állítottak elő és jellemezték a Pisai Egyetem és további 14 európai intézmény kutatóival közösen. Újgenerációs PP/fa kompozitok fejlesztésére, az ütésállóság növelésére kaptak megbízást a Borealis GmbH-től. PA6/montmorillonite nanokompozitok deformációs mechanizmusát kutatják a Liège-i Egyetemmel együttműködésben.

Szintetikus polimerek és biomassza anyagok hőbomlását tanulmányozzák adalékanyagok és katalizátorok jelenlétében. Kimutatták, hogy milyen veszélyes anyagok keletkeznek brómtartalmú égésgátlót és klórt tartalmazó polimerekből. A munkát az Indian Institute of Petroleummal közösen végzik.

Több mint tíz éve tartó közös munkában biomassza anyagokat vizsgálnak a Norwegian University of Science and Technology munkatársaival. A biomassza anyagok faszénként történő hasznosításával a University of Hawaii-val dolgoznak együtt.

Az intézet egyik fiatal kutatója utóégető katalizátorok fejlesztésén dolgozik Franciaországban a caeni egyetemen (Université de Caen). A kifejlesztett katalizátorok aktivitását szénhidrogén oxidációs reakcióban tanulmányozzák.

Mo-V alapú vegyesoxid katalizátorokat terveztek és állítottak elő a Clariant Produkte GmbH-val kötött kutatási szerződés keretében. A két szabadalmat eredményező kutatásban akrolein szelektív oxidációjában közel 95 % hozammal sikerült akrilsavat előállítani. A novoszibirszki Katalízis Intézet munkatársaival magyar–oroszl kétoldalú akadémiai egyezményben hordozón rögzített heteropolisav katalitikus aktivitását módosították, és alkalmazhatóvá tették szerves szintézisekhez.

Magyar–spanyol kétoldalú akadémiai egyezmény biztosította a kapcsolattartás költségeit a direkt metanol tüzelőanyag cellák elektro-katalizátorainak fejlesztéséhez. Az Instituto de Catálisis y Petroleoquímica kutatóival olyan fcc Pt₃Sn ötvözet fázist sikerült kialakítani, amely aktívnak bizonyult CO és metanol elektrooxidációjában. Egy korábbi TÉT egyezmény során megkezdett munka folytatásaként a Santa Fe Egyetem Vegyészmérnöki Karával közösen előállított Sn-Pt/Al₂O₃ katalizátorokkal kapcsolatban azt találták, hogy a Sn-Pt ötvözet Lewis- sav típusú SnO_x oxidok jelenlétében kedvező katalitikus viselkedést mutat az n-bután dehidrogénezésében.

IV. A 2012-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Hazai pályázatok

A „Biomimetikus nanoszenzorok alkalmazása proteolitikus folyamatok követésére” című OTKA PD-pályázat keretében fehérjebontó enzim specifikus aktivitásának vizsgálatában alkalmazható, spektrofotometriás enzimaktivitás mérések alapjául szolgáló kromofór funkciós csoporttal ellátott peptid szubsztrát analógok arany felületen történő rögzítésére végeztek kísérleteket. Spektrofotometriai és elektroanalitikai detektációban is alkalmazható funkciós csoportok esetében lehetőség van az oldatfázisban lévő, illetve a rögzített peptidok hasítása nyomán érzékelhető, az enzimaktivitás mértékére jellemző abszorbancia és elektrokémiai jelek összehasonlító mérésére. A pályázat teljes támogatási összege 11 M Ft, ebből a 2012-ben felhasználható rész 4 M Ft volt.

Az „Olefinok szelektív katalitikus oxidációja Pd/vanádium-oxid katalizátorokon” című OTKA pályázat első évében a résztvevők kiépítették a Wacker katalizátorok aktivitásának mérésére szolgáló katalitikus rendszert, valamint kidolgozták a reakciótermékek azonosítására szolgáló analitikai módszereket. Három csoportba sorolható katalizátorsorozatot szintetizáltak: oxidhordozós katalizátorok, réteges szerkezetű katalizátorok, V_2O_5 nanocső alapú katalizátorok. Jellemezték a katalizátorokat, és vizsgálták katalitikus aktivitásukat az etilén parciális oxidációjában, víz jelenlétében. Eredményeiket egy előadásban és két poszterben ismertették. Az eddigi munkákból egy közlemény jelent meg, kettő előkészítés alatt áll. A pályázati támogatás mértéke: 29 M Ft, a 2012-ben felhasznált összeg: 11 M Ft.

A „Sokkomponensű modellkatalizátorok megújuló forrásból történő energiatermelésre: fém és fém-oxid nanoszerkezetek szinergikus hatása alkoholok átalakulásaiban” című OTKA pályázatban modellkatalizátorok készítése céljából cérium-oxid epitaxiális növesztésének lehetőségeit vizsgálták Si(111) hordozón. A szilícium és a cérium-oxid közti reakció miatt az epitaxiális rétegnövesztés feltétele egy vékony, epitaxiális CaF_2 közbülső réteg kialakítása. Meghatározták az epitaxiális, illetve a rendezetlen cérium-oxid redukciós-oxidációs sajátosságait. Megkezdődött a nikkal nanoszerkezetek kialakítása és jellemzése a cérium-oxid felületeken. Egy másik kísérletsorozatban Ti-W vegyesoxid fázis előállítása történt. A tapasztalatok alapján a TiO_2 és a rajta kialakított wolfram-oxid szilárdfázisú reakciója modellrendszerek kialakítására is alkalmas lehet. A pályázati támogatás mértéke: 17 M Ft, ebből 2012-ben 5 M Ft-ot használtak fel.

A „Magas hőmérsékletű radarelnyelő rétegek kutatása” című 2012-ben elnyert NFÜ-pályázat kidolgozása a szerződéskötést követően 2013-ban kezdődik meg, a K+F munka eredményei ezt követően jelentkeznek majd. A pályázat teljes támogatási összege 120 M Ft.

Nemzetközi pályázatok

A 2012-ben elnyert és 2013-ban induló, az Európai Unió által finanszírozott pályázat megnevezése: „FP7 Large-scale integrating project” PLIANT (Process Line Implementation for Applied Surface Nanotechnologies) című projekt célja folyamatos, nagy áteresztőképességű gyártástechnológiák kidolgozása előírt tulajdonságú nanoszerkezetek előállítására, elsősorban atmoszférikus nyomású plazma-CVD és atomi rétegleválasztás (ALD) felhasználásával. Az előállítandó termékek közül az intézet a nagy energiasűrűségű és nagykapacitású elemek és hibridkondenzátorok vizsgálatát végzi. A pályázatból a magyar félnek összesen 97000 EUR támogatás jut.

A „NANOINDENT-plus EU-FP7 THEME” megnevezésű pályázat témája nanokarcolás mérés. 2012-ben egy, már meglévő nanoindenter berendezést javítottak, és a megjavított készüléket beüzemelték. A munkát az Európai Unió 66750 EUR-val támogatta.

Az Európai Unió által finanszírozott „Magyarország-Szlovákia Határon Átnyúló Együttműködési Program 2007-2013” keretében kémiai eljárásokat dolgoznak ki a szlovák-magyar határmenti régióban keletkező élelmiszerként nem hasznosítható biomassza értékes anyaggá alakítására. A pályázat vezető partnerével a Szlovák Műszaki Egyetemmel együttműködve megkezdték a tervezett közös kutató laboratórium kialakítását, valamint egy nagynyomású átáramlásos mikroreaktor megépítését. Katalitikus vizsgálatokat végeztek szerves sav modellvegyületekkel. A növényi hulladékok feldolgozásakor keletkező savak oxigén heteroatom tartalmának katalitikus csökkentését (HDO) oktánsav katalitikus hidrogénezésével modellezték. Kidolgozták az oktánsavból képződő lehetséges termékelegy összetételének meghatározására szolgáló gázkromatográfiai módszert. Kétfémes (Cu vagy Ni és In) oxidhordozós katalizátorokat készítettek, és meglévő reaktor rendszerünk alkalmazásával katalitikus vizsgálatokat végeztek. Továbbá nitrogén heteroatomot tartalmazó szerves modellvegyületek, mint pl. propil-amin katalitikus hidrodenitrogénezését (HDN) is tanulmányozták. Kidolgozták a lehetséges termékelegy összetételének meghatározására szolgáló gázkromatográfiai módszert. Oxidhordozós Ni katalizátorokat készítettek és meglévő reaktor rendszerük alkalmazásával katalitikus vizsgálatokat végeztek. A pályázati támogatás mértéke: 381647 EUR, ebből 2012-re jutó összeg: 64045 EUR.

Ugyancsak a „Magyarország-Szlovákia Határon Átnyúló Együttműködési Program 2007-2013” fedezi a „Tejipari termékek újszerű minőségi vizsgálata – modern bioanalitikai eszközök használata” témájú pályázat költségeit. A pályázat első évében az intézet a tudományos irodalomból már ismert spektrofotometriás módszereket honosított meg és alkalmazott a vizsgált fehérjebontó enzimrendszer vizsgálatára. A kutatómunka során molekuláris biológiai és nanotechnológiai kutatások eredményeinek felhasználásával olyan szenzorfelületeket alakítottak ki, amelyek fehérjebontó enzimek mennyiségi jellemzésére alkalmasak. A magyar fél munkáját 202880 EUR-val támogatják, ebből 2012-re 51505 EUR jutott.

Az „International Visegrad Fund Grant for Mihail Trunov” megnevezésű pályázat témája optikai mikromegmunkálási módszer kifejlesztése. A pályázat keretében kakogenid bevonatokat készítettek és vizsgáltak. A pályázati támogatás mértéke: 3000 EUR.

V. A 2012-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Héberger K, Škrbić B: Ranking and similarity for QSRR models in predicting Lee retention indices of polycyclic aromatic hydrocarbons. *Analytica Chimica Acta*, 716: 92-100 (2012)
2. Veres M, Tóth A, Mohai M, Bertóti I, Szépvölgyi J, Tóth S, Himics L, Koós M: Two-wavelength Raman spectroscopy of poly(ethylene terephthalate) surfaces modified by helium plasma-based ion implantation. *Appl. Surf. Sci.*, 263: 423-429 (2012)
3. Dörfler S, Felhösi I, Kék I, Marek T, Althues H, Kaskel S, Nyikos L: Tailoring structural and electrochemical properties of vertical aligned carbon nanotubes on metal foil using scalable wet-chemical catalyst deposition. *J. Power Sources*, 208: 426-433 (2012)
4. Pajkossy T: Impedance spectra of Pt(100) in aqueous H₂SO₄ and HCl solutions around the hydrogen adsorption-desorption peak, *Z. Phys. Chem.*, 226(9-10): 935-943 (2012)
5. Keledí G, Hári J, Pukánszky B: Polymer nanocomposites: structure, interaction, and functionality. *Nanoscale*, 4(6): 1919-1938 (2012)
6. Bagdi K, Molnár K, Kállay M, Schön P, Vancsó JG, Pukánszky B: Quantitative estimation of the strength of specific interactions in polyurethane elastomers, and their effect on structure and properties. *Eur. Polym. J.*, 48(11): 1854-1865 (2012)

7. Decolatti H, Solt H, Lónyi E, Valyon J, Miró E, Gutierrez L: The role of Pd-In interactions on the performance of PdIn-Hmordenite in the SCR of NO_x with CH₄, *Catalysis Today*, 172(124): 131 (2012)
8. Herranz T, García S, Martínez-Huerta MV, Peña MA, Fierro JLG, Somodi F, Borbáth I, Majrik K, Tompos A, Rojas S: Electrooxidation of CO and methanol on well-characterized carbon supported Pt_xSn electrodes. Effect of Crystal Structure. *International Journal of Hydrogen Energy*, 37(8): 7109-7118 (2012)
9. Czégény Zs, Jakab E, Blázsó M, Bhaskar T, Sakata Y: Thermal decomposition of polymer mixtures of PVC, PET and ABS containing brominated flame retardant: Formation of chlorinated and brominated organic compounds. *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*, 96: 69-77 (2012)
10. Kótai L, Bálint Sz, Gács I, Lakatos Gy, Angyal A, Mehrotra RN: A simple method for calculation of the composition of Type I clathrate hydrates. *Z. Anorg. Allgem. Chem.*, 638: 648-651 (2012)

I. A kutatóhely fő feladatai 2012-ben

Az Enzimológiai Intézetben számos tudományterületet átfogó, interdiszciplináris kutatások folynak, melyek során mind a biológia, mind a fizika és kémia tudománya által kínált lehetőségek alkalmazásra kerülnek. A kutatóhelyen részben szerkezeti biológiai alapkutatások folynak, melyek lehetővé teszik a fizioiógias és patofizioiógias folyamatok sejt és molekula szintű értelmezését, másrészt a szerkezet biológia mellett folyamatosan bővül a kutatási tevékenység a komplex biológiai folyamatok megértését célzó rendszerbiológia irányába a proteomika és bioinformatika lehetőségeinek kihasználásával. Így többek között vizsgálja a sejtekben zajló jelátviteli utakat, a rendezetlen fehérjék működését, a komplementrendszer aktiválódási mechanizmusait molekulaszerekezeti alapon, a daganatos és neurodegeneratív betegségek kialakulásához vezető egyes folyamatok, a transzmembrán fehérjék szerepét, valamint a DNS hibajavításban szerepet játszó enzimeket.

Az intézet fontos feladatának tekinti a nemzetközileg beágyazott alapkutatás mellett az oktatást. Munkatársaik négy egyetemen tartanak előadásokat, illetve gyakorlatokat mind az alapképzésben mind posztgraduális oktatásban. Intézetük ezzel egy időben közel harminc PhD-hallgató oktatását is ellátja, akik munkájukkal nagymértékben hozzájárulnak az intézet eredményeihez.

Az intézet alapkutatási eredményeinek hasznosítására együttműködések jöttek és jönnek létre különböző kis- és nagyvállalatokkal. 2012-ben az intézet aktív módon közreműködött a Richter Gedeon Nyrt. és MEDA terápiás szerek fejlesztési projektjeiben, valamint együttműködött a Combit Számítástechnikai Kft.-vel, az Albacomp Számítástechnikai Zrt.-vel és a Valdeal Innovációs Zrt.-vel is a FIXPRED9 pályázat keretében. Fontos feladatuknak tekintik a magyar tudomány eredményeinek nemzetközi szinten történő képviselését, amit nemzetközi pályázatok résztvevőiként és nemzetközi szervezetekben viselt tisztségek útján valósítanak meg.

II. A 2012-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

A *Jelátviteli Munkacsoport* 2012-ben tovább folytatta a megkezdett sikeres kísérleteket. A munkacsoport alapvetően két ún. állványfehérjét vizsgál, ezek a Caskin és a Tks fehérjecsaldók. 2012-ben publikálták, hogy a Tks4 (HOFI) fehérje szerepet játszik az EGF jelátvitelében, részt vesz a sejtmozgás és a sejtek kiterülése szabályozásában. A Tks5 (FISH) fehérjéről elsőként mutatták ki, hogy szintén részt vesz az EGF jelpályában, ugyanis a sejtek stimulálását követően tirozin oldalláncokon foszforilálódik. Ráadásul EGF hatására a fehérje a sejtmembránhoz transzlokálódik, melyben pleckstrin homológ (PH) doménje játszik fontos szerepet. Végül sikerült publikálniuk azt az eredményüket, melyben kimutatták az EphB1 receptor tirozin kináz/Nck/Caskin1 komplex létezését, illetve azonosították a Caskin1 EphB1 kináz-függő foszforilációs helyeit. Elsőként mutatták ki továbbá, hogy egy SH3 domén tirozinton történő foszforilációja megváltoztatja a domén szerkezetét.

A munkacsoport elsősorban felfedező kutatásokat végez, így 2012-ben nem jelentettek be szabadalmat.

A *Sejt Architektúra munkacsoport* jelen kutatási eredményei bizonyították, hogy a TPPP/p25 aktív részese különböző CNS betegségek kialakulásának, mint pl. a Parkinson-kór és más szinukleinopátiák vagy a szklerózis multiplex. A TPPP/p25-tel kapcsolatos eredmények magas impaktfaktorú nemzetközi folyóiratokban kerültek publikálásra, következésképpen a TPPP/p25 úgyis, mint potenciális biomarker, a tudományos közösség érdeklődésének fókuszába került, mint azt számos visszajelzés bizonyította/bizonyítja, pl. felkérés meghívott előadónak nemzetközi konferenciákra vagy tudományos összefoglalók/könyvfejezetek megírására. Ilyen kiemelkedő esemény volt a Japán Neurológiai Társaság elnökének meghívása és vendéglátása 2012 májusában, Tokióban. Az éves nemzeti neurológiai konferencián a 6000 japán kutató mellett mindösszesen 10 európai és amerikai előadó kapott meghívást. Valójában a Tokiói Egyetem neurológusai TPPP/p25-tel kapcsolatos klinikai kutatásokat indítottak el; a konferencia megfelelő alkalmat teremtett tudományos kapcsolat kialakítására. Megemlítendő a frankfurti egyetem egyik professzora és a Szegedi Tudományegyetem neurológus professzorainak érdeklődése, akik konkrét tudományos együttműködési javaslattal keresték meg a munkacsoportot, és PD valamint HD transzgenikus állatok agymintáit, illetve szklerózis multiplexes betegek liquor mintáit küldték el a TPPP/p25-tel kapcsolatos vizsgálatokhoz. Ezeken túlmenően, két gyógyszergyár (MEDA és Richter Gedeon Nyrt.) fejezte ki érdeklődését a csoport kutatásai iránt és támogatta/támogatja azokat (ld. pályázatok/megbízások).

A FixPred projekt keretében létrehozták a génpredikciós hibák azonosítására és javítására alkalmas MisPred és FixPred honlapokat. A MisPred tizenegy biológiai dogmán alapuló módszer a génpredikciós módszerekkel rosszul megjósolt gének automatikus azonosítására. A MisPred eszközök és a MisPred adatbázis akadémiai kutatók számára hozzáférhető a <http://www.mispred.com/> webhelyen. Kifejlesztették a FixPred pipeline-t a tizenegy konfliktus alapján hibásként azonosított szekvenciák kijavítása érdekében. A tesztelést követően a Fixpred eszközöket és adatbázist is hozzáférhetővé teszik akadémiai kutatók számára.

Mutagenézis vizsgálatokkal lokalizálták a WIF-1 fehérje Wnt kötőhelyét. Az a megfigyelésük, hogy egyes mutáns fehérjékben a mutáció a fehérje Wnt5a kötését erősítette, míg Wnt3a kötését gyengítette arra utal, hogy ezek az aminosav oldalláncok alkotják a WIF-1 Wnt-specifitását meghatározó fehérje felszint.

Eljárást dolgoztak ki az izomnövekedést befolyásoló miosztatin növekedési faktor prekursorának, a nagyméretű promiosztatin fehérjének bakteriális expresszióval történő előállítására. A módszert leíró szabadalmi eljárást elindították.

A *Membránfehérje Bioinformatika Munkacsoport* a rangos, 8-as impaktfaktorú *Nucleic Acids Research folyóiratban* közölte a transzmembrán fehérjék szerkezetét összegyűjtő adatbázis (PDBTM) új, korszerűsített verzióját.

A *Fehérjeszerkezet Munkacsoport* az oldott anyagokat körülvevő vízburok kvantum kémiai leírását adta meg. Két nyilvános szervert készítettek, és elérhetővé tettek a világhálón. Az egyik fehérje szerkezetekben található kölcsönhatások megjelenítésére és elemzésére szolgál. A másik egy korszerűsített transzmembrán fehérje adatbázis kereső motorokkal. A fehérjék rendezetlen szakaszai és a rákos megbetegedésekkel kapcsolatos mutációk közötti kapcsolatokat tártak fel.

A *Genom Stabilitás Kutatócsoport* egyik fő 2012-es eredménye az ultraibolya sugárzás hatásainak vizsgálata területén született. Az ultraibolya fény által okozott tipikus DNS-károsodások közül leggyakoribb lézió a ciklobutil pirimidin dimer, melynek szintetikus formájához egy Osaka University-n dolgozó vegyészekkel folytatott kollaboráció keretében

jut hozzá a kutatócsoport. A léziót tartalmazó DNS-molekulákat élő sejtekbe bejuttatva lehetségessé vált a sérült DNS-szakasz replikációs mechanizmusának feltérképezése, valamint a folyamat által okozott tipikus mutációs spektrum meghatározása. Az eredmények segítik a bőrdaganatok kialakulásának megértését, és magyarázatot kínálnak a malignáns melanómát okozó leggyakoribb genetikai mutáció keletkezésére. Mivel a bőrben alakulnak ki leggyakrabban daganatos elváltozások, és ezek nagyrészt elkerülhetőek az ultraibolya sugárzás elleni védekezéssel, az eredményeknek egyértelmű a társadalmi relevanciája. A kutatás ezen szakaszának eredményei 2012-ben közleményben is megjelentek.

A kutatócsoport emellett hozzájárult egy, a kutatóközponton belüli kollaborációban folyó munkához, mely megmutatta, hogy a genomiális DNS-metiláció nem osztdó sejtekben is reverzibilis. Ez új perspektívákat nyit meg a génextpresszió szabályozásának kutatásában. Az eredmények szintén közlésre kerültek 2012-ben.

2012 januárjában elindult a *Membránfehérje Munkacsoport* az ERC Starting Grant pályázata. A Lendület-pályázatban megfogalmazott célokkal összhangban egy ATTUNE áramlási citométer került beszerzésre. A készülék jelenleg az egyetlen olyan kétlézeres áramlási citométer, amely 405 nm-es lézerrel is rendelkezik. Hasonló paraméterekkel rendelkező készülék az Enzimológiai Intézetben, vagy akár a Természettudományi Kutatóközpontban nem volt; szabad kapacitását más csoportok is kihasználhatják. Megállapították, hogy az ABCB6 fehérje az endolizozómális rendszerben található. Megállapították, hogy az ABCG2 megjelenése a vörösvérsejtek membránjában korrelál farmakológiailag releváns polimorfizmusokkal.

Az *Aktív Transzportfehérjék Munkacsoport* 2012-ben elért eredményei – azok alapkutatási természetének megfelelően – elsősorban nemzetközi „peer-reviewed” folyóiratokban megjelent, illetve elfogadott cikkekben manifesztálódtak. Felfedezték az ABCC6 gén expressziós szabályozásának egyik fontos elemét. Kísérleteikkel megerősítették, hogy az ABCC6 fehérje a plazmamembránban lokalizálódik, ezzel megcáfolva a lehetséges mitokondriumhoz való kötődést. Két review megírására kérték fel őket, melyekben leírták az ABCC6 szerepét az érfalak kalcifikációjában. Egy kollaborációs munka keretében új szignalizációs útvonalat írtak le, amely az ABCG2 gén expresszióját szabályozza HepG2 sejtekben. Részt vettek az ABCG2 transzporter és számos farmakológiailag fontos molekula kölcsönhatásának tanulmányozásában és leírásában. Részt vettek továbbá a különböző lipid-környezetben rekonstituált tisztított transzporter karakterizálásában.

A *Rendezetlen Fehérje Munkacsoport* számos eredményt ért el a 2012. évben.

Rendezetlen fehérjék komplexeinek szerkezeti jellemzése: A kutatócsoport a thymosin β 4 (TB4) fehérje különböző partnerekkel alkotott komplexeinek jellemzését végezte el, melynek során egy újonnan felfedezett biokémiai jelenség, a „bolyhos” komplexek kialakulásának és működésének jellegzetességeit sikerült jobban megérteni. A kutatócsoport eredményei hozzájárulnak ahhoz, hogy jobban meg lehessen érteni a TB4 szerteágazó hatásainak a biokémiai hátterét, mely magában hordozza az orvostudományi, gyógyszerkutatási felhasználás lehetőségét, emellett fontos alapkutatási jelentősége is van.

Rendezetlen fehérje-chaperonok működésének *in vivo* vizsgálata: 2012 folyamán a csoport munkatársai kidolgoztak egy módszert, melynek segítségével a rendezetlen növényi chaperon ERD14 stresszvédő funkcióját élő baktériumsejtekben lehet vizsgálni. A vad típusú ERD14 kifejeztetése kedvezően hat a baktériumsejtek túlélésére, és a különböző mutáns ERD14 fehérjék hatása különbözik a vad típusától. Ezek az eredmények a gyógyszerkutatás szempontjából is érdekesek, mert az ilyen, rendezetlen chaperonok alkalmasak lehetnek arra, hogy különböző, fehérje alapú készítmények eltarthatóságát, stabilitását megnöveljék.

Deinococcus radiodurans Nudix fehérjéjének vizsgálata: A *Deinococcus radiodurans* (Dr) egy extrém stressztűrő baktérium, mely rendkívüli kiszáradást és magas sugárzást is képes

elviselni. A kutatócsoport egy olyan Dr Nudix fehérjével foglalkozik, mely rendelkezik egy hosszú N-terminális rendezetlen régióval. A hipotézis szerint ez a régió szerepet játszik a fehérje ellenálló képességének megőrzésében stresszkörülmények között is. Sikert kimutatni, hogy a vad típusú és a rendezetlen régióval nem rendelkező mutáns aktivitása egymással összevethető, de stressztűrő képességükben jelentős különbségek mutatkoznak. Két másik mutáns Nudix DNS-konstrukciója is elkészült, melyeknek a kifejeztetésére és jellemzésére a következő évben kerül majd sor.

Rendezetlen fehérjék *in vivo* életidejének meghatározása: A rendezetlen fehérjék sejten belüli élettartamának meghatározása érdekében az ERD14 és a globuláris GST-fehérjét három, különböző mennyiségű proteázzal rendelkező *E. coli* törzsbe transzformálták. Eredményeik alapján a rendezetlen és a globuláris fehérje sejten belüli élettartama nem különbözik egymástól. Ezek a kutatások választ adhatnak arra az egyik legfontosabb alapkérdésre, hogy a rendezetlen fehérjék sejten belül is rendezetlenek-e, és ilyen formában is képesek-e fennmaradni a citoplazmában.

Bioinformatikai kutatások: 2012-ben a korábban megkezdett munkák befejezése, publikálása történt meg. Jelenleg a fő kutatási terület a rendezetlen fehérje szakaszokon kialakuló rövid fehérje kötő motívumok kutatása. Ezek a fehérjeszakaszok felelősek a legtöbb rendezetlen fehérje/fehérje szakasz funkciójáért, ezért megismerésük fontos része a rendezetlenség kutatásnak. Eredményeik hozzájárulnak a rendezetlen fehérjék evolúciójának jobb megértéséhez, másrészt a kölcsönhatások feltérképezése komoly orvosi biológiai jelentőséggel bírhat. Különböző együttműködések keretében készítették egy nagy mennyiségű adatot tároló szervert és programot, valamint különböző genetikai betegségek hátterében bioinformatikai módszerekkel keresték a betegséggel összefüggésbe hozható miRNS-eket, és a bennük található eltéréseket (főleg SNP-eket). Ezen kívül a prion fehérjéhez hasonló rendezetlen Shadoo fehérje szerkezeti és evolúciós elemzését végezték.

A *Szerkezeti Biofizika Munkacsoport* tisztázta a komplementrendszer lektin útjának aktiválódási mechanizmusát. A korábbi irodalmi adatokat megcáfolva kimutatták, hogy a MASP-1 szerin proteáz a MASP-2 szerin proteáz kizárólagos aktivátora, és a MASP-1 gátlásával az egész rendszer aktiválódása gátlható. Ennek azért van különösen nagy jelentősége, mert a lektin út patológikus aktiválódása nagymértékben hozzájárul az iszkémia-reperfúzió (pl. szívinfarktus, szélütés) során bekövetkező szövetpusztuláshoz. Az eddigi gyógyszerfejlesztések kizárólag a MASP-2 gátlására koncentráltak, felfedezésük azonban megmutatta, hogy a MASP-1 az igazán fontos célmolekula. A specifikus gátlószerekre szabadalmi bejelentést tettek és a további munkát hazai és külföldi együttműködők bevonásával folytatják.

Meghatározták a több doménes MASP-2 szerin proteáz és a C4 fehérjeszubsztrát komplexének térszerkezetét. Azonosították a CCP doméneken lévő külső kötőhelyet (exosite). Ez áttörésnek számít ezen a területen, mivel eddig nem volt ismert olyan szerin proteáz-szubsztrát komplex szerkezet, ami egy külső (nem proteáz) doménen lévő exosite szerepét demonstrálta volna.

Folytatták humán 3-foszfoglicerát kináz (PGK) nukleotid-specifitását jellemzését és más kinázokkal való összehasonlítását. Megállapították, hogy bár a HIV-elleni terápiában hatásos L-nukleozid-analógok foszforilálását a PGK végzi a kinázok közül a leghatékonyabban, a ribóz-gyűrűt nélkülöző, szintén HIV-gyógyszerként alkalmazott tenofovir enzimátikus foszforilálását a PGK kimutatható sebességgel nem katalizálja.

A *Thermus thermophilus* (Tt) 3-izopropilmalát-dehidrogenáz (IPMDH) quaterner komplexe (IPMDH*Mn*IPM*NADH) kristályszerkezetének analízise során további molekuláris kontaktusokat azonosítottak a két szerkezeti domén határán. Kvantummechanikai (QM)

számításokkal modellezték a működő enzimhez kötött szubsztrátok (IPM és NAD) között lezajló kémiai reakció egyes elemi lépéseit is.

A *Genom Metabolizmus Munkacsoport* igazolta a DNS-beli uracil előfordulását és fejlődésben játszott szerepét ecetmuslicában. Megmutatták, hogy *Mycobacterium*-ban (TBC kórokozó) a dUPáz enzim esszenciális, és ezért egy fajspecifikus hurok felel.

Lizofoszfolipid Munkacsoport jellemezte a szfingozin-kalmodulin kötődés erősségét és a kalmodulin funkcionális gátlását, meghatározták a komplex kristályszerkezetét. Az EPAC1 fehérje DEP-doménjét kifejezték, tisztították és megmutatták, hogy szelektíven köti a szfingozilfoszforilkolint. Részletesen jellemezték egyes rekombináns PH-domének (gelsolin, akt1, grp1, nck1) kölcsönhatását lizofoszfátidsavval *in vitro*.

b) Tudomány és társadalom

A *Jelátviteli Munkacsoport* vezetője a Lendület-pályázat nyertese, így számos fórumon beszámolt kutatásairól, illetve népszerűsítette kutatási területét.

Membránfehérje Bioinformatika Munkacsoport vezetője által tartott bioinformatikai kurzuson a PhD-diákok mellett több, nem szakmabeli kutató is részt vett az MTA TTK-ból, ill. más akadémiai kutatóközpontból is.

A *Fehérjeszerkezet Munkacsoport* eredményei közül a rákos megbetegedésekkel kapcsolatosak számíthatnak szélesebb körű érdeklődésre.

Tudomány és társadalom közötti dialógust jelzi az Élet és Tudomány pályázati felhívására a Sejt Architektúra munkacsoport munkatársa által beküldött cikk közlése és honoráriummal való jutalmazása. „A rendezetlen fehérjék kettős élete: Egészségben és betegségben” című, az OTKA-cikkpályázat keretében kiválasztásra került pályamű megjelenése 2013. januárban várható.

A Genom Stabilitás kutatócsoport vezetője részt vett az MTA és a Magyar Televízió Delta című tudományos ismeretterjesztő műsora által szervezett vetélkedőn, zsűritagként és az egyik középiskolás csapat mentoraként is. Az év során később a vetélkedőn résztvevő csapat gimnáziumának (Szent Orsolya Gimnázium, Sopron) összes kémia fakultációs diákját vendégül látta a kutatócsoport, bemutatta a laboratóriumot, és a diákok által végzett kísérleti gyakorlattal is szemléltette a kutatómunkát.

Membránfehérje Munkacsoport vezetője is részt vett a Magyar Televízió Delta műsora által megrendezett „Lendületben a jövő” című vetélkedőn.

Előadásokat tartottak a „Kutatók Éjszakája” programban. Az előadások címe:

Össejtek tévúton - a daganatok össejtjei

Rákos sejtek nagyító alatt – Gyógyszer-rezisztencia (labor bemutató)

(http://www.kutatokejszakaja.hu/2012/foszereplo/foszereplo.php?menu_id=5&id=1022)

Előadást tartottak a Magyar Tudomány Ünnepe 2012. „A felfedező tudomány felfedezése: kutatóhelyek tárt kapukkal” c. programon.

Az *Aktív Transzportfehérjék Munkacsoport* tagjai két előadást tartottak a TTK Kutatóközponti Tudományos Napokon, az egyik hallgató a Kármán Erika Doktori Iskola keretén belül számolt be tudományos eredményeiről, valamint a csoportvezető az MTA Tárt kapuk rendezvénysorozatán 30 középiskolás diák számára tartott ismeretterjesztő előadást az intézetben.

A *Rendezetlen Fehérje Munkacsoport* számos tudományos rendezvényen vett részt, ezek közé tartoznak a Magyar Tudomány Ünnepe rendezvénysorozatán, valamint a TTK Kutatóközponti Tudományos Napokon tartott előadások.

A *Szerkezeti Biofizika Munkacsoport* vezetője előadást tartott a Magyar Tudomány Ünnepe keretében „Kutatások az MTA Természettudományi Kutatóközpontban” címmel megrendezett szimpóziumon a Magyar Tudományos Akadémián. A lektin út aktiválódási mechanizmusával kapcsolatos eredményünket az MTI is ismertette és az erről szóló tudósítás több népszerű internetes hírportálon (pl. Index, Origo) is megjelent. Ugyanez az eredmény az „Élet és Tudomány” című folyóiratban is ismertetésre került és az MTV Delta című tudományos magazinja helyszíni riportban számolt be róla. A Magyar Tudomány szeptemberi számát a Magyar Biofizikai Társaság 50 éves fennállása kapcsán a csoportvezető szerkesztette. Az Élet és tudomány című folyóirat „Fizika az élő rendszerekben”, míg az Innotéka „Biofizika, a befogadó tudományág” címmel közölt interjút a csoportvezetővel.

A *Lizofoszfolipid Munkacsoport* részt vett a Magyar Tudomány Ünnepe rendezvényen műszeres bemutatóval, amely során a fiatalok megismerkedhettek a biomolekulák kölcsönhatását mennyiségileg jellemző modern műszerekkel.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2012-ben

A *Jelátviteli Munkacsoport vezetője* a Magyar Biokémiai Egyesület egyik alelnöke, illetve a Jelátvitel Szakosztály társelnöke, ilyen minőségében folyamatosan részt vesz egy egyesület vezetésében, illetve annak programjai szervezésében. Gergely Pál professzorral megszervezte a Jelátviteli Szakosztály 3. Konferenciáját (Esztergom, 2012. október 4-6). 2012-ben folytatódott az együttműködés a munkacsoport és a Richter Gedeon Nyrt. között gyógyszerfejlesztési témakörben. A csoportvezető részt vesz a Semmelweis Egyetemen folyó orvostudományban rendszeres előadások tartásával. Jelenleg 3 PhD-hallgató munkáját irányítja.

A *Funkcionális Genomika Munkacsoport* részt vesz az egyetemi hallgatók oktatásában. A munkacsoport vezetője az alábbi tárgyakat oktatja: „A Genomevolúció és fehérjeevolúció bioinformatikai aspektusai”, „Bioinformatika I”, ELTE TTK Biológushallgatók és doktoranduszok számára. Vállalati kutatás-fejlesztési kapcsolatok során a FIXPRED projektben együttműködnek a Combit Számítástechnikai Kft., az Albacomp Számítástechnikai Zrt. és a Valdeal Innovációs Zrt.-vel.

Membránfehérje Bioinformatika Munkacsoport vezetője az őszi félévben tartott bioinformatika tárgyú előadást az ELTE MSc és PhD-képzésében, emellett részt vett PhD-szigorlaton vizsgáztatóként és PhD-védésen opponensként. A csoport egy hazai együttműködésben vesz részt: Az Országos Onkológiai Intézet Sebészeti és Molekuláris Daganatpatológiai Központ egyik kutatócsoportjával a formaldehidbe és parafinba ágyazott daganatsejt minták DNS-analízise témában. Ebből az együttműködésből még nem született publikáció.

Fehérjeszerkezet Munkacsoport együttműködik a University of Cambridge (UK) és a Mount Sinai School of Medicine kutatóival, amiből cikkek is születtek. A munkacsoport több munkatársa részt vett hallgatók és doktoranduszok képzésében. A csoportvezető az ELTE Fizika Doktori iskolájának törzstagja.

A *Sejt Architektúra Munkacsoport* jelentős hazai és nemzetközi kapcsolatokkal, kollaborációs aktivitással rendelkezik, mint azt a közös EU-projektek is bizonyítják (ld. a Pályázatok részben). Továbbá a 2012-es évben két külföldi tudóst látott vendégül a csoport a Rouen Egyetemről és a Humboldt Egyetemről. A látogatások célja kollaborációs kapcsolat kialakítása, illetve a meglévő kapcsolat kiterjesztése volt, pl. folyamatban lévő tudományos cikkek közlésekre való elkészítése (ld. Publikációk részben). Ezeken túlmenően fontos momentum volt egy korábbi munkatárs visszatérése, hiszen ő évekig a csoportban dolgozott, itt készítve diplomamunkáját, valamint PhD-tézisét. Sikeres védését követően Svédországban

dolgozott posztdoktorként 3 évig, majd hazatérése után ismét bekapcsolódott a TPPP/p25 kutatásokba, jelenleg pozíció nélküli, „visiting” státuszban dolgozik a munkacsoportban.

Genom Stabilitás Munkacsoport

Téma címe: A tumorsejtek allélikus instabilitásának molekuláris és genetikai okai

Együttműködő partnerintézmény: Department of Systems Biology, Technical University of Denmark

Kapcsolat formája: tudományos együttműködés

Eredmények: Különbféle DNS-javító folyamatok génjeiben mutáns csirke DT40 sejtvonalakban sikerült megvizsgálni a spontán, ill. a DNS-károsodás által indukált genom instabilitást. A kutatómunka folytatódik, az eredmények értékelése folyamatban van.

Membránfehérje Munkacsoport

Achilles pályázat (4-1621-2011) konzorciumi ülés, december 7-8, 2012, Lyon, Franciaország

AddMal grant (4-1622-2009), konzorciumi ülés, október 24-25, 2012 Budapest

Egy vendéghallgató Bonnól.

Aktív Transzportfehérjék Munkacsoport

Téma címe: „Az ABCC6 szerepe az akut és krónikus érrendszeri meszesedésben”

Együttműködő partnerintézmény neve: Department of Cell and Molecular Biology; John A. Burns School of Medicine, University of Hawaii, USA

Egyezmény neve: NIH R01 pályázat, 1R01HL108249-01A1

Eredmények, ill. együttműködés értékelése: A magyar kutatócsoport végezi a humán, betegséget okozó ABCC6 mutációk karakterizálását *in vitro*, mivel az ehhez szükséges kísérleti feltételeket is ez a csoport dolgozta ki, és állította be: a vektor konstrukciók előállítását, a fehérje Sf9 sejtekben történő overexpresszáltatását, ún. kifordított vezikulák preparálását, az ABC fehérjék transzport kinetikájának vizsgálatát. A hawaii egyetemen az ABCC6 mutánsokat *in vivo* expresszáltatták egerekben. Az együttműködés keretén belül a két csoport a mutánsok sejten belüli lokalizációját *in vitro* és *in vivo* is meghatározta. Ezen kívül egy egéretetéses kísérletet is végeztek, amely során a magyar csoport végezte a K vitamin koncentrációjának meghatározását szérum mintákban. Ezekkel a kísérletekkel sikerült igazolniuk, hogy az ABCC6 nem játszik kulcsszerepet a K vitamin metabolizmusában.

Közös publikációk száma: 2012-ben 2 db (beleszámítva az elfogadott kéziratokat).

2012 folyamán a *Rendezetlen Fehérje Munkacsoport* sikeresen meghosszabbította a Koreai Tudományos Akadémiával folyó közös együttműködését, melynek keretében a közös kutatást és a kapcsolattartást anyagilag a koreai fél támogatja. Ennek a pályázatnak a keretében több koreai kutató is érkezett az Enzimológiai Intézetbe, és átlagosan egy hónapot töltöttek itt. A magyar kutatócsoport tagjai is látogatást tettek Koreában, részt vettek a Koreai Biokémiai Társaság éves gyűlésén, valamint az Első Kelet-Ázsiai Rendezetlen Fehérje szimpóziumon. A kutatócsoport szoros kapcsolatot tart fenn több egyetemi tanszékkel is, melyek közé tartozik az ELTE Szerkezeti Kémia és Biológia Laboratóriuma, ahol az NMR vizsgálatok folynak. Az NMR mérések képezik a rendezetlen fehérjék szerkezeti vizsgálatának gerincét, ezért a legtöbb kutatási témában nélkülözhetetlenek.

A Rendezetlen Fehérje munkacsoport kutatói részt vesznek az ELTÉ-n, a BME-n és a Pázmány Péter Katolikus Egyetem doktori képzésében. Az ELTE doktori képzésében egy rendezetlen fehérjéről szóló PhD-kurzust tartanak.

Téma címe: The role of pre-structured motifs (PreSMos) in the promiscuous interactions of intrinsically unfolded protein

Együttműködő partnerintézmény neve: Korea Research Institute of Bioscience and Biotechnology, Daejeon, Korea

Egyezmény neve: Korea Hungary Joint Laboratory Program

Eredmények, ill. együttműködés értékelése: Az együttműködés keretében a thymosin β 4 és partnereinek komplexeit jellemezték, valamint a rendezetlen fehérjékben található felismerő szekvenciák (PreSMos) bioinformatikai elemzését is elvégezték. Szintén az együttműködés keretében jellemezték a Nopp140 rendezetlen fehérjét biokémiai és biofizikai szempontból.
Közös publikációk száma: 2

Téma címe: Rendezetlen fehérjék szerepe a Nonsense mediated decay folyamatában
Együttműködő partnerintézmény neve: Mezőgazdasági Biotechnológiai Kutatóközpont, Gödöllő, Magyarország
Egyezmény neve: Tudományos együttműködés
Eredmények, ill. együttműködés értékelése: az MBK-ban lévő egyik csoport már évek óta foglalkozik az NMD folyamatának élettani vizsgálatával növényekben. Ebbe kapcsolódtak bele, a folyamatban szerepet játszó fehérjék szerkezeti vizsgálatával. Közös munkából már született egy közlemény, melyben a rendezetlen fehérjék NMD-ben betöltött kulcsszerepét bizonyítják, jelenleg rendezetlen régiókon belüli kötőmotívumokat keresnek.
Közös publikációk száma: 1

Téma címe: Rendezetlen fehérjék szerepe a biomineralizációban
Együttműködő partnerintézmény neve: Semmelweis Egyetem Orálbiológiai Tanszék, Budapest, Magyarország
Egyezmény neve: Tudományos együttműködés
Eredmények, ill. együttműködés értékelése: Varga Gábor a csont és fogképződés élettanának egyik hazánkban és nemzetközileg is elismert kutatója. Miután ebben a folyamatban egy fontos lépésben kizárólag rendezetlen fehérjék szerepelnek, a rendezetlenség szerepének tisztázására alakult ki az együttműködés. A közös munka 2012-ben zárult le, eredményeiket egy színvonalas nemzetközi publikációban foglalták össze.
Közös publikációk száma: 1

Téma címe: A Shadoo fehérje részletes szerkezeti elemzése
Együttműködő partnerintézmény neve: Szegedi Biológiai Kutatóközpont Biokémiai Intézet, Magyarország
Egyezmény neve: Tudományos együttműködés
Eredmények, ill. együttműködés értékelése: Egyik kutatójuk a nemrég felfedezett Shadoo fehérje (a prion fehérjéhez hasonló szekvenciájú fehérje) élettani, biokémiai vizsgálatával foglalkozik. Az együttműködésben bioinformatikai módszereket felhasználva próbálják azonosítani potenciális funkcióval rendelkező szerkezeti egységeket.
Közös publikációk száma: 1 (beküldött)

Téma címe: Micro RNS-ekben található SNP-k szerepe a depresszió kialakításában
Együttműködő partnerintézmény neve: Semmelweis Egyetem Gyógyszerhatástani Intézet
Egyezmény neve: Tudományos együttműködés
Eredmények, ill. együttműködés értékelése: Az egyik csoporttal együttműködésben olyan SNP-ket keresnek, melyek a miRNS-ek kialakulásának, vagy bekötődésének helyén vannak, és befolyásolhatják a miRNS kötődését. A csoport feladata bioinformatikai módszerekkel a miRNS-ek kialakulási helyének és kötődési helyének megtalálása a releváns géneken, illetve az ott található SNP-k kikeresése. Az együttműködés 2012-ben indult, így még publikált eredmények nincsenek.

Téma címe: EEG vizsgálatokból származó nagy mennyiségű adat tárolása és feldolgozása
Együttműködő partnerintézmény neve: Semmelweis Egyetem Gyógyszerhatástani Intézet

Egyezmény neve: Tudományos együttműködés

Eredmények, ill. együttműködés értékelése: Az előző témában említett csoporttal egy másik együttműködés is folyik, ebben kizárólag informatikai, bioinformatikai segítséget nyújtunk a vizsgálataik során keletkező nagy mennyiségű adat kiértékeléséhez, feldolgozásához.

Közös publikációk száma: 1 (elfogadott) + 2 (beküldött)

Szerkezeti Biofizika Munkacsoport

Téma címe: Baktériumokban termeltetett rekombináns fehérjék kijuttatása a sejtekből a flagelláris exportapparátus segítségével

Együttműködő partnerintézmény neve: Pannon Egyetem, Bio-Nanorendszerek Laboratórium, Veszprém

Egyezmény neve: kutatási együttműködés

Eredmények, ill. együttműködés értékelése: A flagelláris exportrendszer felhasználásán alapuló olyan fehérjeexpressziós eljárást dolgoztak ki, amelynek segítségével a baktériumokban nagy mennyiségben termeltetett rekombináns fehérjék működőképes formában kijuttathatók a sejtekből, s azok feltárása nélkül a sejtkultúra folyadékából könnyen összegyűjthetők.

Közös publikációk száma: 2

Téma címe: Az IPMDH szerkezet-működés kapcsolatának felderítése

Együttműködő partnerintézmények neve:

MTA TTK Kutatóközpont Szerves Kémiai Intézet (krisztallográfia)

MTA-BME Anyagszerkezet és Modellezési Kutatócsoport, (kvantummechanikai számolások)

Egyezmény neve: tudományos együttműködés

Eredmények, ill. együttműködés értékelése: Az IPMDH működését kísérő alloszterikus változások vizsgálatára előállították a *Thermus thermophilus* (Tt) IPMDH*Mn*IPM*NADH komplex kristályát és meghatározták annak 2 Å felbontású szerkezetét. Ez a nem működő inaktív komplex jól modellezi a működő aktív IPMDH*Mn*IPM*NAD komplexet. Fontosabb jellemzői a domének teljesebb záródása és a kötött szubsztrát kötésszögeinek megváltozása a korábbról ismert IPMDH*Mn*IPM komplexben megfigyeltékhez képest. A kötött IPM újonnan megfigyelt konformációjának előnyeit a katalizált kémiai folyamat szempontjából kvantummechanikai számításokkal is alátámasztották (kézirat előkészületben).

Téma címe: A bakteriális 3-izopropilmalát dehidrogenáz szerkezeti-funkcionális vizsgálata

Együttműködő partnerintézmények neve: Helmholtz Centre, Berlin, Németország, egy kutató(krisztallográfia), University of Parma, Institute of Molecular Biology, Olaszország, egy kutató (mikrospektrofotometria)

Egyezmény neve: OTKA Nemzetközi Együttműködési Kutatási pályázat

Eredmények, ill. együttműködés értékelése: Az enzimműködést kísérő alloszterikus konformációváltozások (pl. doménmozgások, ill. az alegységek közötti információ-átadás) mechanizmusa szerkezeti alapjainak felderítésére kristályos állapotban előállították a *Thermus thermophilus* IPMDH apoenzimet, továbbá az IPMDH*Mn, IPMDH*Mn*IPM, az IPMDH*Mn*NAD, IPMDH*Mn*NADH és az IPMDH*Mn*IPM*NADH stabil komplexeket. A kristályok röntgendiffrakciós jellemzése és szerkezet megoldása is megtörtént. A szerkezetek összehasonlító molekuláris grafikai analízise képet adott az enzim-szubsztrát komplexekben lejátszó konformációváltozások sorozatáról.

Az együttműködés során a különböző IPMDH-szubsztrát komplexek mikrospektrofotometriás mérésére is sor került. Ezekkel a kiegészítő vizsgálatokkal ellenőrizték az IPMDH működőképességét a kristályban. A vizsgálatok alapján releváns következtetések vonhatóak le az enzimműködés szerkezeti részleteit illetően.

Téma címe: A *Thermus thermophilus* (Tt) 3-izopropilmalát dehidrogenáz konzervatív oldalláncainak mutációja által okozott konformációs változások tanulmányozása kisszögű röntgen szórással (SAXS).

Együttműködő partnerintézmény: EMBL, Hamburg, Németország, Dmitri Svergun and Peter Konarev (SAXS)

Egyezmény neve (vagy a kapcsolat formája): BioStructx_1064

Eredmények, ill. együttműködés értékelése: A vad típusú és mutáns IPMDH enzimek apo, IPMDH*Mn*IPM*NAD (működő terner komplex) és IPMDH*Mn*IPM*NADH (nem működő terner komplex) formáinak konformációját kisszögű röntgenszórás módszerével vizsgálták. Az adatok kiértékelése során megállapították, hogy az összes mutánsnál (a K185A mutáns kivételével) mind a működő, mind a nem működő terner komplex esetében csökkent mértékű doménzáródás volt megfigyelhető. A K185A mutáns mérési adatai meglepő eredményt mutattak. A Mn*IPM*NADH-val alkotott komplex doménjei csak részben záródtak a vad típusúhoz képest, míg a Mn*IPM*NAD kötődése a domén záródás mértékét nagymértékben megnövelte. A jelenség magyarázatához a kristályszerkezetek további analízise és oldatkísérletek szükségesek.

Genom Metabolizmus Munkacsoport

FEBS3+ Meeting: From molecules to life and back szervezése, Opatija, Horvátország, FEBS támogatással.

Lizofosfolipid Munkacsoport

Téma címe: Biofizika MSc-hallgatóknak

Együttműködő partnerintézmény (egyetem) neve: Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Egyezmény neve (vagy a kapcsolat formája): féléves előadás MSc-képzésben

IV. A 2012-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A pályázat megnevezése (formája): MTA Lendület-pályázat (LP2012-35/1/2012)

A pályázati téma megnevezése: A transzmembrán fehérjék szerkezetének vizsgálata újfajta bioinformatikai eszközökkel

A pályázati támogatás mértéke: 204 M Ft, (2012-ben: 61 M Ft)

A pályázat megnevezése (formája): OTKA (K104586)

A pályázati téma megnevezése: Dimenzióváltás a transzmembrán fehérjék szerkezet-kutatásában

A pályázati támogatás mértéke: 44 M Ft, (2012-ben: 11 M Ft)

A pályázat keretében 2012-ben végzett munka fontosabb eredményei: 2 cikk, 16 impakt faktor

A pályázat megnevezése (formája): MEDA Pharma GmbH & Co. KG, Hamburg, Dr. Joachim Maus, Director Clinical Development

A pályázati téma megnevezése: Reumacon és származékainak (AS3738 and AS3739) jellemzése a vegyületek anti-mikrotubuláris potenciáljának vonatkozásában

A pályázat azonosítószáma: 4-1391-2012 4113 KE

A pályázati támogatás mértéke (összesen, ill. 2012-ben): 3000 EUR, 3000 EUR

A pályázat keretében 2012-ben végzett munka fontosabb eredményei: A vizsgálatok célja a Reumacon és származékainak (AS3738 and AS3739) jellemzése, elsődlegesen a vegyületek anti-mikrotubuláris potenciáljának vonatkozásában. A feladat teljesítésének igazolását, az eredmények értékelését írásos beszámoló mutatta be a megrendelőnek.

A pályázat megnevezése: OTKA alapkutatói pályázat (K 104227)

A pályázati téma megnevezése: Egy gén, számos betegség: az ABCC6 szerepe az érfalak meszesedésében

A pályázati támogatás mértéke: 2013. január 1-jén indul.

A pályázat megnevezése: Piacorientált kutatási tevékenység támogatása a közép-magyarországi régióban (KMR 12-1-2012-0074)

A pályázati téma megnevezése: Kinázgátló hatóanyagok fejlesztése vesefibrózis és diabéteszes nefropátia kezelésére

A pályázati támogatás mértéke: 40 M Ft (2012: 0 Ft)

A pályázat megnevezése: MTA Infra (IF-28/2012)

A pályázati téma megnevezése: Hungarian Automated Macromolecular Crystallization and X-ray Crystallography Platform for the 21th Century

A pályázati támogatás mértéke (összesen, ill. 2012-ben): 120 M Ft

A pályázat megnevezése: PD OTKA (PD 105049)

A pályázati téma megnevezése: A thymosin beta-4 szerkezeti adaptációja különböző partnereihez

A pályázati támogatás mértéke: 25 M Ft (2012: 8 M Ft)

A pályázat keretében 2012-ben végzett munka fontosabb eredményei: A thymosin β 4 szerkezetének vizsgálata történt különböző partnereivel alkotott komplexekben. A vizsgálatok közé tartozott az NMR, a SAXS, az ITC és egyéb technikák. A kapott eredmények publikációja jelenleg folyamatban van.

A pályázat megnevezése: OTKA posztdoktori pályázat (PD 104344)

A pályázati téma megnevezése: GAP43-kalmodulin kölcsönhatás szabályozása a szfingozin és lizofoszfátidsav jelátviteli lipidekkel

A pályázati támogatás mértéke: 21 M Ft (2012: ~2,2 M Ft)

A pályázat keretében 2012-ben végzett munka fontosabb eredményei: Jellemezték a szfingozin-kalmodulin kötődés erősségét és a kalmodulin funkcionális gátlását, meghatározták a komplex kristályszerkezetét.

V. A 2012-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Tompa P: On the supertertiary structure of proteins. *Nat Chem Biol*, 8(7): 597-600 (2012)
2. Tompa P: Intrinsically disordered proteins: a 10-year recap. *Trends Biochem Sci*, 37(12): 509-516 (2012)
3. Héja D, Kocsis A, Dobó J, Szilágyi K, Szász R, Závodszy P et al. (2, Gál P): Revised mechanism of complement lectin-pathway activation revealing the role of serine protease MASP-1 as the exclusive activator of MASP-2. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 109: 10498-10503 (2012)
4. Kidmose RT, Laursen NS, Dobó J, Kjaer TR, Sirotkina S, Yatime L et al. (4, Gál P): Structural basis for activation of the complement system by C4 cleavage. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 109: 15425-15430 (2012)
5. Muha V, Horváth A, Békési A, Pukáncsik M, Hodoscsek B, Merényi G et al. (7, Róna G, Batki J, Vértessy BG): Uracil-containing DNA in *Drosophila*: stability, stage-specific accumulation, and developmental involvement. *PLoS Genet*, 8(6): e1002738 (2012)

6. Kozma D, Simon I and Tusnády GE: CMWeb: an interactive on-line tool for analysing residue-residue contacts and contact prediction methods. *Nucleic Acids Res*, 40: W329-333 (2012)
7. Ratajewski M, de Boussac H, Sachrajda I, Bacquet C, Kovács T, Váradi A et al. (2, Arányi T): ABCC6 Expression Is Regulated by CCAAT/Enhancer-Binding Protein Activating a Primate-Specific Sequence Located in the First Intron of the Gene. *J Invest Dermatol*, 132:(12) 2709-2717 (2012)
8. Pesti S, Balázs A, Udupa R, Szabó B, Fekete A, Bögel G et al. (1, Buday L): Complex formation of EphB1/Nck/Caskin1 leads to tyrosine phosphorylation and structural changes of the Caskin1 SH3 domain. *Cell Commun Signal*, 10(1): 36 (2012)
9. Bogel G, Gujdar A, Geiszt M, Lanyi A, Fekete A, Sipeki S, et al. (2, Buday L): Frank-ter Haar syndrome protein Tks4 regulates EGF-dependent cell migration. *Journal of Biological Chemistry*, 287(37): 31321-31329 (2012)
10. Héja D, Harmat V, Fodor K, Wilmanns M, Dobó J, Kékesi KA et al. (3, Závodszky P, Gál P): Monospecific inhibitors show that both mannan-binding lectin-associated serine protease (MASP)-1 and -2 are essential for lectin pathway activation and reveal structural plasticity of MASP-2. *Journal of Biological Chemistry*, 287(24): 20290-20300 (2012)

MTA TERMÉSZETTUDOMÁNYI KUTATÓKÖZPONT

KOGNITÍV IDEGTUDOMÁNYI ÉS PSZICHOLÓGIAI INTÉZET

1132 Budapest, Victor Hugo u. 18-22.; 1394 Budapest, Pf. 398.

telefon: (1) 354 2290; fax: (1) 354 2416

e-mail: czigler.istvan@ttk.mta.hu; honlap: <http://www.ttk.mta.hu>

I. A kutatóhely fő feladatai 2012-ben

A szenzoros emlékezet kutatása a látásban és a hallásban. A hallás esetében különös tekintettel a hangforrások automatikus szelekciójára, valamint az automatikus és figyelmi hatások kölcsönhatására. A látás területén a szenzoros emlékezeti rendszer sajátosságainak vizsgálatára.

Beszédmegértési kutatások. Szavak akusztikus és vizuális feldolgozásának neurokognitív vizsgálata. Prozódia szerepének vizsgálata a megértésben, és ennek idegrendszeri mechanizmusai.

Speciális környezeti feltételek mellett az észlelés és a kommunikáció elemzése pszichofiziológiai és narratív pszichológiai módszerekkel.

Munkaemlékezeti folyamatok agyi mechanizmusainak hálózat-alapú elemzése.

Epilepsziás agyi működés *in vitro* és *in vivo* elemzése. A terület mérés technikai lehetőségeinek fejlesztése, szinkron populációs aktivitás elektrofiziológiai vizsgálata *in vitro* patkány és emberi hippocampusban.

Az időszedéssel járó kognitív változások kompenzációjának lehetőségei és e folyamatok követése pszichofiziológiai módszerekkel.

Anyagyermek kommunikáció és korai emóció-felismerés vizsgálata, evolúciós-összehasonlító etológiai vizsgálatok a társas viselkedés alapjelenségeiről.

A szabályos és szabályáthágó versengés társadalmi következményei.

A nemzeti identitással kapcsolatos kommunikáció narratív pszichológiai elemzése.

A pszichoanalízis történeti szempontú vizsgálata.

II. A 2012-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Kidolgozták a hangforrások észlelésbeli szétválasztásának prediktív szabályosság-reprezentációkra épülő modelljének komputációs elveit. Az ezeken az elveken alapuló komputációs modellek elősegíthetik az intelligens hallókészülékek kifejlesztését.

Demonstrálták, hogy a saját cselekvés által kiváltott hangokhoz kapcsolódó sajátos idegrendszeri feldolgozási mintázat a korábbi elképzelésekkel szemben nem a cselekvés és a hang közötti oksági viszony kognitív leképeződését, hanem azok idői közelségét tükrözi.

Megmutatták, hogy a hallórendszerben vannak magasabb rendű akusztikus változások detekciójára specializált alrendszerek.

Kimutatták, hogy az automatikus (figyelmi folyamatokat nem igénylő) vizuális emlékezeti rendszer érzékeny észlelési kategóriákra, mint a szimmetria, arcokon mutatkozó érzelmek, és időbeli szabályszerűségekre. Az eredmények szerint ez a nem-tudatos rendszer, mint „egyszerű intelligencia” működik, és lényeges szerepet játszik a valóságghú észlelésben.

Az időskori idegrendszeri működések vizsgálatakor hálózati elemzési módszereket alkalmazva a domináns félteke frontális régiójának megfelelően észleltek optimalizált hálózat-átrendeződést, úgy találták, hogy enyhe kognitív zavarral rendelkező személyeknél

egyes agyi régiók (ill. az azokon belül azonosítható ún. modulok) kapcsolatai az idő elteltével romlanak. Fiatalokban és idősekben eltérő idegrendszeri hálózatok aktiválódtak a vizuális érzelmi ingerek feldolgozása során. Az eredmények szerint a hanyatló emlékezeti funkció háttérében egyes agykérgi területeken tapasztalható csökkent magas frekvenciájú szinkronizáció állhat.

A szóhangsúly feldolgozásával kapcsolatos vizsgálatok megállapították, hogy a beszéd-szintetizátorral létrehozott normál és sértett hangsúlyú szavak és álszavak preattentív feldolgozása során az agyi elektromos válaszok komplex módon tükrözik a hangsúlyban és a lexikalitásban történő eltéréseket.

A multiszenzoros integráció (hasbeszélő hatás) kapcsán végzett kutatások feltárták, hogy az integrációt befolyásolja a jelek intenzitása. Egy olyan feladatban, amelyben a résztvevők feladata a hang irányának meghatározása volt, miközben egyszerre láttak és hallottak különböző intenzitású ingereket, azt találták, hogy csak a nagy intenzitású vizuális jel térítette el a hang lokalizációját.

Az ADHD (figyelemhiányos/hiperaktivitás zavar) viselkedéses megjelenése kapcsán végzett kutatások kimutatták, hogy a kérdőíves felméréssel vizsgált tünetek súlyossága alapján több alcsoport is elkülöníthető, melyek hasonló látens struktúrát mutatnak mind a szülői, mind a tanári beszámolók alapján. A vizsgálat felhívja a figyelmet a klinikai diagnózisban nem részesülő, de szubklinikai ADHD szimptomákat mutató csoport létezésére.

Új, nedves kémiai marási módszert dolgoztak ki az MTA TTK MFA együttműködésével, sok kontaktusú szilícium alapú neurális interfész megvalósítására. Állatkísérletes eredmények szerint az eszköz igen jó elektrofiziológiai tulajdonságokkal rendelkezik, nagy pontossággal képes mérni a helyi mezőpotenciálokat valamint az egysejt és többsejt aktivitást.

Összehasonlító viselkedéselemzési kutatások szerint emberek és a kutyák szociális készségei hasonlóak, például a kutyák és a 6-24 hónapos gyerekek szocio-kognitív képességeit vizsgáló tanulmányok eredményei nagymértékű hasonlóságot mutatnak. E párhuzamnak evolúciós okai lehetnek, melyet vizsgálataink összefoglalásaként részletesen kívántunk igazolni. A társasan ráutaló referenciális (osztentív) jelzésekre a kutyák is érzékenyen reagálnak, mint ezt elsőként alkalmazott szemmozgás-regisztációs eljárásukkal kimutatták.

Kimutatták, hogy 18–24 hónapos gyermekeknél a demonstrátornak tulajdonított kompetencia (gyerek vs. felnőtt) és a demonstráció során alkalmazott osztentív kommunikáció egymástól nem független módon befolyásolja a megfigyelő kisgyermek utánzási hajlandóságát. Mindez a kora gyermekkori társas tanulás folyamatainak egy új aspektusára világít rá.

A médiapszichológiai kutatásokban kimutatták, hogy a filmbefogadó kötődési jellemzői, érzelmi intelligenciája a film narratívájával interakcióban befolyásolja a nézőnek a fikciós karakterrel kialakított kapcsolatát és a néző pszichofiziológiai válaszait. A kutatás eredményei a médiapszichológia azon aktuális nemzetközi trendjéhez kapcsolódnak, amelyek narratív művészeti alkotásokkal kapcsolatosan megélt esztétikai élményt vizsgálják.

A pszichoanalízis-történeti kutatások során befejezték és a londoni Karnac kiadóhoz közlésre benyújtották Ferenczi Sándor és Ernest Jones 1911 és 1933 közötti levelezésének angol nyelvű, bevezetését és jegyzetekkel ellátott változatát.

Segítő szakembereknél a másodlagos traumatizáció és kiégés vizsgálatában feltárták, hogy a páciens negatív érzéseinek átvétele a szakember emocionális kimerüléséhez, illetve a személyes hatékonyság érzésének csökkenéséhez vezethet. Az empátiás törődés és decentralizációs képesség azonban meghatároz egy olyan kapcsolati attitűdöt, mely növeli a

személyes hatékonyság érzését és csökkenti a személytelen bánásmód megjelenésének esélyét.

Általános elméleti modellt dolgoztak ki a történelmi pálya és a nemzeti identitás összefüggéséről. Létrehozták a NarrCat nevű, magyar nyelvű egyéni és csoportelbeszélések elemzésére szolgáló, több számítógépes nyelvészeti platformot egyesítő narratív pszichológiai tartalomelemző szoftvercsomagot, mely nem csupán a narratív pszichológiai szempontból releváns szó- és kifejezés kategóriákat elemzi (pl. érzelem, ágens, értékelés, idő, stb.), hanem az elbeszélések szereplőinek tematikus szerepét is meghatározza. A módszert alkalmazva a magyar nemzeti identitás szociálpszichológiai konstrukciójának vizsgálatában kimutatták a kollektív áldozati szerepre jellemző szerveződési módokat, mely meggátolja, hogy a csoport szembenézzen saját vétkeivel és hibáival és olyan érzelmeknek adjon helyet, mint a megbánás.

Nemzetközi együttműködésben a Mars-500 űranalóg kísérlet adatait elemezve kimutatták, hogy orosz és angol nyelvű legénységi kommunikációban a legénység autonómiája szignifikánsan növekszik, időtudatosságuk azonban az ingerszegény időintervallumokban csökken.

A versengés egyik legfontosabb jellemzője, hogy a felek betartják vagy áthágnak a szabályokat. Az eredmények szerint a szabálytartó versengést elősegíti, ha mind a formális, mind az informális versengés szabályai világosak, transzparenssek, ha a versengés nem nagyon intenzív, ha a versengés élvezetes és pozitív stresszt okoz, és ha a versengő felek között együttműködés, bizalom és jó kommunikáció van. Minél intenzívebb a versengés és minél rosszabb a kapcsolat a versengő felek között annál inkább hajlamosak a felek áthágni a szabályokat és immorális és illegális eszközöket alkalmazni.

Magyar, kínai és Magyarországon élő kínai diákok tanuláshoz és versengéshez kapcsolódó koncepcióinak összehasonlítása feltárta, hogy a Magyarországon élő kínai gyermekek koncepciói mind a kínai, mind magyar társaikétól eltérő képet mutatnak. Az eredmények először világítanak rá az akkulturációs folyamatok lehetséges moderátor szerepére a fogalomfejlődés folyamatában. A különböző fogalmak jelentéstartalmának ismerete hozzájárulhat a hazai oktatásszervezés hatékonyságának növeléséhez és a kultúra érzékeny pedagógia megvalósulásához.

b) Tudomány és társadalom

Az öregedéssel együtt járó, elsősorban pszichológiai (pszichopathológiai) folyamatok kutatásának elméleti súlyán túl a kérdés gyakorlati jelentősége nyilvánvaló, lévén, hogy a népesség életkora nő, ami számos gazdasági, szociális, egészségügyi, pszichológiai vonatkozású problémát hoz magával. E kutatásokból több népszerű előadást tartottak, és ez volt az egyik témája az ELTE Pszichológiai Intézet egész napos nyilvános tudományos fórumának valamint a „TTK Tudományos Napok” rendezvénynek. A versengés életkori (idős korral kapcsolatos) változásairól a „Harmadik Kor Egyetemén” (ELTE) tartottak előadást.

Az olvasás tipikus és atipikus fejlődésének kutatási területén elért eredmények a pedagógiai gyakorlat (mérés-értékelés) számára elérhető formában váltak részévé az írás-olvasás nemzeti standardjait alapozó, magyar és angol nyelven hozzáférhető szerkesztett köteteknek és könyvfejezeteknek.

Az identitás szerveződése és állapotai a közgondolkodás számos jelenségére magyarázati lehetőséget kínál. Ezekről a lehetőségekről tartottak előadást 2012 májusában Pécsen a *Magyar Történelmi Társulat* bünbakképzéssel foglalkozó rendezvényén. E kutatások a

magyarságtudat empirikus vizsgálatába újszerű metodikát, a tudományos narratív elemzés módszerét vezette be.

Az összehasonlító viselkedéskutatást mind a hazai mind a külföldi média érdeklődésével kísérte. Számos online hírportál (MTI Központi Hírszolgálat, Origo, Reuters, Discovery News Science Now, New Scientist, LiveScience) adott hírt riport vagy közlemény formájában az eredményekről, továbbá hazai és külföldi napilapok és folyóiratok (pl. New York Times, Sydney Morning Herald, Magyar Nemzet, HVG) közöltek a kutatásokkal kapcsolatos interjút. A kutatásokról magyar és külföldi rádió és tv-csatornák is készítettek beszélgetéseket beszámolókat (pl. MTV1, TV2, RTL KLUB, Kossuth Rádió, CBS News Radio). A várhatóan 2013 tavaszán bemutatásra kerülő tudományos ismeretterjesztő film világszerte több kutatócsoport munkájának megfilmesítésével készült, és az állati illetve emberi gondolkodás sajátosságaihoz próbálja közelebb vinni a laikus érdeklődőket.

A longitudinális anya-gyermek kapcsolatokat vizsgáló kutatásokról hosszabb beszélgetés, előadás („Ezer arc, ezer talantum” című programsorozatban) és népszerűsítő cikk jelent meg (Élet és Tudomány).

A IV. Magyar Pszichoanalitikus filmkonferencián, melyeken több kutató vett részt, a kerekasztal beszélgetéseken és műhelyekben aktuális társadalmi kérdések (pl. romákkal, menekültekkel, nőkkel szembeni megkülönböztetés) kerültek szóba.

2012 őszétől LMBTQ (leszbikus, meleg, biszexuális, transznemű és queer témájú) pszichológiai olvasószeminárium indult mentálhigiénés szakemberek, pszichológusok részére.

A Magyar Tudomány Ünnepe rendezvénysorozat részeként szervezett *Érzelem, kogníció, társadalom* (2012. november 14.) konferencián bemutatták az érzelmek narratív szerveződésére vonatkozó illetve a nemzeti identitás kategória érzelmi összetevőit azonosító vizsgálatok eredményeit, valamint összefoglalták az érzelmekkel kapcsolatos idegtudományos eredményeket.

A Kutatók éjszakáján – *Urak és hölgyek az űrben* – előadásokkal és kerekasztal beszélgetésekkel vettek részt.

A versengéssel kapcsolatos kutatások a gazdasági élet egyik centrális kérdését érintik. E kutatásokról népszerű cikk (Élet és Tudomány, Mindennapi Pszichológia) jelent meg és előadásokat tartottak. A témakör több mint 15 alkalommal szerepelt különböző rádióműsorokban. Egyik kutatójuk az év során több mint 15-ször szerepelt különböző rádióműsorokban (elsősorban Kossuth Rádió Tudományos Szerkesztősége által szerkesztett műsorokban és a Közelről című műsorban).

A Magyar Tudomány ünnepének kiemelt rendezvényeként a Lendület program díjnyertesei között munkatársuk előadással szerepel: Mielőtt megtanulunk beszélni – A kommunikáció előfeltételei csecsemőknél.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2012-ben

Hazai kapcsolatok

Téma címe: A kutya és ember szociokognitív képességeinek összehasonlító vizsgálata
Együttműködő partnerintézmény: ELTE Etológia Tanszék, Budapest
Egyezmény neve (vagy a kapcsolat formája): Kutatási kollaboráció, közös kísérletek végzése a prof. Miklósi Ádám vezette kutatócsoporttal

Eredmények, ill. együttműködés értékelése (néhány sorban): Az évek óta folyó közös kutatások továbbra is sikeresen zajlanak, számos új kutatási irány került ebben az évben is kidolgozásra.

Közös publikációk száma: 5

Téma címe: A szociális kategorizáció szerepe a csecsemők és kisgyermekek kulturális tanulási folyamataiban

Együttműködő partnerintézmény: ELTE PPK Kognitív Pszichológiai Tanszék, Budapest

Egyezmény neve (vagy a kapcsolat formája): Kutatási kollaboráció közös PhD-hallgató bevonásával, a Dr. Király Ildikó vezette kutatócsoporttal

Eredmények, ill. együttműködés értékelése: Az évek óta folyó közös kutatások továbbra is sikeresen zajlanak, számos új kutatási irány került ebben az évben is kidolgozásra.

Közös publikációk száma: 2 (benyújtott kézirat)

Felsőoktatási kapcsolatok (BA, MA, PhD-képzésben való részvétel):

ELTE, Pedagógiai és Pszichológiai Kar

ELTE, Társadalomtudományi Kar

ELTE, Természettudományi Kar

PTE, Pszichológiai Intézet

Szegedi Tudományegyetem, Pszichológiai Intézet

Semmelweis Egyetem, Egészségtudományi kar

PPKE, Információs Technológiai Kar

KGRE, Pszichológiai Intézet

További tudományos együttműködések a 2012-ben megjelent közlemények alapján:

MTA KOKI, Budapest, Magyarország

MTA TTK MFI, Budapest, Magyarország

MTA Wigner Fizikai Kutatóközpont, Budapest, Magyarország

Nemzetközi kapcsolatok

Téma címe: Hallási és vizuális észlelés

Együttműködő partnerintézmény: Universität Leipzig, Németország

Egyezmény neve: DAAD-MÖB megállapodás

Eredmények: Mindkét részről számos hosszabb cserelátogatás közös kísérletek tervezésre és lebonyolítására céljából.

Közös publikációk száma: 4

Téma címe: Kognitív funkciók neurális hálózatainak elektrofiziológiai elemzése

Együttműködő partnerintézmény: Department of Clinical Neurophysiology, VU University Medical Centre, Amszterdam, Hollandia.

Egyezmény neve (vagy a kapcsolat formája): Informális; a holland és magyar laboratóriumok vezetői mintegy két évtizede rendeznek közösen konferenciákat, illetve szimpóziumokat, látják vendégül egymás munkatársait.

Eredmények: Az elsősorban a holland együttműködő fél által kifejlesztett, neuronális hálózatok vizsgálatára alkalmas EEG-alapú elemző rendszer hazai továbbfejlesztése különösképpen alkalmas kognitív folyamatok elemzésére. Ennek egyik vonatkozása a kiváltott potenciálok egyes komponenseivel összefüggésbe hozható tranzienst hálózat-karakterisztikumok analízisének Magyarországon megvalósított lehetősége.

Közös publikációk száma: Eddig megjelent: 2 (2012-ben 1); elbírálás alatt: 2.

Téma címe: Sokcsatornás regisztráló rendszerek fejlesztése

Együttműködő partnerintézmények: IMEC, Leuven, Belgium; IMTEK, Freiburg, Németország

Egyezmény neve: kutatási együttműködés

Eredmények: Akut, illetve krónikus sokcsatornás regisztráló rendszerek fejlesztése és tesztelése altatott rágcsálókban. Elektronikus mélységszabályzós elektróda használata idegrendszeri kutatásokban: agyi oszcillációk során detektálható sejtaktivitás vizsgálata és összehasonlítása különböző talamikus és agykérgi területeken. A kutatási és teszteredmények alapján a rendszerek további fejlesztése.

Közös publikációk száma: 8 (2012-ben 1)

Téma címe: Studying the associations between oxytocin receptor gene (OXTR) polymorphism and social behaviour in dogs. (Az oxytocin receptor gén (OXTR) polimorfizmus és a szociális viselkedés kapcsolatának tanulmányozása kutyáknál)

Együttműködő partnerintézmény: Messerli Research Institute, University of Veterinary Medicine Vienna, Ausztria

Egyezmény neve: Kutatási kollaboráció, közös kísérletek végzése

Eredmények: Egy tervezett közös kísérlet elvégzésre került, további közös vizsgálatok jelenleg is folynak párhuzamosan mindkét helyszínen.

Közös publikációk száma: 1

Téma címe: Effects of intranasal oxytocin on emotional face processing in dogs. (Az intranasalis oxytocin hatása érzelmet kifejező arcok feldolgozására kutyáknál)

Együttműködő partnerintézmény: College of Veterinary Medicine, University of Helsinki, Finnország

Egyezmény neve: Kutatási kollaboráció a prof Outi Vainio által vezetett csoporttal, közös kísérletek végzése

Eredmények: A tervezett közös kísérlet elvégzésre került, az ebből készülő kézirat előkészítése zajlik

Téma címe: Shame and Guilt through a Cross-cultural Lens. (A szégyen és büntudat kulturális összehasonlításban)

Együttműködő partnerintézmény: Ghent University, Belgium, University of Geneva, Svájc, University of Helsinki, Finnország

Egyezmény neve: közös kutatás, finanszírozása a University of Ghent részéről történik

Eredmények: Az adatok felvétele befejeződött, feldolgozásuk most kezdődik.

Hosszabb ideig az intézetben tartózkodó vendégkutatók:

Alexandra Bendixen (1 hónap), Lidia Sesztopalova (4 hónap).

Ipari kapcsolatok:

Provalis Research, Montreal, Kanada, a Regresszív Képzleti Szótár magyar nyelvű változatának kidolgozása

További tudományos együttműködés a 2012-ben megjelent közlemények alapján:

Center for Complex System Studies, Kalamazoo College, MI, United States

IV. A 2012-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Hazai pályázatok

A pályázat megnevezése: Lendület 2012 (LP2012-36/2012)

A pályázati téma megnevezése: Who is talking? Neurocognitive and computational modeling of multi-speaker scenes (Ki beszél? Az egyszerre beszélők hangjának szétválasztása)

A pályázati támogatás mértéke: 332.000 E Ft, (2012: 34.000 E Ft)

A pályázat keretében 2012-ben végzett munka fontosabb eredményei: Megalkották a hallási láncra-bomlás prediktív proto tárgyrepresentációkra épülő komputációs modelljét.

A pályázati téma megnevezése: Vizuális emlékezet és automatikus működés: szabályosságok megsértésének detekciója a látásban; OTKA (104462)

A pályázati támogatás mértéke: 14.904 E Ft (2012: 0 Ft). A pályázat 2013-ban kezdődik.

A pályázati téma megnevezése: Attention and distraction in hearing (Figyelem és elterelődés a hallási modalításban); OTKA (104635)

A pályázati támogatás mértéke: 21.971 E Ft (2012: 1.791 E Ft)

A pályázat megnevezése: Nemzeti Fejlesztési Minisztérium / Magyar Űrkutatási Iroda (URKUT_09-1-2009-0040)

A pályázati téma megnevezése: Extrém környezeti tényezők hatása a viselkedésszabályozásra

A pályázati támogatás mértéke: 3.090 E Ft (2012: 2.000 E Ft)

A pályázati téma megnevezése: Öregedés a versengő társadalomban: a kockázatvállalást kísérő pszichofiziológiai folyamatok; OTKA (K 104332)

A pályázati támogatás mértéke: 31.746 E Ft (2012: 0 Ft)

A pályázat, ill. az azzal kapcsolatos munka 2013. febr. 1-jén kezdődik meg.

A pályázati téma megnevezése: Kulcsingerek és szabályok: A szavak akusztikus és vizuális feldolgozásának neurokognitív vizsgálata; OTKA NK (101087)

A pályázati támogatás mértéke: 66.983 E Ft (2012: 14.425 E Ft)

A pályázat keretében 2012-ben végzett munka fontosabb eredményei:

Az anyanyelv idegen nyelvű hangsúlymintázat elsajátítására gyakorolt hatását vizsgáló kísérlet kimutatta, hogy az idegen nyelvű hangsúly szekvencia tanulásban mutatott teljesítmény alacsony volt a fonéma szekvencia tanulásban mutatott teljesítménynél, akkor is ha a résztvevők több éve tanulták az adott nyelvet. Ez azt mutatja, hogy a magyar beszélők specifikus deficitet mutatnak az idegen nyelvű hangsúlymintázatok feldolgozásában. Egy EKP kísérletben, amelyben csecsemők preattentív hangsúly feldolgozási teljesítményét vizsgálták azt találták, hogy a 6 hónapos csecsemők hangsúlymintázattal kapcsolatos érzékenysége a kiugró akusztikus jellemzőkön alapul, míg a 10 hónapos csecsemők már érzékenyek az anyanyelvük absztrakt hangsúly mintázataira. Továbbá egy új viselkedéses és elektrofiziológiai paradigma kifejlesztésére került sor, amely a különböző szóalakok (szavak, álszavak, számsorok, álbetű sorok) automatikus feldolgozását vizsgálta. A kísérlet eredményei azt mutatták, hogy a korai EKP komponensek különböztek az egyes szóalakok esetén, és a manipuláció hatása (pl. szavak betűinek kicserélése vagy felcserélése) szintén kimutatható volt a komponensekben.

A pályázati téma megnevezése: A kutya és ember társas ingerekre való érzékenységének neurohormonális aspektusai: az oxytocin szerepe; OTKA (K-100695)

A pályázati támogatás mértéke: 20.120 E Ft, (2012: 6.094 E Ft)

A pályázat keretében 2012-ben végzett munka fontosabb eredményei:

Kimutatásra került, hogy az orrspray formájában alkalmazott oxytocin hormonkezelés és a szociális ingerekkel történő előszenszítizálás hasonló módon hat az arc érzélem felismerésére valamint az érzelmi információk későbbi előhívására (erről kézirat benyújtva a Hormones and Behavior folyóirathoz). Kísérletes adatok igazolják azt is, hogy a kutyák esetében az oxytocinnal való kezelés illetve a szociális ingerekkel való előkondicionálás hasonló módon befolyásolja a társas helyzetekben való együttműködési készségüket, és ez a jelenség nagymértékben hasonló az oxytocin humán vizsgálatokban kimutatott szociális viselkedést befolyásoló hatásához (az eredményekből kézirat előkészítés alatt). Folyik továbbá az oxytocin receptor genotipizálásához szükséges DNS mintavétel valamint a kutyák viselkedéses teszt sorozatban való lemérése (eddig N=70 kutya). Ezzel párhuzamosan 12–18 hónapos csecsemők bevonásával a társas viselkedési készségeket felmérő tesztek pilóta vizsgálatai is megkezdődtek.

A pályázat megnevezése: 2012 évi MTA infrastruktúra pályázat (IF-17/2012)

A pályázati támogatás mértéke: 15.000.000 Ft (együtt az Összehasonlító Viselkedéskutató Csoporttal) (1) egy szemmozgás-követő berendezés, valamint (2) a videolabor fejlesztését szolgáló digitális kamera és keverőpult berendezés beszerzésére

Nemzetközi pályázatok

A pályázat megnevezése: Ösztönzés az Európai Unió 7. Kutatási-, technológiafejlesztési és demonstrációs keretprogramjában (FP7) és egyéb közös EU-s kezdeményezésekben való magyar részvétel támogatására (EU_KP_12)

A pályázati téma megnevezése: Brainquest pályázat magyar részvétel támogatás

A pályázati támogatás mértéke: 2 555 024 Ft, (2012: 0 Ft)

A pályázat keretében 2012-ben végzett munka fontosabb eredményei:

Az elektronikus mélység szabályozás elvén alapuló agyi elektródával megvalósult az idegsejt aktivitás nagy idői és téri felbontással történő monitorozása. Az elektródával mért adatok alapján történt a különböző agykérgi és talamikus területek idegsejt-tüzeléseinek jellemzése a lassú hullámú alvás során. Az elvégzett kísérletek igazolták, hogy az elektronikus mélység szabályozás elvén alapuló agyi elektróda akut és krónikus változata is alkalmas jó minőségű agyi elektromos jelek rögzítésére.

A pályázat megnevezése: COST (is1205) (kutatók együttműködését támogatja)

A pályázati téma megnevezése: Történetek szerepe a történelmi eseményekre vonatkozó szociális reprezentációk alakításában

A pályázati támogatás mértéke: 35.000 EUR, (2012: 5.000 EUR)

A pályázat keretében 2012-ben végzett munka fontosabb eredményei: A kutatócsoportok megalakítása (a pályázat november közepén indult)

V. A 2012-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Winkler I, Denham S, Mill R, Bohm TM, Bendixen A: Multistability in auditory stream segregation: a predictive coding view. Philosophical Transactions Royal Society of London Biological Sciences, 367(1591): 1001-1012 (2012)
2. Sulykos I, Czigler I: One plus one is less than two: Visual features elicit non-additive brain activity. Brain Research, 1398: 64-71 (2012)

3. Horváth J, Maess B, Baess P, Tóth A: Action-sound coincidences suppress evoked responses of the human auditory cortex in EEG and MEG. *Journal of Cognitive Neuroscience*, 24(9): 1919-1931 (2012)
4. Tóth B, Boha R, Pósfai M, Gaál ZsA, Kónya A, Stam CJ, Molnár M: EEG synchronization characteristics of functional connectivity and complex network properties of memory maintenance in the delta and theta frequency bands. *International Journal of Psychophysiology*, 83(3): 399-402 (2012)
5. Somogyvári Z, Cserpán D, Ulbert I, Érdi P: Localization of single-cell current sources based on extracellular potential patterns: The spike CSD method. *European Journal of Neuroscience*, 36: 3299-3313 (2012)
6. Téglás E, Gergely A, Kupán K, Miklósi Á, Topál J: Dog's gaze following is tuned to human communicative signals. *Current Biology*, 22(3): 209-222 (2012)
7. Miklósi Á, Topál J: The evolution of canine cognition. In: J Vonk; T Shackelford (szerk.) *The Oxford Handbook of Comparative Evolutionary Psychology*. Oxford; New York: Oxford University Press, 2012 pp. 513-568.
8. Gushin V, Shved D, Vinokhodova A, Vasylieva G, Nitchiporuk I, Ehmann B, Balázs L: Some psychophysiological and behavioral aspects of adaptation to simulated autonomous Mission to Mars. *Acta Astronautica*, 70: 52-57 (2012)
9. Liu J, Paez D, Laszló J, Fülöp M, Suwa K: Cross-cultural dimensions of meaning in the evaluation of events in world history?: Perceptions of historical calamities and progress in cross-cultural data from 30 societies. *Journal of Cross-Cultural Psychology*, 43(2): 251-272 (2012)
10. Becker M, Vignoles VL, Owe E, Brown R, Smith PB, Easterbrook, et al. Fulop M, et al.: Culture and the distinctiveness motive: Constructing identity in individualistic and collectivistic contexts. *Journal of Personality and Social Psychology*, 102(4): 833–855 (2012)
11. Kóbor A, Takács Á, Urbán R, Csépe V: The latent classes of subclinical ADHD symptoms: Convergences of multiple informant reports. *Research in Developmental Disabilities*, 33(5):1677-1689 (2012)
12. Erős F: Some social and political issues related to Ferenczi and the Hungarian school. In: Szekacs-Weisz Judit, Keve, Tom (szerk.) *Ferenczi and his world: rekindling the spirit of the Budapest school*, London: Karnac Books, 2012. pp. 39-54. (The history of psychoanalysis series)

MTA TERMÉSZETTUDOMÁNYI KUTATÓKÖZPONT
MOLEKULÁRIS FARMAKOLÓGIAI INTÉZET

1025 Budapest, Pusztaszeri út 59-67.; 1525 Budapest, Pf. 17.
telefon: (1) 438 1167; fax: (1) 438 1143
e-mail: kardos.julianna@ttk.mta.hu; honlap: <http://www.ttk.mta.hu>

I. A kutatóhely fő feladatai 2012-ben

Az MTA TTK MFI egy új akadémiai kutatóhely, amely a korábbi MTA KK intézetek szakirányú kompetenciáinak összevonásával kezdte meg működését 2012-ben. Az MFI kutatói létszámához viszonyítva a minősített kutatók aránya 2012-ben több mint 0,7 (11 MTA doktora, 35 PhD), a témavezető kutatók aránya 0,16, a Doktori Iskolákba beiratkozott PhD-hallgatók aránya 0,24. Az MFI fejlesztési koncepciója az alábbi tevékenységekre összpontosult: a) az új Centrum multidiszciplináris együttműködési képességének feltárása, kapcsolódó bázis-kapacitások és támogató struktúrák létrehozása; b) a nemzetközileg kiemelkedő színvonal fokozása és a biotechnológiai alkalmazások támogatása a molekuláris farmakológiai, sejtbiológiai, nanobiológiai és spektroszkópiái alap és alkalmazott kutatások területén; c) a hazai és nemzetközi kutatási pályázatokban nyertes kiemelkedő fiatal kutatók vezetői megbízása; d) a graduális és posztgraduális kutató-képzés elősegítése az ELTE, a BME és a SOTE együttműködésével. Az MFI fejlesztési koncepció megvalósítása érdekében a témavezető kutatók bevonásával teljesítmény-követelményi rendszer került kidolgozásra, amely szorgalmazta az idézettséget növelő publikációkat, az MFI és TTK kooperációban született cikkeket továbbá a pályázati források megszerzését, és kapcsolódóan az infrastruktúra fejlesztését.

Megalakulásakor az MFI szakirányú kompetenciái az alábbiak voltak: idegi patomechanizmusok, gyógyszertervezés és hatásvizsgálat; transzporterek és receptorok; őssejtbiológiai kutatások; gyógyszer és nanotoxicitás; metabolikus gyógyszer interakció és individuális terápia; nanorendszerek előállítása, szerkezete és medicinális alkalmazása; fluoreszcencia kölcsönhatások és képalkotás; bioMS. A kutatóhelyen és a kutatócentrumon belüli technológiai platformok megalapozása és kutatási együttműködések fejlesztése érdekében az MFI-ben az alábbi tevékenységek folytak: i) pilot kísérletek fluoreszcens fehérjét szövetspecifikusan kifejező transzgén patkány előállítására (Funkcionális Farmakológiai osztály laboratóriumai); ii) pilot kísérletek indukált pluripotens őssejt alapú idegi vizsgálati modellek létrehozására (Funkcionális Farmakológiai osztály laboratóriumai); iii) membránfehérje funkció követésére alkalmas nanoszenzor prototípus fejlesztés (Biológiai Nanokémiai, Kémiai és Funkcionális Farmakológiai osztályok); iv) optofiziológia technológiai platform megalapozása és közös ERC Synergy pályázat benyújtása (MFI Kémiai és Funkcionális Farmakológiai, Biológiai Nanokémia és Spektroszkópiái osztályok, továbbá KPI, MFA); v) a nanotoxicitás vizsgálati platformjának szerkezeti, kémiai valamint *in vitro* és *in vivo* biológiai megalapozása (MFI Kémiai és Funkcionális Farmakológiai, valamint Biológiai Nanokémia osztályok továbbá AKI, KPI, MFA, SzKI).

II. A 2012-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Biokémiai farmakológiai kutatások

Nagy affinitású specifikus kölcsönhatást mutattak ki néhány szintetikus β -karbolin származék (Servier Kutatóintézet Zrt., potenciális MAO és kinázgátló gyógyszerjelöltek) HSA és AGP

szérumfehérje kötődésére. Elvégezték a humán szérum albumin egy új gyógyszerkötő régiójának azonosítását és részletes vizsgálatát. Egy erre alkalmas CD-spektroszkópiás jelzővegyülettel (biliverdin) feltérképezték az új kötőhely jellegzetes ligandumait. Kimutatták és részletesen jellemezték az új és a már ismert kötőhelyek közötti allosztérikus kölcsönhatásokat. CD-spektroszkópiás mérésekkel igazolták réz- és cink ionok kötődését humán amyloid prekursor fehérjéből származó peptidekhez. Savas karakterű hatóanyagok (véralvadásgátlók, peszticidek, nem-szteroid gyulladáscsökkentők) sztereoszelektív elválasztását oldották meg és komplexképződését jellemezték új fejlesztésű (Cyclolab Kft.), bázikus sajátságú ciklodextrin szelektorokkal. Endomorfín analóg tetrapeptid diasztereomerek optikai tisztaságának vizsgálatára sztereoszelektív kapilláris elektroforézis analitikai módszert dolgoztak ki. A véralvadásgátló warfarin permetilált-monoamino- β -ciklodextrinnel alkotott komplexének stabilitását és szerkezetét határozták meg kapilláris elektroforézisben sztereoszelektív vizsgálatokkal

Megkezdtek a CYPtestTM diagnosztikai eljárás validálását és klinikai kipróbálását. A CYPtestTM a szervezet gyógyszer-lebontó 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 génhibák kimutatásán (CYP-genotipizálás) alapul. A CYPtestTM nemzetközi szabadalmi bejelentése megtörtént (PCT/IB2012/055299).

Funkcionális farmakológiai kutatások

Feltárták egy új típusú, korábban általuk leírt, glutaminsav felvétellel közvetlenül kiváltható gliális γ -amino-vajsav (GABA) kibocsátási folyamat forrását és *in vitro* epilepszia modellben felderítették hatását a neuronális és gliális aktivitásra. Az ERA Chemistry projekt keretében új gyógyszerjelölt vegyületeket fejlesztettek ezen neuroprotektív mechanizmus gyógyászati célú kiaknázására. A NANOSEN9 projekt támogatásával egyedi ionsatornák aktivitásának mérésére alkalmas nanoszenzort fejlesztettek ki, melyet a Richter Gyógyszergyár is támogatott, valamint vizsgálati protokollt dolgoztak ki nanorészecskék funkcionális neurotoxicitásának meghatározására. Feltérképezték a jelölésmentes agyi aktivitás térképezést lehetővé tevő Intrinsic Optical Signal létrejöttében szerepet játszó neuronális és gliális mechanizmusokat. Kalcium-szenzitív fehérjét expresszáló új patkány állatmodellt hoztak létre és karakterizáltak. Elvégezték idegsejteké differenciáltatott humán indukált pluripotens sejtek elektrofiziológiai karakterizációját, melyek alkalmasak lehetnek egyén-specifikus terápiás stratégiák megvalósítására.

Beállították frissen izolált a humán és patkány májsejt kultúra felhasználásával egy *in vitro* májmodellt, amelyben tesztelhető gyógyszer hatóanyagok uptake mechanizmusa, az uptake folyamatokban résztvevő transzporterek aránya, valamint az uptake folyamán előforduló interakciók más exogén és endogén vegyületekkel. A módszer alkalmas a fajok közötti uptake folyamatok különbségének, és az ebből adódó ADMETox tulajdonságok faji eltérésének tisztázására. A francia Biopredic biotechnológiai céggel történő együttműködés keretében igazolták, hogy a HepaRG humán hepatocarcinoma sejtvonala a többi sejtvonallal képest lényegesen jobb uptake expressziót mutat, és ezzel a sejtvonallal sikeres funkcionális vizsgálatokat és gyógyszer interakciót mértek. Igazolták, hogy kolesztatikus gyógyszerek hatására a HepaRG sejteken mért uptake gátlás a patkány hepatocitákkal mértnél jobban korrelál a humán hepatocitákkal, ezért helyettesíthetőek ezeknél a vizsgálatoknál. Kezdeti kísérletek indultak hepatocita Kupffer sejt ko-kultúra kialakításához. Sikeresen preparáltak jó életképességű Kupffer sejteket, és a kezdeti eredmények ígéretesek a két sejtípus együttes közös kultúrában tartásához. Kutatásokat végeznek a peptidomimetikumok előállítására és a

sztereoindukció vizsgálatára vonatkozóan Ugi-reakciókban királis karbonil vegyületek, királis aminok és királis izonitrilek használatával.

2011 decemberében a Biomembrán Laboratórium több munkatársa csatlakozott a TTK Molekuláris Farmakológiai Intézetéhez. A munkatársak több OTKA-pályázatát az MFI fogadta be, így a pályázatok résztvevőit is itt alkalmazták. A pályázatok három fő kutatási iránya a daganatok gyógyszerrezisztenciáját okozó membrán transzporterek, az aktív kalcium transzporterek, és a a prion típusú membránfehérjék vizsgálata volt. Ugyancsak az MFI alkalmazásába kerültek a humán embrionális őssejtekkel foglalkozó laboratórium és a molekuláris biológiai vizsgálatokat végző laboratórium munkatársai. Az egymással szoros kapcsolatban álló munkacsoportok számos közleménye jelent meg nemzetközi folyóiratokban. A legfontosabb eredmények közül a következők emelhetők ki: Az ABC multidrog transzporterek vizsgálatához olyan sejt vonalakat állítottak elő, amelyek a tumor őssejtekhez hasonlóan magas ABCG2 és ABCB1 expressziót mutatnak, ezeken olyan új daganatellenes szereket vizsgáltak, amelyeknek transzporter kölcsönhatásai jelentősen módosíthatják klinikai hatásukat. Evvel kapcsolatban olyan új diagnosztikai eljárást fejlesztettek ki, amely alkalmas a drog kölcsönhatások gyors, nagykapacitású vizsgálatára. Kidolgozták az ABCG2 hatékony tisztítási és rekonstrukciós módszerét. Új, stabilan integrált kalcium indikátor fehérjéket alkalmaztak az aktív kalcium transzporterek és a sejtek kalcium jeleinek vizsgálatához. Részletesen elemezték az őssejtek és a differenciálódó sejtek kalcium háztartását és a ligand-indukált kalcium jeleket. Új expressziós rendszereket, transzpozon-alapú stabil integrációs módszereket fejlesztettek a membrán transzporterek, a prion-fehérjék és a fluoreszcens indikátor fehérjék kifejezéséhez tumorsejtekben, specifikus normál sejtekben és humán embrionális őssejtekben. A módszerek alkalmazásával új módszert vezettek be humán indukált pluripotens őssejtek létrehozására. A laboratórium új témájaként az RNS interferencia folyamatába tartozó mikroRNS biogenezis egyik alternatív útvonalát, a mirtron útvonalat emlős sejtekben részletesen jellemezték. Kiemelendő, hogy a nagy nemzetközi versenyben elfogadott tudományos munkát a rangos szakfolyóirat (RNA Biology) olyan érdekesnek találta, hogy a mirtron útvonalról készített ábrát a 2012. szeptemberi szám címlapján szerepeltették.

A Molekuláris Sejtbiológiai Laboratórium 2012-ben alakult meg az MTA Lendület Program támogatásával és jelentős intézeti támogatással. Kimutatták a lipid anyagcserében fontos szerepet játszó ABCG1, illetve ABCG4 fehérjék funkcionális kölcsönhatását különböző szterollokkal, és megkezdték a kölcsönható régiók feltérképezését. Ezekből az eredményekből egy kézirat is elkészült. Egy széleskörű nemzetközi együttműködés keretében feltárták a sejtek energiaháztartását szabályozó LKB1/AMPK kinázok szerepét a máj legfontosabb epe-transzporterének, az ABCB11 sejt felszíni megjelenésének szabályozásában. Sikerült rávilágítaniuk egy alternatív szabályozó (PKA-függő) útvonal létezésére és szerepére is. Az eredmények nemzetközi ismertetése érdekében közleményt nyújtottak be.

Biológiai nanokémiai kutatások

Lipid membrán PAMAM dendrimer nanohordozó hatására bekövetkező szerkezeti tulajdonságainak változását figyelték meg kisszögű röntgenszórás és fagyasztva törés EM spektroszkópia kombinációjával.

Szövetbarát, nem toxikus polialmasav biomembránokra kifejtett hatását tanulmányozták multilamellás vezikulákban. Gyógyszermolekulák bevitelére szolgáló, sztérikusan stabilizált vezikulák esetében használt polietilén-glikol tartalmú lipidek helyett, polialmasavat alkalmaztak és az előállított unilamellás vezikulákat fizikai-kémiai módszerekkel széleskörűen jellemezték.

Az élő szervezetben lejátszódó létfontosságú folyamatok mechanizmusának megismerése céljából pirokatechin oxidáz, fenoxazinon szintetáz, szuperoxid dizmutáz és kataláz enzimek funkcionális modellezését végezték el mangán, vas és nikkel dioximátó komplex származékokkal.

Biológiai rendszerekben, képkalkotási célra hasznosítható módosított felületű nanoméretű szilikarészecskéket és fluoreszcens tulajdonságú, nagyfokú biokompatibilással rendelkező arany komplexeket állítottak elő.

Összetett nanorendszerek kisszögű röntgenszórásos vizsgálatára alkalmas eszközt és a mérési eredmények feldolgozásához szükséges számítógépes programot fejlesztettek.

Spektroszkópiai kutatások

Többféle aranykomplex szerkezetét és optikai tulajdonságait tanulmányozták. Az aranykomplexek oldatbeli tulajdonságainak leírásához új arany-oldószer molekuláris dinamikai párpotenciált dolgoztak ki, amely lehetővé teszi a vizsgálható szupramolekulák körének bővítését az önszerveződő fémkomplexek körében. Az SZKI Szupramolekuláris Laboratóriumban előállított arany és ón komplexek mechanolumineszcens tulajdonságát mutatták ki. Fluoreszcens arany klaszterek képződését figyelték meg fehérjékben és feltárták, hogy a fehérjeszerkezet mely részlete szükséges a klaszterképződéshez. PAMAM dendrimerek és modellmembránok kölcsönhatásait tanulmányozták összegfrekvencia-keltési spektroszkópiával. Megállapították, hogy a dendrimerek a foszfolipid kettősréteg rendezettségét és töltéseloszlását is megváltoztatják.

A fényelnyelés hatására színváltozást mutató anyagok szupramolekulás komplexeinek tanulmányozása során, kukurbit[7]uril üregébe ékelődéssel sikerült szelektíven befolyásolni protonált merocianin és spiropirán izomerek közötti fotokémiai átalakulás kinetikáját. A ftálimidszármazékok molekulászerkezete és fényelnyelési reakcióik sebessége közötti kapcsolat feltárásával elősegítették a fotoredukció hatásfokának javítását.

Tioszermikarbazon rézkomplexek oldategyensúlyi tulajdonságait vizsgálták ESR spektroszkópiával, mivel újabban hatásosnak bizonyultak több humán rákos sejtvonalon is. ELTE kooperáció keretében megkezdték több biológiai eredetű minta és gyógyszerkészítmény ESR-vizsgálatát. A SOTE Orvosi Biokémiai Intézetének és a Department of Pharmacology, College of Medicine, The Ohio State University munkatársaival együttműködve reaktív N,O,C centrált gyökök spincsapdázási lehetőségeit tanulmányozták különböző csapdák esetén biológiai illetve modellrendszerekben. Az eredményekből eddig egy publikáció született.

b) Tudomány és társadalom

Az intézet számos tudománynépszerűsítő fórumon számolt be kutatási tevékenységéről és eredményeiről.

A biokémiai farmakológiai kutatásokról a Természet Világa tudományos ismeretterjesztő folyóiratban, valamint az MTA-OTKA és az MTA TTK honlapokon adtak tájékoztatást.

A metabolikus gyógyszer-kölcsönhatások laboratórium tájékoztatta az érdeklődőket a CYPtestTM vizsgálat alapján kialakítható személyre szabott gyógyszeres terápia lehetőségeiről, amely biztosítja az ésszerű, kevesebb nem kívánt hatással és csökkent gyógyszerfogyasztással járó terápia kialakítását. Bemutatták a személyre szabott terápia és a betegek gyógyszer-lebontóképességéhez igazított terápiai stratégia lehetőségeit, amely hatékonyabb, kevesebb mellékhatással járó gyógyszeres kezeléshez vezet, és végül is egy

költségtakarékos, rövidebb kórházi kezelést igénylő ellátást és a betegek életminőségének javulását eredményezi. A tájékoztatás napi és hetilapokban, rádió és TV műsorokban, valamint laboratórium bemutató keretében történt.

Az MTA Magyar Tudomány Ünnepe rendezvénysorozat keretében „Megfejthető-e az agy kapcsolási térképe?” címmel laborbemutatóval egybekötött előadást szerveztek, melyet az MTA kiemelt programként mutatott be. Az előadás anyagát több médium is sugározta (Kossuth Rádió, d1 TV). Részt vettek több, laikusoknak szervezett ismeretterjesztő előadáson (pl. Budapest Science Meetup). A Kémiai Panoráma című, középiskolásokat megcélzó folyóirat munkájában szerzőként, valamint rovatvezetőként vettek részt.

A Biomembrán Laboratórium vezetője több interjút adott kutatásairól, illetve a kapcsolatos kutatások legújabb nemzetközi trendjeiről (MTA honlap, Kossuth Rádió, Klubrádió). A Laboratórium munkatársai bemutatót tartottak a Kutatók Éjszakája rendezvényen és az MTÜ Tárt Kapuk rendezvényen, ahol különösen a pluripotens őssejtek és a differenciálódott leánysejtek, a daganatkutatási eredmények, valamint a molekuláris genetikai vizsgálatok keltettek széleskörű érdeklődést.

A Tér-idő című rádióműsorban interjú hangzott el a Molekuláris Sejtbiológiai Laboratórium vezetőjének kutatásairól. A Kutatók éjszakája, valamint a Magyar Tudomány Ünnepe Tárt Kapu rendezvényeken az érdeklődő közönség megismerhette a kutatócsoport tevékenységét.

A Biológiai nanokémiai osztály kutatói az érdeklődő, szakosodás előtt álló egyetemi hallgatóknak, intézeti látogatáson résztvevő egyetemi hallgatóknak, valamint középiskolásoknak tartottak demonstrációs előadásokat és laboratóriumi eszközbemutatót. A biomembránok összetett tulajdonságának megismerését nyújtó vezikulás rendszerekről ismeretterjesztő cikket írtak a Kémiai Panoráma népszerűsítő folyóiratba. Ismeretterjesztő előadást tartottak a Budapest Science Meetup fórum keretében.

A Spektroszkópiai osztály témavezetőként részt vett az MTA TTK „AKI kíváncsi kémikus” kutatótábor rendezvényen.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2012-ben

Az MFI számos hazai (MTA Wigner Fizikai Kutatóközpont, MTA Szegedi Biológiai Központ; BME, ELTE, SZTE, DTE, SOTE, Szent István Egyetem, Heim Pál Gyermekkorház, Országos Onkológiai Intézet; Richter Gedeon Nyrt., CycloLab, Creative Labor Kft., KPS Kft., LuminoChem Kft., Nanochem Kft., Vichem Kft) és nemzetközi (így pl. a Catholic Univ. Louvain, (B); CNRS, Paris (F); ESRF, Grenoble (F); Inst. Natn. Santé et Rech. Médicale, Montpellier (F); Max von Laue-Paul Langevin Inst., Grenoble (F); Natn. Inst. Nuclear Physics, (I); Palacky Univ., (CZ); Ruhr Univ. Bochum (D); Univ. Provence, Marseille (F); Univ. Louis Pasteur de Strasbourg (F); Univ. Antwerpen (B); Univ. Copenhagen (D); Univ. Kuopio (FI); Univ. Ljubljana (SL); Univ. North Carolina, Chapel Hill, NC (USA); Univ. Rennes (F); Univ. Turku (FI); Yantai Univ., Yantai (CH)) kapcsolattal rendelkezik.

Hazai kapcsolatok

Az „Endomorfín analóg tetrapeptid sztereoszelektív elválasztása kapilláris elektroforézissel” című téma keretében az intézet a Szegedi Tudományegyetem, MTA Szegedi Biológiai Központjával kutatási együttműködést alakított ki. A kooperáció során az endomorfín analóg tetrapeptid diasztereomerek optikai tisztaságának vizsgálatára sztereoszelektív kapilláris elektroforézis analitikai módszert dolgoztak ki. A közös munka eredményéről publikációt jelentettek meg.

A Farmakokinetika és Gyógyszermetabolizmus Szimpóziumot a Magyar Kísérletes és Klinikai Farmakológiai Társasággal együttműködve rendezték. A szimpózium, amely 2012. április 18–20. között került megrendezésre Galyatetőn, teret adott a klasszikus farmakokinetikai és metabolizmus vizsgálatokon túl az *in silico* farmakokinetikai becslésekkel, a transzporter fehérjékkel, az igazságügyi-klinikai vizsgálatokkal, a hatósági irányelvek változásaival, valamint az új analitikai és biotechnológia megoldásokkal kapcsolatos problémák megvitatásának. A szimpózium eredményeit konferencia kiadványban megjelentették.

A „Személyre szabott gyógyszeres terápia kialakítása a beteg gyógyszer-lebontó képessége alapján” témában klinikákkal és kórházakkal (Fővárosi Önkormányzat Egyesített Szent István és Szent László Kórház Budapest, Gottsegen György Országos Kardiológiai Intézet Budapest, a Semmelweis Egyetem, Transzplantációs és Sebészeti Klinika Budapest, Semmelweis Egyetem Pszichiátriai és Pszichoterápiás Klinika Budapest, Heim Pál Kórház, Madarász Utcai Gyermekkórház Budapest, Fejér Megyei Szent György Kórház Székesfehérvár) működtek együtt. Ennek keretében a CYPtestTM alkalmazásával vizsgálják a betegek gyógyszer-lebontó- (méregtelenítő) képességét, és közösen kialakítják a betegek egyéni gyógyszeres terápiáját. A közös munka eredményeit egy tudományos közleményben és számos előadásban, konferencia keretében ismertették.

Az intézet „Egy új szolgáltatás, a CYPtest továbbfejlesztése és piaci bevezetése a személyre szabott gyógyszeres terápia kialakításában” című témában a Toxi-Coop Zrt. partnerrel együtt végeztek kutatásfejlesztési tevékenységet. A „Szakértői program a gyógyszer-lebontás és kiürítés becslésére” című témában is eredményesen kooperált az intézet a Toxi-Coop Zrt. kutatóival. A rendelkezésre álló irodalmi adatok alapján feltérképezték ismert gyógyszerek *in vitro* farmakokinetikai és metabolikus sajátosságait, intrinsic clearance értékét, metabolizmusának sebességét, a metabolizmus során képződött termékek szerkezetét, valamint az egyes metabolitok képződésében szerepet játszó CYP enzimeket.

A DNS metilációjának meghatározását az intézet az Enzimológiai Intézet kutatócsoportjával végezte. A korábban kidolgozott LC/MS/MS alapú metilációs profil meghatározást alkalmazták számos biológiai mintán. Kutatási eredményeiket egy publikációban közzétették.

A konnektóm térképezési módszerek kidolgozása érdekében az intézet kutatási szerződést kötött a Richter Gedeon Nyrt. céggel. A „Nanosentry alapú konnektóm térképezés” című szerződés keretében immunhisztokémiai jelölési módszert dolgoztak ki, melynek révén a saját fejlesztésű nanoszenzorok fiziológias aktivitást mutató akut agyszövetben is célba juttathatók.

A „Komplex sejtkultúra- és membránvezikula-alapú *in vitro* szolgáltatáscsomag fejlesztés koleszterikus anyagok nagy érzékenységgel preklinikai szűrésére” című pályázat keretében a Solvo Biotechnology kutatócsoportjával együttműködve a kutatók a hepatobiliáris uptake és efflux transzporterek expressziójának változását határozták meg a kultúra idejének függvényében. A gyógyszer-interakciók vizsgálatára alkalmas tesztekkel dolgoztak ki humán és patkány hepatociták felhasználásával. A témában egy publikáció jelent meg.

Az intézet közös projektet indított el az Immunogene Kft. közreműködésével. Ezt követően, közös KMR12 pályázatot nyújtott be „Kalcium érzékelő fehérjét szövetspecifikusan kifejező transzgenikus patkányok létrehozása *in vivo* gyógyszervizsgálatok céljára” című kutatási projekt megvalósítása érdekében. Együttműködő partnerintézmények az MTA Kémiai Technológia Transzfer Kft., az MTA TKI és a Toxi-Coop Zrt. A projekt keretében kalcium-szenzitív fehérjét szövet-specifikusan expresszáló új patkány állatmodellt hoztak létre és karakterizáltak.

Az intézet Biomembrán és a Molekuláris Sejtbiológiai Laboratóriumai szoros együttműködésben állnak a Semmelweis Egyetemen Biofizikai és Sugárbiológiai Intézetével, és annak keretében működő Molekuláris Biofizika Kutatócsoporttal. A laboratórium tagjai rendszeresen részt vesznek az ELTE/TTK és a Semmelweis Egyetem posztgraduális képzésében – kurzusok tartásával (Membránbiológia kurzus), PhD-értekezések és egyetemi pályázatok bírálatával, bizottsági tagi részvétellel.

Az intézet Molekuláris Sejtbiológiai Laboratóriuma ipari együttműködést készített elő az indukált pluripotens őssejtek felhasználása témában, melyben partnere a Richter Gedeon Nyrt. Az együttműködéshez szükséges kísérlettervet és költségvetést kidolgozták.

Az „Önszerveződő lamelláris molekuláris szerkezetek struktúrája és dinamikai sajátosságai” című konzorcionális OTKA-pályázat keretében – az MTA Szegedi Biológiai Központtal és az MTA Wigner Fizikai Központtal együttműködve – a Biológiai Nanokémia Osztály a preparált modellmembrán (vezikuláris) rendszerek szerkezeti jellemzését az osztály röntgenszórásos berendezéseinek és a Wigner Fizikai Központ neutronszórásos berendezésének felhasználásával valósították meg. A témában egy publikáció jelent meg.

„A trombus mátrix proteolitikus lebontása: új célpontok és eszközök a trombolízis területén” című OTKA-pályázat keretében az intézet kooperáló partnere a Semmelweis Egyetem Orvosi Biokémia Intézete volt. A kutatók a trombus kezelést biztosító gyógyszermolekula célba juttatását biztosító vezikulás rendszerek szerkezeti és morfológiai jellemzését végezték el. A szöveti környezetben lévő anyagok (fibrin, fehérjék) vezikulákkal történő kölcsönhatását tanulmányozták. DNS és hiszton tartalmú fibrin mátrixok (rögök) szerkezeti és reológiai sajátosságait jellemezték és azok közötti összefüggéseket tártak fel. Az eredményeikről egy publikációban számoltak be.

A „Minőségellenőrzési vizsgálatok elvégzése” című kutatásait az Izotóp Intézet Kft.-vel közösen végezte. A megrendelő részére minőségi analitikai célokra infravörös és Raman spektroszkópiai méréseket, és az azokhoz tartozó kiértékeléseket végzett.

A „Fertőzéses betegségek kezelésére szolgáló készítmények fagyasztatöréses vizsgálata” című témában az intézet együttműködő partnere a Richter Gedeon Nyrt. volt. Az intézet a megrendelő részére morfológiai jellemzést és a kolloidrendszer szerkezeti típusának feltárását biztosító kutatási munkát végzett.

Továbbá a „Hialuronsav és sóinak fiziko-kémiai jellemzése” című közös kutatási témában az intézet a röntgenszórással feltárható nanoszerkezeti, atomi kölcsönhatásokat feltáró spektroszkópiai, azokhoz értelmezését segítő modellszámításokat, NMR és morfológiai vizsgálatokat végzett. A minták molekulaméretének meghatározását és a komplex tulajdonságokkal bíró reológiai jellemzését is elvégezték. Eredményeikről egy előadás és egy tudományos poszter formájában adtak számot.

A „Kisszögű röntgenszórásos (SAXS) módszer kiépítése és működtetése” kutatási projekt keretében (Richter Gedeon Nyrt. kutatóival partnerségben) a hazai kutatóhelyeket tekintve egyedülálló, nemzetközi szempontból a legmagasabb technikai színvonalnak megfelelő kutatóeszköz első változatát tervezték és vásárolt alkatrészek felhasználásával építették fel.

A „DunaStyr vízminták vizsgálata” című kutatási témában a DunaStyr Zrt. technológiájában felhasznált víz kolloid tartalmának vizsgálatát és morfológiai jellemzését végezték el.

Az intézet a BME közös Lézerspektroszkópia Laboratóriuma a „Molekuláris szenzorok és kapcsolók” kutatási témában vizsgálatokat végeztek. Új abszorpciós és fluoreszcens anion-szenzorokat szintetizáltak, valamint elvégezték azok spektroszkópiai és fotokémiai jellemzését. Az egyik „podand-szerkezetű” vízoldható fluoreszcens szenzor, nukleozid

trifoszfátok kimutatásra alkalmasnak bizonyult, ezt a vegyületet intracelluláris folyamatok mikroszkópos követésére is kívánják vizsgálni. A témában egy közös publikáció jelent meg.

A „Katalizátorok szintézise és alkalmazása” című témában az intézet együttműködő partnere a BME volt. Spektroszkópiai mérések alapján jellemezték arilpirrol vegyületek szerkezetét, királis izomerjeinek stabilitását. Az ilyen vegyületek királis katalizátor-hatásuk miatt jelentősek. WO_3 nanorészecskék fotokatalitikus hatékonyságát vizsgálták a kristályszerkezet függvényében. Az eredményeikről két közös publikációban számoltak be.

Az intézet, továbbá az MTA Wigner Fizikai Kutatóközpont és az MTA Energiatudományi Kutatóközpont „Neutron diffrakciós módszerek és komplementer módszereinek fejlesztése” című kutatási projekt (Nap Veneus) keretében nemzetközi tudományos együttműködést folytatott. A neutron diffrakciós mérések elméleti optimalizálását végezték el: izotóphelyettesítéses folyadék diffrakciós kísérletek tervezéséhez kapcsolódóan. Eredményeiket egy közleményben prezentálták.

Nemzetközi kapcsolatok

A „Tropeinek szerkezet-hatás összefüggései nikotinos acetilkolin receptor modelleken” témában nemzetközi kutatási együttműködést építettek ki az University of California, San Diego (USA) kutatóival. Eredményeik a nikotinos receptor altípus-szelektivitás vizsgálatokhoz kapcsolódnak.

Együttműködési megállapodás formájában tanulmányozták szteroid típusú vegyületek homeosztázisa, valamint a gyógyszer-metabolizmus és szabályozás kapcsolatának *in vitro* kísérletes és matematikai modellezését a Ljubljana-i Egyetem, Orvosi Kar (Ljubljana, Szlovénia) munkatársaival. Két benyújtott tudományos cikk és egy meghívott plenáris előadás formájában ismertették az eredményeket.

A „GABA transzporter altípus specifikus vegyületek fejlesztése” című témában, az University of Leuven (Belgium) kutatóival sikeresen kollaboráltak. Az ERA Chemistry projekt címe: „Novel targets and new drug candidates to combat epilepsy: Design of subtype-selective spirocyclic inhibitors to distinguish among gamma-aminobutyric acid transporter protein subtypes.” A pályázat keretében új gyógyszerjelölt vegyületeket fejlesztettek a neuroprotektív Glu/GABA mechanizmus gyógyászati célú kiaknázására.

Az intézet szimpóziumot szervezett a XI. European Meeting on Glial Cells in Health and Disease (Berlin, Németország) nemzetközi konferencián, amelynek címe „Role of glial GABA transporters in controlling neurotransmission” volt. Az együttműködő partnerintézmények neve: University of Utah (USA), University of California, Los Angeles (USA) és University of Mainz (Németország).

A szerotonin szerepének megértése az axon-növekedés szabályozásában kutatási témában MTA mobilitási pályázatot nyújtott be az intézet. Kooperáló partnerek: Kyoto University (Japán) és az ELTE. A pályázat címe: „A szerotonin szerepe a gasztrulációs mozgások és az axon-növekedés szabályozásában”.

Az „Új típusú connectome térképezési módszerek kidolgozása” című kutatási téma megvalósítása érdekében konzorciumot hoztak létre és egy FET Open pályázatot nyújtottak be amelynek címe: „The dynamic connectome project: reverse-engineering the structure and information processing algorithms of neuronal networks”. Partnerintézetek az University of Newcastle (UK), Ruhr University, Bochum (Németország) és az MTA KOKI.

A „HepaRG, humán hepatoma sejt vonal uptake transzporter proteinjeinek jellemzése” című témában az intézet közös kutatásokat végez a francia Biopredic International (Rennes)

kutatócsoporttal. A HepaRG sejt vonal helyettesítheti a nagyon korlátozottan rendelkezésre álló humán primer hepatocitákat *in vitro* ADMETox vizsgálatokban. Igazolták, hogy az uptake transzporterek gyógyszer-interakciós vizsgálatai hasonló eredményre vezettek a két sejt típusban.

A Biomembrán laboratórium nemzetközi ACHILLES kutatási projekt keretében kutatási tevékenységet folytatott a daganatsejtek transzportereinek vizsgálatára vonatkozóan. Partnerintézetek az MTA Enzimológia Intézet, az Université de Lyon (Franciaország) és a Mayo Clinic (USA) volt.

A Biomembrán laboratórium „Az ABCG2 transzporter alkalmazása gyógyszer kölcsönhatások vizsgálatára” kutatási tevékenységet a Fluorosme Company, Worcester, Massachusetts (USA) partnerrel dolgozta ki.

Az „LKB1 szabályozó szerepe a sejtek polaritásában” című témában széleskörű nemzetközi együttműködés formájában végeztek kutatásokat. Együttműködő partnerintézmények: National Institute of Child Health and Human Development, NIH, Bethesda (USA), National Institute of Dental and Craniofacial Research, NIH, Bethesda (USA), Faculty of Pharmacy, The University of Sydney, NSW 2006, (Ausztrália), Laboratory of Molecular Cancer Biology, University of Namur, Bruxelles, (Belgium) és University of California, San Diego, La Jolla, CA (USA). Feltárták a sejtek energiaháztartását meghatározó LKB1/AMPK kinázok szabályozó szerepét a májsejtek polaritásában.

Az MTA–CNRS együttműködés lehetőséget biztosított az anyagtudományban és gyógyszerhatóanyag szállításban hasznosítható szupramolekuláris kölcsönhatások vizsgálatára. A partnerintézmény az Institut de Chimie et des Matériaux Paris-Est (Thiais, Franciaország) volt. Feltárták az 1-alkil-3-metil-imidazólium típusú ionos folyadékok molekuláris szerkezetének hatását a 4-szulfonáto-kalix[8]arén makrociklushoz kötődés termodinamikájára. Megállapították, hogy szupramolekuláris komplex képződés elősegíti szerves anyagból felépülő nanorészecskék keletkezését.

A „Szemikarbazon és tioszemikarbazon származékok oldategyensúlyi vizsgálata” című pályázat keretében kutatásokat végeznek a Szegedi Tudományegyetemmel. A vizsgálatokban az osztrák University of Vienna munkatársai is részt vesznek. Az orvosi gyakorlatban számos rákellenes hatású fémkomplexet használnak, de ezek mellékhatásai és a gyakran kialakuló rezisztencia miatt szükséges ezek további vizsgálata és fejlesztése. A tioszemikarbazon vegyületek rézkomplexei újabban hatásosnak bizonyultak több humán rákos sejt vonalon is. A vegyületek oldatkémiai vizsgálata hozzásegíti a biológusokat-gyógyszerészeket ezen vegyületek gyógyszer-hatásmechanizmusának és *in vivo* alkalmazhatóságának felderítésében. A témában három közös publikációt jelentettek meg.

A „Cisz/transz-2-aminociklohexán-karbonsav származékok vizsgálata CW/pulzus ESR és DFT módszerekkel” című FWO (G.0468.03) és COST Action P15 együttműködésben az intézet a belgiumi University of Antwerpen kutatóival közösen végez vizsgálatokat. Megállapították, hogy a 2-aminociklohexán karbonsavak cisz/transz izomerjeinek komplexképző sajátsága réz(II)ionokkal eltérést mutat. A cisz izomerek stabilitása jelentősen nagyobb a transz izomerekéhez képest. Ennek vizsgálatát CW- és pulzus-ESR mérések, valamint kiegészítő DFT számítások segítségével végezték el. Az eredményekről egy közleményben adtak tájékoztatást.

Az. „Oxovanádium(IV)ionok kötődésének vizsgálata human serum albuminnal” témában Szegedi Tudományegyetemmel és Instituto Superior Técnico, Lisszabon (Portugália) végeztek kutatási tevékenységet. Az inzulin utánzó vanádium komplexek biotranszformációja vérben egy fontos vizsgálati cél a gyógyszerhatás növelése érdekében. A gyógyszer felszívódására,

transzportjára és metabolizmusára jelentős hatást gyakorolhatnak a plazmában előforduló nagy tömegszámú komponensek. A vanádium szállításában a human serum albumin szerepét mutatták ki, amely a legnagyobb affinitással köti meg a vanádium komplexeket. Ezért ennek a kötődésnek az oldategyensúlyi vizsgálatát végezték el különböző módszerekkel, melyek között az ESR-spektroszkópia a szerkezetvizsgálat szempontjából jelentős hozzájárulást adott. A témában egy publikációt jelentettek meg.

A „Biológiai releváns reaktív gyökök kimutatása” című kutatást a SOTE Orvosi Biokémiai Intézet, az Aix Marseille University, Institut de Chimie Radicalaire, valamint az The Ohio State University (USA) munkatársaival együttműködve végezték. A kooperáció keretében a biológiai releváns reaktív gyökök kimutatását elvégezték különböző spincsapdák segítségével biológiai, illetve modellrendszerekben, melyről egy közleményben számoltak be. Az itt szerzett ismeretek toxikológiában is alkalmazhatók.

A „Mágneses nanorészecskéket tartalmazó gyógyhatású készítmények és biológiai eredetű minták vizsgálata” címmel kutatásokat végeztek az Ural Federal University Kísérleti Fizika Tanszék és az ELTE Kémiai Intézet munkatársaival. Az ESR-spektroszkópia és a Mössbauer-spektroszkópia alkalmazásával biológiai eredetű minták, illetve gyógyszerkészítmények szerkezeti és mágneses tulajdonságait kutatják elsősorban azzal a céllal, hogy felderítsék a biológiai és spektroszkópiai módszerek segítségével kimutatható jellemzők között fennálló esetleges összefüggéseket, melyek hozzájárulhatnak egyes biológiai folyamatok alapjainak teljesebb megértéséhez. E témában két publikációt nyújtottak be.

IV. A 2012-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Az MFI 2012. évi bevétele mintegy 10 %-kal haladta meg a kiadásainak összegét miközben új, önerős nagyműszer beruházások jöttek létre (SAXS, *in vitro* kétfoton mikroszkópia). Az MFI várható MTA központi támogatása és a már megkötött szerződéses bevételei alapján az intézet 2013., 2014. és 2015. évi működését is sikerült biztosítani.

Az MTA Lendület Program (LP2012-25/2012) keretében az „ABC transzporterek sejten belüli mozgásának tanulmányozása polarizált sejtekben” című kutatásokat végzi az intézet Molekuláris Sejtbiológiai Laboratóriuma. A pályázati támogatás mértéke: 234 M Ft ebből a 2012. esztendőben kapott forrás 30 M Ft. A kutatócsoport elvégezte bizonyos ABC transzporterek (ABCG1 és izoformáinak, valamint ABCG4) kölcsönhatásának vizsgálatát, a kölcsönható régiók feltérképezését, továbbá feltárták az LKB1/AMPK kinázok szabályozó szerepét az ABCB11 epetranszporter sejt felszínén történő megjelenésében májsejtekben.

A Nemzeti Fejlesztési Ügynökség által a „Piacorientált kutatás-fejlesztési tevékenység támogatása a közép-magyarországi régióban, KMR_12” program keretében benyújtott és elnyert pályázat címe: „Kalcium érzékelő fehérjét szövet-specifikusan kifejező transzgenikus patkányok létrehozása *in vivo* gyógyszervizsgálatok céljára” („TransRat”, KMR_12-1-2012-0112). Az intézet pályázati támogatása: 128 M Ft, ebből a 2012. esztendőben kifizetett előleg: 64 M Ft. A kétéves pályázat során transzpozon-alapú génbeviteli eljárással kalciumszintet érzékelő fluoreszcens fehérjéket stabilan kifejező transzgenikus patkányokat hozott létre a Biomembrán laboratórium. Konstitutív, illetve szövetspecifikus promóterek alkalmazásával a létrehozott modellállatokban adott szövetek fiziológiás és gyógyszerhatástani vizsgálatára kerülhet sor. A későbbiek során lehetőség nyílik betegségmodelleket reprezentáló egyéb transzgenikus patkányokkal való keresztezés utódállataiban az adott szindróma kapcsán szövetspecifikus kalciumszintek monitorozására. A program partnerei az MTA Kémiai Technológia Transzfer Kft. és az Toxi-Coop Zrt.

A „Piacorientált kutatás-fejlesztési tevékenység támogatása a középmagyarországi régióban” című program (KMR 12-12012-0155) keretében 67 M Ft pályázati támogatást nyert az intézet a „PET nyomjelzési technológia kifejlesztése liposzóma alapú gyógyszertranszport *in vivo* tanulmányozására” című pályázatával. A munka 2013-ban kezdődik.

Az intézet a GOP-1.3.1.-11/B-2011-0042 sorszámú pályázat keretében, az „Egy új szolgáltatás, a CYPtest továbbfejlesztése és piaci bevezetése a személyre szabott gyógyszeres terápia kialakításában” című témában 53 M Ft támogatást nyert el 2012-ben. Ebben az esztendőben befejezték a CYPtestTM eljárás módszereinek (CYP-fenotipizálás és CYP-genotipizálás) validálását, valamint megkezdték a klinikai kipróbálást.

Az intézet a GOP-1.1.1-11-2012-0027 sorszámú pályázat keretében 49 M Ft pályázati támogatást nyert el 2012-ben. A „Szakértői program a gyógyszer-lebontás és kiürítés becslésére” című kutatás során 2012-ben feltérképezték ismert gyógyszerek *in vitro* farmakokinetikai és metabolikus sajátosságait, intrinsic clearance értékét, metabolizmusának sebességét, a metabolizmus során képződött termékek szerkezetét, valamint az egyes metabolitok képződésében szerepet játszó CYP enzimeket.

Az OTKA K 104459 sorszámú pályázat keretében az „Antipszichotikum kezelésben részesülő betegek személyre szabott terápiájának lehetőségei” című kutatási tevékenységhez 23 M Ft támogatásban részesült. LC-MS/MS módszert dolgoztak ki a szkizofréniában és bipoláris zavarban szenvedő betegek terápiájában leggyakrabban alkalmazott antipszichotikumok és metabolitjaik meghatározására. Vizsgálták a kiválasztott antipszichotikumok *in vitro* metabolizmusát humán máj mikroszómában és CYP enzim térképezést végeztek.

A KMOP-1.1.2-07/1-2008-0002 (4700158153) sorszámú pályázat témája a Nanosentry alapú connectome térképezés. A pályázati támogatás mértéke: 16 M Ft, melyből 2012-ben 8 M Ft. A munka eredménye nem hozható nyilvánosságra.

A 2012-ben elnyert OTKA (K 104201) sorszámú pályázat keretében „A fényelnyelést követő folyamatok változtatása biokompatibilis makrociklusokkal és elektrolitokkal” témában 2013-tól vizsgálatokat végeznek. A pályázati támogatás keretösszege 17 M Ft.

V. A 2012-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

Az MFI kutatói 81 publikációt nyújtottak be nemzetközi referált folyóiratokhoz, ebből 62 már megjelent vagy in press.

1. Héja L, Nyitrai G, Kékesi O, Dobolyi A, Szabó P, Fiath R, Ulbert I, Pál-Szenthe B, Palkovits M, Kardos J: Astrocytes convert network excitation to tonic inhibition of neurons. BMC Biology, 10: 26 (2012)
2. Erdei Z, Sarkadi B, Brózik A, Szebényi K, Várady G, Makó V, Péntek A, Orbán TI, Apáti A: Dynamic ABCG2 expression in human embryonic stem cells provides the basis for stress response. Eur Biophys J, 2012 Aug 1. [Epub ahead of print] PMID: 22851001.
3. Telbisz A, Ozvegy-Laczka C, Hegedus T, Varadi A, Sarkadi B: Effects of the lipid environment, cholesterol and bile acids on the function of purified, reconstituted human ABCG2 protein. Biochem J, 2012 Dec 3. [Epub ahead of print], PMID: 23205634 (2012)
4. Nyitrai G, Kékesi O, Pál I, Keglevich P, Csíki Z, Fügedi P, Simon Á, Fitos I, Németh K, Visy J, Tárkányi G, Kardos J: Assessing toxicity of polyamidoamine dendrimers by neuronal signaling functions. Nanotoxicology, 6(6): 576-586 (2012)

5. Varga Z, Wacha A, Vainio U, Gummel J, Bóta A: Characterization of the PEG layer of sterically stabilized liposomes: a SAXS study. *Chemistry and Physics of Lipids*, 165(4): 387-392 (2012)
6. Fitos I, Simon Á, Zsila F, Mády G, Bencsura Á, Varga Z, Órfi L, Kéri G, Visy J: Characterization of binding mode of imatinib to human alpha(1)-acid glycoprotein. *International Journal of Biological Macromolecules*, 50(3): 788-795 (2012)
7. Jemnitz K, Veres Z, Szabó M, Baranyai Z, Jakab F, Vereczkey L: Differential inhibitory effect of cyclosporin A and bosentan on taurocholate uptake in human and rat hepatocytes as a function of culturing time. *Toxicol In Vitro*, 26:174–181 (2012)
8. Temesvári M, Kóbori L, Paulik J, Sárváry E, Belic A, Monostory K: Estimation of drug-metabolizing capacity by cytochrome P450 genotyping and expression. *Journal of Pharmacology and Experimental Therapeutics*, 341: 294-305 (2012)
9. Miskolczy Z, Biczók L, Jablonkai I: Comment on “Dual fluorescence of ellipticine: excited state proton transfer from solvent versus solvent mediated intramolecular proton transfer”. *Journal of Physical Chemistry A*, 116(2): 899-900 (2012)
10. Nagy NV, Van Doorslaer S, Szabó-Plánka T, Van Rompaey S, Hamza A, Fülöp F, Tóth GK, Rockenbauer A: Copper(II)-binding ability of stereoisomeric cis- and trans-2-aminocyclohexanecarboxylic acid-l-phenylalanine dipeptides. A combined CW/pulsed EPR and DFT study. *Inorganic Chemistry*, 51(3): 1386-1399 (2012)

MTA TERMÉSZETTUDOMÁNYI KUTATÓKÖZPONT
MŰSZAKI FIZIKAI ÉS ANYAGTUDOMÁNYI INTÉZET

1121 Budapest, Konkoly Thege M. út 29-33.

telefon: (1) 392 2225; fax: (1) 392 2226

e-mail: barsony.istvan@ttk.mta.hu; honlap: <http://www.ttk.mta.hu>

I. A kutatóhely fő feladatai 2012-ben

Az intézet meghatározott stratégia szerint, mint multidiszciplináris rendszerintegrátor folytatja a nanoméretű szerkezetek és architektúrák, funkcionális anyagok tulajdonságainak felfedező kutatását és az ismeretek kreatív alkalmazását integrált mikro- és nanorendszerekben. Az MFA eredményei, így a tudományometriai mutatókon túl a benyújtott szabadalmakban, PhD-képzési és egyéb oktatási támogatásban, a tudományos eredmények ipari hasznosításában, tanácsadásban komplex módon testesülnek meg.

A beszámolási időszak új szervezeti felállásban, az MTA TTK tagintézményeként, központosított gazdasági ügyintézővel és csökkentett, 122 fős engedélyezett intézeti létszámmal indult. Az átszervezés és a központi adminisztráció finanszírozása, valamint az elvonások következtében az intézetben kutatási célra (bérre és működésre) felhasználható költségvetési forrás a megelőző évi 522 M Ft-ról mindössze 377 M Ft-ra apadt, ami már a bérfedezetre sem volt elég. A beszámolási évben zárult, ill. elszámolt pályázatoknak köszönhetően az MFA végül mintegy 1,2 Mrd Ft-os forgalmat bonyolított, ami nagyjából a 2011-es szintnek felel meg.

Az 5000m²-nyi területen a KFKI Csillebércei kampuszon, azaz a TTK-tól tartósan elkülönülő telephelyen működő intézet számára a legnagyobb kiadást továbbra is a nagy kísérleti kutatási infrastruktúra működtetése, karbantartása és fejlesztése jelenti, egyébként ISO 9001:2008 minőségbiztosítási rendszerben. Ezek tiszta munkatereket és nagy analitikai laboratóriumokat jelentenek, melyek közül négy működik országos Stratégiai Kutatási Infrastruktúra besorolással, egyikük (Ellipszometriai laboratórium) Akkreditált Vizsgáló Laboratóriumként. A romló gazdálkodási körülmények az intézetet a kutatási szerkezet és a laborelhelyezések átgondolására készítették, amit katalizált a CERN@Wigner beruházás elhelyezése a kampuszon. A főépület hőszigetelési munkálatainak ettől független befejezése és a fentiek eredményeképp döntés született a vékonyréteg napelem-technológiai kutatások befejezéséről, a vonatkozó laborok felszabadításáról, az elektronmikroszkópia áthelyezéséről. Az MTA támogatás (30+34MFt) és a Wigner FKK által biztosított kompenzáció (50MFt) biztosította a szükséges szerkezetátalakítás fedezetét. Nyolc preparatív és mérőlaboratórium átszervezése, a Mikrotechnológiai Osztály tisztatér és mérőlabor-átalakításai, az elektronmikroszkópiai infrastruktúra és a Vékonyréteg Osztály teljes átköltöztetése a főépületbe óriási selejtezéssel együtt azt eredményezték, hogy a helyfoglalás mintegy 20%-kal csökkent. Eközben a laboratóriumok és a felújított 11 dolgozószoba színvonala jelentősen emelkedett. Mindenütt sikerült teljes elektromos korszerűsítést, légkondicionálást és zártkörű hűtést megvalósítani, ami további működési költségcsökkentést jelent majd. Bár a végleges elhelyezkedés még pár hónapot 2013-ban is igénybe vesz, már érezhető a munkakörülmények jelentős javulása. Erre annál nagyobb szükség volt, mivel az MFA a Q2 épület használatbavétele után is a jelenlegi telephelyen működik tovább az így csökkentett költségekkel.

Az MFA belső szervezeti felállása 2012-ben nem változott, bár nyugdíjazások, kilépések miatt módosult a műszaki-adminisztratív felelősök személye. Az intézet továbbra is változatlan szakmai vezetéssel, hat tudományos osztállyal működött.

2012-ben 5 EU FP7-es pályázatuk futott és az ENIAC 2. pályázati fordulóban nyertes pályázatuk (CAJAL4EU). Az év folyamán egy új PhD-fokozat született, és 33 PhD-kutatás témavezetése folyt az intézetben. Kiugróan magas a TDK (14), BSc (30), MSc(24) témavezetések száma, ami az intézet attraktivitásának bizonyítéka a földrajzi távolság ellenére! Hét posztdoktoruk dolgozott külföldi vezető intézményekben.

II. A 2012-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

A kutatás 2012-ben is 6 osztályvezető irányításával, önálló témagazdálkodású kutatócsoport, illetve laboratórium kereteiben folyt. A beszámoló követi a szervezeti sémát.

Nanoszerkezetek Osztály (14 fő, 7 kutató, 1 technikus / 6 PhD-hallgató)

Az osztály feladata szén nanoarchitektúrák (egyedi nanoszerkezetekből felépülő nanorendszerek) létrehozása és jellemzése, különös hangsúllyal a grafén alapú nanoarchitektúrák előállítására és vizsgálatára, valamint a természetes fotonikus kristályok kutatására és bioinspirált mesterséges fotonikus nanoszerkezetek előállítására, és ehhez nanométeres felbontású litográfiai módszerek fejlesztése.

Kémiai gőzfázisú leválasztással Cu(111) egykristályon CVD növesztett hullámos grafén nanomembránokat találtak, jellemzően 5 nm széles árkok fölé kifeszülve, szabályos, kb. 0,7 nm hullámhosszú és kb. 0,05 nm amplitúdójú periodikus oszcillációkkal. A nm tartományba eső görbületű grafén elektronszerkezete alapvetően eltérő: az elektrokémiai potenciálja lokálisan eltolódik és nagy pszeudo-mágneses tér lép fel. Ha a kristályos grafénréteg görbületi sugara összemérhető a rácsállandóval, a kontinuum-mechanika érvényét veszti, ezért kvantummechanikai szimulációval értelmezték a kísérleti deformációs adatokat. Eredményeiket a Nature Physics-ben közölték (Nature Physics 8, 739 (2012); doi:10.1038/nphys2389). A felfedezés hordereje a grafén bandgap-engineering szempontjából IC gyártási perspektívában óriási!

CVD grafén szemcsehatárok (GB) atomi- és elektronszerkezetét tanulmányozták STM topográfiai, spektroszkópiai adatok, valamint ab-initio sűrűségfüggő számítások összehasonlításával. A GB-k lokális állapotosságát a Dirac-pont körüli lokalizált állapotok (gap-beli állapotok) dominálják. STM segítségével közvetlenül tudták vizsgálni a GB-k elforgatási szögét és elektromos tulajdonságait. A Dirac-pont közeli állapotok összevetése ab-initio számítások eredményeivel azt mutatja, hogy a kettős koordinációjú szénatomok játszanak meghatározó szerepet az GB-k elektron-szerkezetének kialakulásában.

Hullámcsomag-dinamikai számításokkal (WPD) megmutatták, hogy a szemcsehatárok nm-es vezetőket, illetve hullámvezető csatornákat okozhatnak a grafénben. A két szélén szemcsehatárokkal határolt grafén nanoszalagban (GNR) a kvázirészecskék energiájuk szerint eltérően viselkednek. Legtöbb energián, hullámtöréssel áthaladnak a szemcsehatáron, sajátos energiákon azonban becsatornázódnak a szemcsehatárokba kiterjed lokalizált állapotokat alkotva (Phys. Rev. B (2012) 85, 125443).

Különböző periodikus szemcsehatárokon vizsgálták a hullámterjedést; a kísérletileg is kimutatott (5-7)GB nyálabosztódást és lokalizációt is mutat. Vizsgáltak egy kiterjedt, ötszögekből és nyolcszögekből felépülő lineáris hibát is, amely esetében a két szemcse egymással bezárt szöge 0° . Az azonos orientáció ellenére a transzmisszió aszimmetrikus, és a Fermi energia felett 2,6 eV minimumot mutat.

Polarizált fényvel tették láthatóvá a grafén CVD során alkalmazott Cu hordozó szemcse-szerkezetét és az eltérő Miller indexű lapokon kialakuló karakterisztikus lépcsőket. A grafén krisztallitok sárga, vagy lila színben láthatók a szürke Cu háttéren, ami a polarizált fény szelektív becsatolódásának tulajdonítható. A lépcsőmentes részeken nem figyelhető meg szín.

Egyes lepkék szárnyainak színét fotonikus tiltott sávval (PBG) rendelkező anyagok, dilektrikumokból felépülő nanokompozitok adják, amelyek jellemző méretskálája a száz nanométeres tartományba esik. Bizonyos hullámtartományokat szelektíven visszavernek, így színt hoznak létre pigmentek nélkül is, melyet a szerkezet és az anyagi összetétel (törésmutató) határoz meg. A „szivacs-szerű” PBG esetén a lepkeszárnyak gyors színeltolódást mutatnak, ami lehetővé teszi a levegőben előforduló illékony anyagok szelektív kimutatását. Elsőként mutatták ki, hogy a kapilláris kondenzációnak köszönhetően a nanopórusokban cseppfolyóssá váló gőzök törésmutatójának különbsége teszi lehetővé az egyes anyagok azonosítását.

Komplex Rendszerek Osztály (8 fő, 7 kutató, 1 mérnök)

Az osztály feladata a nem-egyensúlyi rendszerek statisztikus fizikai elemzése egyebek közt sokszereplős evolúciós játékelméleti modellekkel, inhomogén gráfokon, nagy adathalmazokban mutatkozó hasonlatosságok matematikai elemzése megfelelő algoritmusok kifejlesztésével.

Az emberi és állati viselkedés kísérleti kutatásában központi szerepet játszanak az ultimátum játékok, ezért a modellvizsgálatokat kiterjesztették térbeli evolúcióra. A numerikus módszerekkel elért eredmények – összhangban a kísérletekkel – egyrészt megerősítették a tisztességes (testvéries) magatartások evolúciós kialakulását, és rámutattak a stratégia-társulások kialakulására is, ha az utánpótlás pontossága nem tökéletes a térbeli rendszerben.

Az egyéni érdeket jobban figyelembe vevő evolúciós társadalmi dilemma helyzetet leíró modellek az egoista és testvéries magatartás strukturált együttlétezésének különböző lehetőségeit vázolták fel a paraméterek függvényében. Gyakorlati tapasztalatok motiválták a különböző jellegű büntetések hatékonyságának olyan számszerűsített elemzését, amelyek már figyelembe veszik a kapcsolatrendszer inhomogenitásait, a játékosok mozgását és még néhány egyéni tulajdonságot.

Az evolúciós potenciáljátékok szisztematikus vizsgálata hozta felszínre a kölcsönhatások (játékok) osztályozásának egy olyan lehetőségét, ami szerint a játék snóblizást képviselő komponense lenne a legegyszerűbb hajtóereje az állandó mozgást/változást (Red Queen effektust) fenntartó evolúciós folyamatoknak a biológiai és társadalmi rendszerekben.

Sokprocesszoros számítógépekre kifejlesztett algoritmusoknak köszönhetően sikerült pontos eredményeket elérni a fertőzés terjedésének elemzésében olyan rendszerekben, ahol a kapcsolt rendszert inhomogén és/vagy skálamentes gráffal jellemezzük. Az eredmények a hatványfüggvényszerű csillapodás meglétét (Griffiths-fázist) igazolták. Ugyanakkor az állandósult állapotban elsőrendű (ugrásszerű) átmenet történik, ha változik a fertőzés és gyógyulás mértékének aránya.

A népcsoportok kultúrájában és genetikai állományában megőrzött hasonlatosságok számszerűsítésére folyamatosan továbbfejlesztett algoritmusok és az adatállomány bővülése egyre pontosabb elemzést tesznek lehetővé. A jelenlegi vizsgálatok szerint a népzenei rokonsággal a genetikai adatok 82 %-ban fednek át.

Néhány vállalat igényét követve az osztály mérnökei továbbfejlesztették a korábban létrehozott képfeldolgozási és lényegkiemelő szoftverjeiket.

Vékonyréteg-fizika Osztály (22 fő, 14 kutató, 4 mérnök és technikus /4 PhD-hallgató/)

Az osztály feladata *polikristályos vékonyrétegek szerkezetfejlődésének* és a szerkezet-fizikai tulajdonság összefüggésnek a feltárása, alkalmazásorientált mikroelektronikai és kemény-bevonatok fejlesztése; *széles tiltotsávú félvezető szerkezetek* tulajdonságainak optimalizálása a hibaszerkezet megismerésén keresztül; kétdimenziós rétegek előállítás, modellezése és kapcsolatos *elektronmikroszkópos (TEM) módszerfejlesztések*.

Grafént választottak le CVD módszerrel saját előállítású Ni(111) hordozóra, az epitaxiális relációt és a grafén jó minőségét HRTEM, STM és Raman spektroszkópiai módszerekkel bizonyították.

Molekula dinamikai számításokkal javították a Ru(111) felületén növesztett grafén hullámosodásának modellezését, a határfelületi potenciál finomításával jó kísérleti egyezést értek el.

Egykristályos mágneses félvezető réteget állítottak elő utólagos hőkezeléssel amorfizált Ge-ba Mn-ionokat implantálva.

Amorf CuMn65% vékonyréteg szerkezetéről TEM és elektron diffrakció segítségével megállapították, hogy az amorf rövid távú rend (SRO) nagyon hasonló a kristályos, sokatomos elemi cellájú α -Mn rövid távú rendjéhez.

CuMn40% vékonyrétegben SiO₂-on olyan MnSiO határréteg keletkezik, amely diffúziós barrierként szolgál a Cu számára.

A szuperkeménység szerkezeti értelmezésére irányuló kísérletekkel elsőként mutatták ki, hogy a Si-mal adalékolt TiN (illetve CrN) rétegekben a kristályos TiN (illetve CrN) nanorészecskéket amorf Si₃N₄ nanoréteg veszi körül.

Számítógépes módszert fejlesztettek ki szemcsehatárok nagyfeloldású vizsgálatához a bonyolult döntési kísérleteket megtervezésére.

Megmutatták, hogy gyémánt hordozóra növesztett GaN/AlGaN szerkezetek hibasűrűsége jelentősen csökkenthető a hordozó előzetes nitridálásával.

HRTEM eredményekkel igazolták, hogy az ALD-vel növesztett ZnO réteg polikristályos a zafir, és epitaxiás a GaN hordozón, amit az eltérő misfit-tel magyaráztak (15% vs.3%).

TiC:a-C nanokompozit rétegek biokompatibilitását MG63 osteoblast-szerű sejtek ránövesztésével bizonyították.

Nonkristályos anyagok elektrondiffrakciójának szimulálását matematikai módszerekkel gyakorlati problémák modellezésére tették alkalmassá.

Megmutatták, hogy a CH₄ és CO₂ nedves reformálásánál előnyösnek bizonyult kétfémes katalizátor alkalmazása nem jár hasonlóan jó eredménnyel e gázok száraz reformálása során.

Periodikus szerkezeteket állítottak elő rendezett szilícium dioxid nanogömbök excimer UV lézer impulzusokkal való kezelésével, adatrögzítő rétegek előállítását célozva.

Megmutatták, hogy a FIB-ben végrehajtott ionbombázással előállított SiC-tartalmú nanoréteg (Si felületén) ellenáll a szokásos poli-Si marásnak.

Ionbombázás és XPS kombinációjával megmutatták, hogy a cellulóz-epoxy kompozit károsodása teherautó aláfutás-gátló alkalmazásban milyen kémiai változásnak köszönhető.

Mikrotechnológia Osztály (34 fő, 13 kutató, 7 mérnök, 9 technikus / 5 PhD-hallgató/)

Az osztály feladata a szenzorrelvek, új anyagok és 3D megmunkálási technikák, valamint az ezeket támogató ion-szilárdtest kölcsönhatások *feltáró kutatása* mellett integrált mikrorendszerek, mikrofluidikai és fotovillamos szerkezetek kutatása, beleértve a

nanoszerkezetek *integrációját* a „More than Moore”-elv szerint. Fokozottan kerülnek előtérbe a folyadékkezeléssel, jelölésmentes bio-detektálással, a Lab-on-a-chip rendszerekkel kapcsolatos orvos-biológiai kutatási kérdések, melyek kiterjedt multidiszciplináris kooperációs kényszert is jelentenek a felhasználókkal.

Az intézet legnagyobb létszámú osztálya, amely a tisztalabor infrastruktúrát üzemelteti kb. 25 nagyberendezéssel. Az osztály nagyon fontos küldetése, hogy hozzáférést biztosítson BSc-, MSc- és PhD-hallgatóknak a mikrotechnológiához és minősítő eljárásokhoz, működtesse a közös egyetemi laborokat (BME TTK, PPKE, ÓE), kielégítse az intézet és társintézetek mintapreparációs igényeit, a hazai és külföldi ipari partnerek K+F megbízásait. A beszámolási évben elért új eredmények:

Az ENIAC JTI – CAJAL4EU pályázat (www.cajal4eu.com) keretében orvos-biológia célokra, a szív és érrendszeri betegségek korai felismerésére hazai és külföldi partnerekkel fejlesztettek gyors, megbízható, multiparaméteres tesztek támogató diagnosztikai rendszereket, amelyek tartalmazzák az új mérési elveken működő szenzorokat, mintapreparációs modulokat és mikrofluidikai rendszereket.

Megbízható és robusztus mikro- és nanofabrikációs technológiákat dolgoztak ki a struktúrák létrehozásához; a mikro- és nanoméretű rendszerekben tapasztalható fizikai folyamatokat feltérképezve új elveken alapuló bioanalitikai, mikro- és nanofluidikai eszközöket valósítottak meg.

Szilícium/üveg anodikus bondolási technológiát dolgoztak ki vékony, pl. szilárdtest nanopórus membránokat is tartalmazó mikrofluidikai rendszerek megbízható létrehozására.

Optikai bioérzékelőkben a funkcionális réteggént szereplő polimer SU-8, PI, PMMA felületeknek PDMS-ben kialakított mikrofluidikai szerkezetekhez kötését valósították meg megfelelő felületkezelések (szilanizáció + oxigén plazma) alkalmazásával.

A párhuzamos elektromos (impedancia) és optikai detektáláson alapuló áramlási citometriai eszközök számára optimalizálták az SU-8 vastag polimerből és üvegből felépülő heterogén mikrofluidikai szerkezetek kialakítási technológiáját.

Eljárást dolgoztak ki PDMS alapanyagban kialakított csatornák felületi tulajdonságainak javítására a PDMS-t a térhálósodás előtt tenzid molekulákkal (TX-100, PDMS-PEO) módosítva, a folyadékminta, az abban megtalálható molekulák (pl. fehérjék) és a szilárdtest felületek között kialakuló kölcsönhatásokat figyelembe véve, jelentősen javítva a mikrofluidikai rendszerek hidrodinamikai ellenállását és a szabad felületeken tapasztalható nem-specifikus fehérjebekötődést.

Hidrodinamikai folyamatok vizsgálatára gyors prototípus gyártással, több rétegű 3D SU-8 öntőformát alkalmazva PDMS alapú mikrofluidikai rendszereket építettek. A mikroméretekben jellemző, alacsony Reynold's számokkal leírható lamináris áramlási tartományban is alkalmazható, kaotikus advekciót kihasználó mikrofluidikai szerkezetek viselkedését elemezték mind a molekuláris, mind a mikrorészecskék mérettartományában. A rendszerekben kialakuló áramlási folyamatokat (fluoreszcensen jelölt fehérje molekulák, illetve kiterjedt részecskék keveredése) képalkotó eljárásokkal vizsgálták és véges elem (FEM) modellekkel értelmezték.

Az orvosdiagnosztikai eszközök követelményeinek megfelelő mintapreparációs rendszerhez a hidrodinamikai viselkedés geometriai paraméter-függését elemezve egy teljes vért fogadni képes, a Zweifach-Fung bifurkációs elven alapuló vérplazma-szeparációs mikrofluidikai rendszert optimalizáltak és integráltak bioanalitikai érzékelő rendszerbe.

Kémiailag módosított nanopórusok és a bennük lejátszódó transzportmodulációs jelenségek kutatására integrált bioanalitikai tesztrendszereket hoztak létre; jelölésmentes, multi-paraméteres, extrém érzékenységgű detektálásra optimalizált szilícium-nitrid/arany membránban (FIB, EBAD), vizsgálták a pórusátmérő technológiai paraméterfüggését, módszert alkottak a marási folyamat *in situ* követésére és vezérlésére.

Nagyfeloldású mikroszkópiák segítségével felderítették a porlasztás atomi skálán értelmezhető folyamatait, Automatizált CNC (Computer Numerical Control) vezérelt – „nanofúrás” technológiát dolgoztak ki a pórusszám, elhelyezkedés és geometria pontos meghatározására.

A nanofluidikai rendszereket sikeresen alkalmazták biomolekulák (troponin-I) detektálására. A kialakított nanoszerkezeteket mikrofluidikai és elektromos címző hálózatba integrálták, amely magában foglalja az előzetes minta előkészítő (vérplazma szeparációs) rendszert is. A mikrofluidikai rendszerben használt felületmódosítási eljárás (passzíváló réteg felvitele ALD eljárással) jelentősen javította mind az elektromos, mind a fluidikai tulajdonságokat.

Mikrotechnológiai módszerekkel fejlesztettek neurális folyamatok követésére alkalmas, agyszövetbe beültethető integrált mikroelektrodát, amely megoldja a sokcsatornás elektromos jelelvezetést és a közvetlen hatóanyag bejuttatást az elektróda hosszában végigfutó eltemetett mikrofluidikai csatornákon át. Neurofiziológus partnereikkel demonstrálták az eszköz hatékonyságát, javaslatot tettek a farmakológiai alkalmazásra.

Mikrométer alatti SiN_x membránstruktúrákon a tömbi Si-tól elektromosan és termikusan elszigetelt gázérzékelő és THz-es sugárzást érzékelő szenzorokat valósítottak meg. A CO szenzor érzékenységet és időbeli stabilitását a katalitikus nanoszemesék pórusos hordozóit vizsgálva legjobb eredményt a Pt nanorészecskékkel érzékenyített AlO_x rétegekkel érték el.

Atomi rétegleválasztással (ALD) 100 nm alatti egykristályos ZnO réteget sikerült növeszteni GaN hordozón. A 10^{-4}Ωcm fajlagos ellenállású epitaxiás ZnO réteg új típusú nanoelektronikai eszközök kidolgozására alkalmas.

Fotonikai Osztály (19 fő, 17 kutató, 1 mérnök, 1 technikus, 4 PhD-hallgató/)

A Fotonikai Osztály feladata optikai és mágneses kiolvasási elven működő szenzor-rendszerek fejlesztésével molekulaszintű, elsősorban gyógyászati célú érzékelést megvalósítani és optikai karakterizációval (spektroszkópiai ellipszometria, Makyoh-topográfia) támogatni a funkcionális anyagok kutatását, illetve preparációját.

A rács-csatolt interferometriás metodika (GCI) fejlesztésében (CREOPTIX együttműködéssel, szeptembertől Lendület támogatással) új eredményük a két be- és egy kicsatoló ráccsal előállított hullámvezető, melyen a megnövelt érzékenyített tartomány precíz méretbeállításával a chipet multiplexelt kiolvasásra tették alkalmassá. A konkurens interferometriás módszerekkel ellentétben szenzor-chipük lekérdezése egyetlen expandált lézernyalábbal történik, amely mindkét becsatoló rácsot egyszerre világítja meg. Az interferencia-jel előállításához a laterálisan két részre osztott folyadékkristályos modulátorban csak a nyaláb felén történik fázismoduláció. Az interferometriás ágak szimmetrikus elrendezésével növelték a stabilitást és integrálhatóvá teszik a párhuzamos érzékelő csatornákat. Az eszköz érzékenysége tömbi törésmutató meghatározásánál bizonyíthatóan jobb, mint 10^{-7} , a nagy fázisfelbontás jelölésmentesen, referencia-nélkül 1 pg/mm^2 alatti szintig teszi lehetővé a felületen adszorbeált molekulák sűrűség-meghatározását.

Az osztály a P3SENS (www.p3sens-project.eu) FP7-es multidiszciplináris (fotonikai, mikrofluidikai, biokémiai és anyagtudományi) projekt részeként sokcsatornás optikai

bioszenzor fejlesztésben vett részt agybetegségek korai detektálására vérből (pl. az agyvérzés során fellépő ischémias degradáció megelőzésére). Sikerrel funkcionálították a biochipet felületi kémiai módszerekkel és tesztelték a receptorok viselkedését nagyfelbontású jelölésmentes optikai bioérzékelő módszereikkel.

A sikeresen zárult NANOMAGDY FP7-es projektben biokompatibilis magneto-optikai nanorendszereket fejlesztettek orvosi gyakorlati alkalmazásra, onkológiai képalkotáshoz. Kettős magneto-optikai szondájuk képes a festék és a mágneses nanorészecskék egyidejű detektálására sebészi beavatkozásoknál. A rendszer prototípusát az EURORAD cég készítette el, ami tartalmazza a detektor-fejet (a szonda egy tokban tartalmazza a mágneses és az optikai érzékelőt) és az elektronikai modult. A rendszerük a tesztek során mind a szondának a képmezőben való elhelyezésében, mind a „forró, illetve hideg” területek azonosításában pontos eredményt adott. A gyártó további 3 fejre adott megrendelést az MFA-nak.

Legújabb roncsolás mentes eljárásuk a Magnetic Adaptive Testing (MAT) mágneses alhurkok szisztematikus mérésén és kiértékelésén alapul. Az optimális MAT paraméter beállítás és nukleáris reaktorok szerkezeti anyagait besugárzó neutron-fluxusa között jó korrelációt mutattak ki, ami sikerrel kecsget a jelenleg használt roncsolásos vizsgálatoknak ezzel a roncsolás mentes módszerrel való kiváltására.

2012-ben az MTA támogatást nyert a Lendület-pályázatuk „Advanced label-free biosensors for proteins and cells” témában. Ugyancsak EU és hazai támogatást nyertek az „E450EDL European 450mm Equipment Demo Line” ENIAC JU-projekt részeként optikai szelettérképező eljárás kifejlesztésére.

Kerámia és Nanokompozitok Osztály (17 fő, 9 kutató, 4 technikus / 4 PhD-hallgató/)

Az osztály feladata a kiterjedt nano-preparációs és kerámia-technológiai módszerekkel új tulajdonságú szerkezetek, kompozitok előállítása és vizsgálata, különös tekintettel a méreteffektusok nyújtotta előnyök kiaknázására.

Egy új, tisztán nedves kémiai lépésekből álló technikával sikerült hierarchikus ZnO nanoszerkezetet létrehozniuk. A nagy felületen megvalósított átlátszó, nagy fajlagos felületű, n-típusú félvezető oxid az exciton alapú napelemek egyik új komponense lehet.

Sikerrel végezték el vertikális, wurtzite kristályszerkezetű InAs nanoszálak mechanikai karakterizációját egy pásztázó elektronmikroszkópba szerelt robotkar-pár segítségével. A nanoszálak hajlítási modulusza 43,5GPa-ra adódott, amely jelentősen alacsonyabb, mint a tömbi köbös InAs-re illetve InAs nanoszálakra irodalomban közölt a korábbi adatok.

Sikerült előre kialakított elektródákról alacsony hőmérsékleten (95°C) horizontálisan növekvő ZnO nanoszálakat készíteniük, ami lehetővé teszi a nanoszál integrálását nagy kihozatalú planár IC technológiába. Mivel ezek a nanoszálak sorosan a szilícium hordozó oxidrétegen nőttek, a töltéshordozó-sűrűségük a hátsó kapu-feszültséggel modulálható, így a nanoszál alapú eszköz érzékelő tulajdonságai javíthatók.

Mezopórusos szilikával vontak be arany nanorudakat. Ezekből sikeresen készítettek Langmuir-Blodgett filmet, így a kéreg pórusai átjárhatóságának vizsgálata *ex situ* módon, spektroszkópiával vált lehetővé. A pórusokon keresztül reaktív specieseket juttattak a pórusos kérgen belüli térfogatba, ezáltal indukálva kémiai reakciót a nanoméretű „reakcióedényben”.

Kimutatták, hogy nanografittal erősített kerámia anyagukban az alapmátrix szívósságát 40-50%-kal növelik meg a kerámiaszemcsék közé beékelődött grafén lapkák, amelyek a szemcsék alakját is megváltoztatják. A szívósságnövekedés a grafén lapkák által okozott repedéstartó hatásnak, azok áthidalásának, elágazásának tudható be.

Bizonyították a biogén anyagokból előállított nano-hidroxiapatit osseogenerációra és csontpótlásra való alkalmasságát. A tojásból előállított nano-hidroxiapatit finomabb újsont-szerkezetet, valamint gyorsabb felszívódást eredményezett, mint a kereskedelemben is hozzáférhető szintetikus nano-hidroxiapatit.

Az elméleti sűrűségig beszinterelt jó mechanikai, termikus és kopásálló tulajdonságokkal rendelkező tömbi nanokompozitokat állítottak elő. A különböző összetételű alumínium alapú nanokompozit porok szintézisét nagy energiájú őrléssel, gyors szinterelését nagy nyomáson végezték.

2012-ben ipari megrendelés alapján jelentősen bővült a hagyományos műszaki nitridkerámia-termékek előállítása.

b) Tudomány és társadalom

Az MFA szakmai vezetésével működő IMNTP – Integrált Mikro/Nanorendszerek Nemzeti Technológiai Platform a finanszírozás hiánya ellenére folyamatosan tartja a kapcsolatot az MFA által fenntartott irodán keresztül az elektronikai ipar szereplőivel.

Előregedő társadalmunkban növekszik az igény előnyös tulajdonságú biokompatibilis anyagok felhasználására implantátumokban, amelyek több évtizedig működnek az élő szervezetben. Az MFA-ban a kutatott bioaktív nano-hidroxiapatit a kemény vagy lágy élőszövetbe könnyen beépülő csontszerű anyag, a tárgyévben a gyártásba vitelének előkészítése folyt.

Az intézet által hagyományosan megszervezett MFA Nyári Iskola a tárgyévben 25 középiskolás számára biztosított bentlakásos egyhetes lehetőséget a tudományos kutatásba történő bekapcsolódásra. Az MFA által létrehozott Nanobusz országosan számos helyszínen szerepelt óriási sikerrel a tudománynépszerűsítésben és nano-ismeretterjesztésben.

Az MFA Nyílt Napok (tavaly 150–200 látogatóval) az érdeklődő adófizetőknek biztosítanak lehetőséget az intézet kutatómunkájába való betekintésre.

A társadalomtudományok számára természettudományos háttérrel biztosító evolúciós játékelmélet módszereit, céljait, illetve eredményeit különböző fórumokon (egyetemi előadássorozatok, szemináriumok, nemzetközi nyári iskola, blogos találkozók) népszerűsítették.

Igen széles körben (rádió, TV, előadások, könyv) sikerült ismertetni a különböző népcsoportok zenéje és nyelve közötti rokonság (hasonlatosság) számszerűsítésére kidolgozott módszerük eredményeit és ígéretes jövőbeli alkalmazásait.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2012-ben

Hazai kapcsolatok

Az MFA oktatási kapcsolatainak eredményessége

2012-ben egy fő szerzett PhD-fokozatot. Az MFA-ban hat emeritus és négy kinevezett egyetemi tanár, egy docens, két főiskolai tanár és négy habilitált doktor dolgozik. Vezető munkatársaik zöme oktat az ELTE, BME, SE, PE, DE, ME, SZTE, PTE, PPKE, BMF különböző kurzusain, doktoraik tagjai a fenti egyetemek doktori iskoláinak, doktori és habilitációs tanácsának, többen a doktori iskolák alapító, ill. tisztségviselői. Az intézetben működik a veszprémi Pannon Egyetem Műszaki Informatikai Kar Nanoszenzorika Professzori

Laboratóriuma, a BME VBMK-ral közös Nanokémiai Laboratórium, a ÓE KKVMK-val közös Molekulasugaras Epitaxiás Laboratórium, a BME TTK-val közös Elektronsugaras Litográfiai labor és a PPKE Információs Technológiai Karral közös MEMS laboratórium. Preparatív és analitikai laborjaikban rendszeres gyakorlatokat tartanak a graduális és posztgraduális képzés számára külső támogatás nélkül. 2012-ben 27 hallgató folytatta PhD-kutatásait az MFA-ban.

Részvétel a hazai tudományos közéletben

Az MFA kutatói adtak egy MTA lev. tagot, három fő MTA doktorképviselőt, egy-egy tagot a Matematikai és Természettudományi Szakbizottságban; az MTA Vagyonkezelő Testületben. Az MFA munkatársa közül kerül ki az MTA Elektronikai Eszközök és Technológiai Bizottság titkára és 7 tagja, az MTA Szilárdtestfizikai Bizottság négy tagja, az MTA Anyagtudományi Komplex Biz. négy tagja, a VEAB egy tagja, a VEAB Nanotechnológiai Munkabizottság négy tagja. Az MFA delegálta az OTKA Kollégium két tagját, a Fizika Zsűri Elnökét, az Informatikai és Villamos Zsűri egy tagját, az ELFT tanács egy tagját, az ELFT Vákuumfizikai Szakcsoport elnökét, ELFT Atom-, Molekulafizikai és Kvantumelektronikai Szakcsoport egy vezetőségi tagját, a Magyar Mikroszkópos Társulat elnökét és egy vezetőségi tagját, a Kémiai és Kohászati Munkabizottság elnökét, az Egészségügyi Telematikai Munkacsoport egy tagját, a Magyar Anyagtudományi Egyesület titkárát, az Integrált Mikro/nanoszerkezetek Nemzeti Technológiai Platform szakmai vezetőjét és irodavezetőjét.

Nemzetközi kapcsolatok

A Nanoszerkezetek osztály keretében működött a Koreai-Magyar Nanotudományok Közös Laboratórium az MTA és a Koreai Alapvetési Tudományos Tanács közötti egyezmény keretében.

Egy fő a European Materials Research Society tanácsának tagja lett. Hárman az EMRS Fall Meetingen szimpóziumot szerveztek.

Egy fő a Conference on Applied Crystallography és az EMAS-2012 Workshop szervezésében vett részt.

Rendszeres a kapcsolat a londoni Brown University-vel, egy ottani professzor az MFA tanácsadója.

Kutatási együttműködés a svájci Creoptix céggel (Kaspar Cottier) új műszert eredményez.

Koreai-magyar workshopot szerveztek „Hungarian-Korean Technology Day” címmel a KOTRA és MTA szervezésében.

Két Indiai-magyar Tét pályázat keretében indult kutatás elektrochrom rétegek és kerámiák területén.

Az MTA TTK MFA a World Forum of Materials Research Institutes és az International Solid-state Lighting Alliance tagja.

Az MFA kutatói közül többen rendszeres bírálók az Európai Bizottságnál és az ERC programjaiban.

Az intézményekkel való szervezett kapcsolatok teljes felsorolásától el kell tekinteni, hiszen több mint kétszáz intézményt kellene szerepeltetni. A rangos egyetemek (Cambridge, NIMS - Tsukuba, Osaka, Tokyo, Tohoku-Sendai, Linköping, Erlangen, Namur, SUNY Stony Brook, Barcelona, Thessaloniki, Istanbul, TU Helsinki, J. Kepler Uni. Linz, Krakow, Wien, a Max Planck és Fraunhofer intézetek sora, Akita Research Center stb.) mellett 2010-ben is olyan

ipari cégekkel dolgoztak együtt, mint THALES, Mahle, Volvo, GE Hungary, Tateyama, Picosun Oy, Weszta-T, Állami Nyomda, Semilab, BEH stb.

Gyümölcsöző a kutatási-oktatási kapcsolat a Babes-Bolyai Egyetemmel (Kolozsvár) és a Sapientia Egyetemmel.

Az intézet a beszámolási évben egy-egy orosz, belga, cseh, szlovák, lengyel, ukrán és bolgár MTA kétoldalú egyezményes kapcsolatot ápolt. TÉT-támogatással egy-egy japán, osztrák, horvát és szlovák kapcsolatuk volt.

Nemzetközi szervezeti, szerkesztőbizottsági tagságok

Thin Solid Films, Romanian Physics, Acta Physica Slovaca, PLoS ONE, Inzynieria Materialowa (Kiadja Sigma Not, Warsaw), Nanopages, valamint a „The Int. Res. and Rev. J. for Microscopy”, „IEEE Sensors Journal” szerkesztőbizottsági tagja. A European Microbeam Analysis Society elnökhelyettes, IUVSTA hazai képviselő, IUVSTA Nemzeti Bizottság több tagja, a vékonyréteg divízió vezetőségének tagja, EUROSENSORS International Steering Committee tagja, ENIAC Scientific Council tagja.

IV. A 2012-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Hazai pályázatok

OTKA: A tárgyévben 1 PD- és 4 új kutatási OTKA-pályázatuk nyert támogatást.

KMR: Öt új pályázatot nyertek.

MTA Lendület-pályázat: kutatócsoport alakításra.

Bolyai Kutatói Ösztöndíj: Két fő új nyertes a tárgyévben (2010–11-ben 4+5)

TÉT: Három új pályázatuk nyert.

Külföldi pályázatok

3 új EU-pályázat

Egy US Templeton Alapítványi ösztöndíj

Díjak, címek, fokozatok

Magyar Arany Érdemkereszt; a Miskolci Egyetem díszdoktora; MTA levelező tagi jelölés; Fizikai Fődíj; ELFT Schmid Rezső Díj; MTA Professor Emeritus; Professor Emeritus Instituti (2 fő); APS kiváló bírálója; TTK Fiatal Kutatói Díj; megosztott TTK Fiatal Kutatói Díj (2 fő); MFA Ifjúsági Díj(2 fő); MFA Kutatói Díj (2 fő); MFA Kiváló Kutatástámogatásért Díj (3 fő).

V. A 2012-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Tapasztó L, Dumitrică T, Kim SJ, Nemes-Incze P, Hwang C, Biró LP: Breakdown of continuum mechanics for nanometre-wavelength rippling of graphene. Nature Physics, 8(10): 739-742 (2012)
2. Szolnoki A, Perc M, Szabó G: Defense mechanisms of empathetic players in the spatial ultimatum game. Phys Rev Lett, 109(7): 078701 (2012)
3. Frey K, Iablokov V, Sáfrán G, Osán J, Sajó I, Szukiewicz R, Chenakin S, Kruse N: Nanostructured MnOx as highly active catalyst for CO oxidation. J Catal, 287: 30-36 (2012)
4. Biro LP, Nemes-Incze P, Lambin P: Graphene: nanoscale processing and recent applications, Nanoscale, 4(6): 1824-1839 (2012)

5. Baji Zs, Lábadi Z, Horváth ZsE, Molnár Gy, Volk J, Bársony I, Barna P: Nucleation and growth modes of ALD ZnO. *Cryst Growth Des*, 12(11): 5615-5620 (2012)
6. Fekete Z, Nagy P, Huszka G, Tolner F, Pongrácz A, Fürjes P: Performance characterization of micromachined particle separation system based on Zweifach–Fung effect. *Sensor Actuat B Chem*, 162: 89-94 (2012)
7. Kurunczi S, Hainard A, Juhász K, Patkó D, Orgován N, Truck N, Sanchez J-Ch, Horvath R: Polyethylene imine-based receptor immobilization for label free bioassays. *Sensor Actuat B Chem*, 1(1): 1-10 (2012)
8. Czigány Zs, Misják F, Geszti O, Radnóczy Gy: Structure and phase formation in Cu–Mn alloy thin films deposited at room temperature. *Acta Mater*, 60(20): 7226-7231 (2012)
9. Patko D, Cottier K, Hamori A, Horvath R: Single beam grating coupled interferometry: high resolution miniaturized label-free sensor for plate based parallel screening. *Opt Express*, 20(21): 23162-23173 (2012)
10. Oh S, Nagata T, Volk J, Wakayama Y: Nanoimprint for fabrication of highly ordered epitaxial ZnO nanorods on transparent conductive oxide films. *Appl Phys Express*, 5: 095003-1-095003-3 (2012)
11. Labar JL, Adamik M, Barna BP, Czigany Z, Fogarassy Z, Horvath ZE, Geszti O, Misjak F, Morgiel J, Radnoczi G, Safran G, Szekely L, Szuts T: Electron diffraction based analysis of phase fractions and texture in nanocrystalline thin films, Part III: Application examples. *Microscopy&Microanalysis*, 18(2): 406-420 (2012)
12. Khanh NQ, Lukács I, Sáfrán Gy, Erdélyi R, Fülöp E, Deák A, Volk J: Effect of nanosphere monolayer on the morphology of ZnO nanowires grown by hydrothermal method, *Mater Lett*, 79: 242-244 (2012)

Megjegyzés:

1 elfogadott magyar és 1 elfogadott nemzetközi szabadalmuk, illetve 2 közzétett hazai szabadalmi bejelentésük volt a beszámolási évben.

MTA TERMÉSZETTUDOMÁNYI KUTATÓKÖZPONT
SZERVES KÉMIAI INTÉZET

1025 Budapest, Pusztaszeri út 59-67; 1525 Budapest, Pf. 17.
telefon: (1) 438 1110; fax: (1) 438 1145
e-mail: hajos.gyorgy@ttk.mta.hu; honlap: <http://www.ttk.mta.hu>

I. A kutatóhely fő feladatai 2012-ben

A Szerves Kémiai Intézet a Természettudományi Kutatóközponton belül – korábbi kutató egységek szervezésével – 2012-ben alakult meg. A korábbi évek szerteágazó és aprózódó kutatási területeinek újraszervezése (új tematikák indítása, néhány lecsengő kutatási irány elhagyása) már 2011-ben megtörtént, így az új Szerves Kémiai Intézet már a szerves kémia és szerkezetvizsgálat kiválasztott területeinek kutatását tekintette tudományos feladatának. A preparatív szerves kémián belül ez öt kutatási irányt foglalt magába: 1) szénhidrátkémia, 2) heterociklusos kémia, 3) organokatalízis, 4) szupramolekuláris kémia, 5) polimer kémia. Az új intézeti szerveződés kimagasló érdeme, hogy a legfontosabb szerkezetvizsgáló módszerek tanulmányozása és fejlesztése szintén az intézeten belül folyik, így a feladatok szerves részét képezik. E vonatkozásban kiemelt feladatként szerepelt a kémiai folyamatok elméleti számítása és értelmezése. Mindezen feladatok nem csupán az egyes területeken végzendő kutatásokra, hanem azok összehangolt működésére is irányulnak.

A kutatóhely kiemelt közfeladata az egyetemi elméleti és gyakorlati oktatás. Elvárás a vezető kutatóktól főelőadások és speciálkollégiumok tartása az egyetemeken. A gyakorlati oktatás vonatkozásában a graduális és posztgraduális laboratóriumi kutatások (egyetemi szakdolgozatok kísérleti munkája, PhD-kutatási munkák stb.) az intézeti feladatok szerves részét képezik.

II. A 2012-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Szénhidrátkémiai kutatások

A heparin hatás-szerkezet összefüggés tanulmányozására egy heparin tetraszacharidot és három hexaszacharidot szintetizáltak. A hexaszacharidok szintézisét a korábban kidolgozott ortogonális védőcsoport-stratégia segítségével egyetlen közös intermedierből valósították meg. E szintézisekkel kapcsolatban olyan reakciókörülményeket dolgoztak ki, melyek között a szintézis több utolsó reakciója egyetlen lépésben megvalósítható, ezáltal nagymértékben egyszerűsítve e szintézisek kritikus lépéseit. Részletesen vizsgálták az elméleti számításokban használt O-metil, és a gyakorlatban használt O-benzil csoportok befolyását mind a glikozil donorok, mind a glikozil akceptorok esetében. Megállapították, hogy az O-metil származékokkal végzett elméleti számítások eredményei az irodalomban számos esetben jelentősen eltérnek az O-benzil éterekkel kapott sztereo-szelektivitásoktól és tendenciáktól.

Heterociklusos kémiai kutatások

Fenotiazinok új keresztkapcsolási reakcióit oldották meg. Az eredmény preparatív jelentősége mellett kiemelendő, hogy az új fenotiazin-származékok sorában figyelemre méltó (a referenciaként tekintett Verapamil hatását meghaladó) multidrog-rezisztenciát gátló vegyületeket ismertek fel és szintetizáltak.

Izokinolin-származékok körében kiemelkedő fluoreszcens vegyületeket állítottak elő, melyeknek biomarkerként történő alkalmazását tervezik. Kondenzált pirrolokhhoz vezető szintetikus stratégiát dolgoztak ki keresztkapcsolásos reakciók felhasználásával. A jelentős preparatív értékű módszer számos új, pirrollal kondenzált gyűrűvázat eredményezhet.

Szupramolekuláris kutatások

Napjainkban a cianid-hidas Au–CN–M kétfémes szupramolekulák széleskörű kutatási érdeklődésre tartanak számot, mivel szerkezeti változatosságuk mellett gyakran különleges mágneses, lumineszcens, vapokróm, kettőtörő és negatív hőtágulást mutató tulajdonságokkal rendelkeznek. Az intézetben előállítottak olyan dicianoaurát(I)-alapú Au–CN–Sn egységekből felépített rendszereket, melyek Au•••Au kötések révén tovább szerveződtek a kristályrácsban és különleges gázadszorpciós valamint mechanokróm lumineszcens tulajdonságokat mutattak. Ezek az Au–CN–Sn egységekből felépített szerkezetek újszerű ioncsere reakcióban vettek részt, amely lehetővé tette Au–CN–M (M = Co, Ni, Cu és Zn) egységekből szerveződő szupramolekuláris komplexek egyszerű előállítását.

Organokatalitikus kutatások

A frusztrált Lewis párok területe egy viszonylag új kutatási terület, amely ugyanakkor jelentős potenciállal rendelkezik a katalízis területén a megközelítés újszerűsége miatt. A kutatócsoport célja, hogy felfedje ennek a területnek a lehetőségeit és ezt a tudást átültesse az ipari gyakorlatba. Az alábbi eredményeket érték el.

Kidolgoztak egy olyan méret-növelhető szintetikus eljárást, amellyel speciális, ún. méretkizárásos Lewis savak szintézisét tudják megvalósítani. Ezt a katalizátor-fejlesztési koncepciót nemrégiben fogalmazták meg és alkalmazták sikerrel számos, ipari szempontból jelentős reakcióban. Az új szintézismódszer fontos lépést jelent annak érdekében, hogy fémmentes katalitikus hidrogénezéseket – akár nagy tételekben is – végre lehessen hajtani. Mivel a katalitikus hidrogénézés a kémiai ipar egyik legfontosabb reakciója, így eredményeik fontosak lehetnek abban, hogy mérgező és nem megújuló forrásból származó nehézfémeket (mint pl. a Pt, Pd vagy Ni) ki lehessen váltani akár ipari folyamatokban is.

A méretkizárásos elv alapján olyan katalitikus hidroszililezési reakciókat fejlesztettek ki, amelyek eddig nem tapasztalt szelektivitást mutattak. Ezáltal számos ipari szempontból fontos reakcióban nyújthatnak egyszerű és katalitikus megoldást (pl. észterek aldehidekké történő redukciója, Mukaiyama aldol reakció), amely eddig nehezen, vagy nem volt megvalósítható.

A kutatásokat kiterjesztették az ún. bifunkcionális, azaz a savas, illetve bázisos centrumot kovalens kötéssel összekötő frusztrált Lewis párok fejlesztésére is, aminek során azonban egy váratlan, a rendszer frusztráltságából adódó reaktivitást figyeltek meg. Ez a különleges átrendeződési folyamat a diotróp átrendeződés, amely reakció a természetben viszonylag gyakran fordul elő (elsősorban a terpének ciklizációja során), azonban a szintetikus eljárások esetén meglehetősen ritkán kiaknázott folyamat.

Kidolgoztak egy olyan eljárást, amely lehetővé teszi egy szuperstabil palládium-katalizátor alkalmazását a gyógyszerfejlesztés korai fázisában is, mivel a katalizátor robusztusságának köszönhetően már mikrohullámú reaktorban, magas hőmérsékleten is lehet katalitikus reakciókat kivitelezni jelentős bomlás nélkül. Rámutattak a katalizátor felhasználhatóságára a C-H aktiválásos reakciókban, mely által számos gyógyszeripari szempontból értékes molekula szintézise válik egyszerűbbé.

A terpének, illetve a terpenoidok a természetben található másodlagos metabolitoknak a legnagyobb (mintegy 60000 ismert vegyület), legváltozatosabb, de ugyanakkor biológiai

szempontból legjelentősebb csoportja. A népi gyógyászatban alkalmazott hatóanyagok jelentős mértékben terpenoid származékok, ennek ellenére meglepő, hogy a modern gyógyszerfejlesztések esetén elvétve találkozhatunk terpén származékokkal. Ennek egyik valószínű oka az, hogy a terpének kémiája a szintetikus kémia legösszetettebb, legnehezebb része, így nem csupán a célvegyületek szintézise, hanem a gyógyszeripari fejlesztésekhez nélkülözhetetlen származékainak a szintézise is nehézkes, komoly kihívást jelentő feladat. A modern szintetikus kémia mintegy 150 éve alatt tulajdonképpen két olyan szintetikus építőelem jelent meg, amelyek hozzájárultak, s mind a mai napig hozzájárulnak a terpén terület fejlődéséhez: a Hagemann észter (1903) és a Wieland-Miescher keton (1950). Az elmúlt évben a kutatócsoport egy új építőelem lehetőségét ismerte fel, amely szerkezetéből adódóan vélhetően meghaladja a korábbi két kulcsintermedier lehetőségeit. Sikeresült organokatalitikus módszer alapján megvalósítani ennek a vegyületnek a méretnövelhető, enantioszelektív szintézisét. Ezen túlmenően feltárták az új kulcs intermedier reaktivitását, számos cisz- és transz-dekalin származékot állítottak elő belőle, amelyek a Labán szuperfamilában fellelhető mintegy 7000 vegyületben megtalálható szerkezeti mintázattal megegyeznek. Az eredmények tükrében vélhető, hogy a kutatócsoport egy olyan új szintetikus megközelítést ért el, amely akár a terpenoid analógok gyógyszeripari fejlesztése előtt nyithatja meg az utat.

Polimerkéimiai kutatások

Több kiemelkedően új eredményt értek el az újszerű, nanoszerkezetű amfifil polimer kotérhálók kutatása során. A kotérhálók nanoszerkezetén alapuló nanoreaktor koncepciót igazolva többféle új szerves-szervetlen nanohibrid anyagot állítottak elő. Feltárták ezek szerkezetét és alapvető tulajdonságaikat, valamint kutatásaik ezekkel az anyagokkal új típusú, nagyhatékonyságú nanokatalizátorokat eredményeztek. Többféle szerkezetkutató módszer együttes alkalmazásával felderítették egyes kotérhálók anomális duzzadási viselkedésének a szerkezeti okait, melyről a polimer kémia egyik legrangosabb folyóiratában számoltak be. Polielektrolit nanofázisokat tartalmazó kotérhálóval intelligens pH-szelepet valósítottak meg.

A multifunkciós polimerek kutatása során olyan új szintézis stratégiákat dolgoztak ki, amelyek jól definiált szerkezetű funkciós makromolekulákat eredményeztek mind kationos, mind pedig atomátadásos gyökös polimerizációval. Jelentős továbbá az az eredményük, amelynek során – tudásunk szerint a világon elsőként – sikerült kvázielő karbokationos és gyökös polimerizáció összekapcsolásával olyan makromolekulákat előállítani, amelyek két bizonyítottan biokompatibilis hidrofób és hidrofil polimer láncból épülnek fel.

Nagy figyelmet kapott világszerte az elmúlt évben két, a polimerek környezetileg előnyös előállításával, illetve lebontásával kapcsolatos, a szakterület vezető folyóirataiban megjelent munkájuk. Egyik olyan polimerizációs közeg felismerését jelenti, amely az iparban jelenleg használttal szemben számottevően jobb környezeti tulajdonságokkal rendelkezik. A másik munkájuk a világon a harmadik legnagyobb mennyiségben előállított polimer, a poli(vinilklorid) (PVC) környezetileg előnyös, enyhe oxidatív körülmények közötti lebontásának a felfedezését foglalja magában.

Elméleti kémiai kutatások

Egy magyar- finn ERA Chemistry projekt keretében, elméleti és kísérleti módszerek közös alkalmazásával, több organokatalitikus folyamat mechanizmusát is feltárták. A kvantumkéimiai számítások megerősítették, hogy egy újonnan kifejlesztett bifunkciós organokatalizátor kooperatív hidrogénhidak segítségével fejt ki hatását, melynek köszönhetően hatékonyan alkalmazható alifás és aromás iminek Mannich-típusú reakcióiban.

Aldehidek és nitroalkének organokatalitikus Michael-addíciójában sikerült azonosítani egy olyan köztterméket, mely sok esetben gátolja a reakciót, de annak sztereoselektív protonálásával (savas ko-katalizátorok alkalmazásával) a reakció továbbhaladhat a Michael termék irányába.

Új modellt javasoltak sebességi állandók számítására. Az eljárás számítási költsége egy egydimenziós szabadenergia felszín számítás költségének a nagyságrendjébe esik. Az eljárás mind klasszikus, mind kvantumkémiai modellek esetén nagy pontossággal elvégezhető. További konceptuális előnye, hogy a sebességi állandót közvetlenül lehet kinyerni a számításokból, anélkül, hogy aktiválási energiát számolnánk.

Kiterjedt (folyadékfázisú) modelleken végzett molekuladinamikai szimulációk eredményei alapján megállapították, hogy a toluolban oldott Pt(Bu₃)/B(C₆F₅)₃ Lewis pár asszociációja termodinamikailag kedvezőtlen. Másodlagos intermolekuláris kölcsönhatások következtében azonban kis koncentrációban, az oldatban lazán kötött asszociátumok jöhetnek létre, melyek reaktív közttermékként szolgálnak hidrogénaktiválási folyamatokban.

Az intézetben előállított új borán elméleti tanulmányozásával rámutattak arra, hogy a hidrogén aktiválása a korábban javasolt reaktivitási modellel értelmezhető, vagyis az aromás vegyület a boránnal úgynevezett frusztrált Lewis párt alkot, mely heterolitikusan hasítja a hidrogént. A keletkezett ion-pár közttermék energetikailag kedvezőtlen, de hidridtranszfer útján stabilizálódik.

Anilidok és aldehidek Pd-katalizált C-H aktivált keresztkapcsolási reakciójának mechanizmusát modellezték és javaslatot tettek a mechanizmusra. A karbopalladációs lépés után egy két-fém-magos komplex jön létre és a benzoil gyök reakciója ezen a komplexen keresztül zajlik. A kétmagos komplex képződésének hajtóereje entalpiikus.

Kén-dioxid vízben való oldódását vizsgálták AIMD metadinamikai szimulációkkal és megállapították, hogy a folyamat első lépése a HSO³⁻ anion képződése. Az SO₂ molekula nemkötő elektronpárja alapvetően megszabja a víz támadás geometriáját. Az SO₂ körüli hidrátburok szerkezete a biszulfid képződést elősegíti, míg a szulfonát képződést gátolja.

Javított energiadekompozíciós sémát vezettek be, amely figyelembe veszi azt, hogy a kovalens kötések képződése során fellépő „ionos” energiakomponenseket helyesebb a kötésekhez, mintsem az egyes atomokhoz rendelni. Javított definíciót adtak továbbá a kötésrend- és vegyértékindexekre korrelált hullámfüggvények esetére.

Véglegesnek ígérkező definíciókat adtak az atomi teljes spinek (spin-négyzete) számítására mind 3-dimenziós mind Hilbert-térbeli analízis esetére, amelyek az összes megkívánható fizikai feltételnek eleget tesznek. Sikerült effektív atompályákat előállítani a Bader-féle AIM séma keretében, és vizsgálták ezek egyes elvileg is érdekes tulajdonságait.

Matematikai modellt dolgoztak ki izotóphelyettesítéses módszer tervezhetőségére, oly módon, hogy abban a lehető legkisebb hiba jelenjen meg.

Tömegspektrometriai kutatások

A Tömegspektrometria Laboratórium legfontosabb eredménye egy új, kromatográfián, tömegspektrometrián és ezzel integrált számítógépes analízisen alapuló vizsgálati protokoll kidolgozása. Ez lehetővé teszi biológiai folyadékokban igen kis mennyiségben előforduló glikoprotein izoformok azonosítását, mennyiségi meghatározását, mely nemzetközi összehasonlításban is áttörést jelent. A protokollt a szakterület egy vezető folyóiratában közzé tették, az ehhez kapcsolódó szoftver web-oldalukról elérhető.

A kidolgozott protokoll már az eltelt rövid idő alatt is bizonyította jelentőségét mind a kutatás, mind pedig a gyakorlati alkalmazás szempontjából. Ez képezi alapját a rákos megbetegedések korai felismerésére és a rákos folyamatok pato-mechanizmusának megértésére szolgáló kutatásainknak. Ennek keretében részletesen vizsgálták az AGP akut fázis protein glikoformjait, melyek (előzetes eredményeink szerint) mind rákos, mind kardio-vaszkuláris betegségek esetén megváltoznak, így orvos-diagnosztikai jelentőségük lehet. Ennek gyakorlati alkalmazására gazdasági partnerrel közös pályázatot adtak be.

b) Tudomány és társadalom

A Heterociklusos Kémiai Laboratóriumban felismert, multidrog-rezisztenciát mutató új fenotiazin származékok ígéretes vegyületek gyógyszerfejlesztési szempontból bakteriális fertőzések és daganatos megbetegedések kezelése szempontjából. Az eredmény különösen jelentős lehet a világszerte előretörő, ún. extrém drog-rezisztens (XDR) tuberkolotikus fertőzések terápiája területén.

A tömegspektrometriai kutatások néhány célkitűzése az orvos-biológiai kutatások élvonalába tartozik. Legfontosabb hosszú távú céljuk a természettudományos (ezen belül az analitika, tömegspektrometria és proteinkutatás) kutatások eredményeinek átültetése az orvosi gyakorlatba.

2011-ben beadásra került egy szabadalom a kutatóintézet spin off cége, a H4Sep Kft. (80% tulajdonrész) valamint a Sanofi Zrt. (20% tulajdonrész) részvételével, amely idén júliusban megkapta a nemzetközi szabadalmi védettséget is a WO/2012/093271 számmal. Az elmúlt időszakban tovább bővítették a katalizátor alkalmazási területét annak érdekében, hogy az új eredmények, a kiterjedtebb felhasználás révén, tovább segítsék a szabadalom értékesítését.

Ez széles körben érinti és érdekli a társadalmat, eredményeiket egyetemisták, gimnazisták körében tudományos-népszerűsítő előadásokon, laborbemutatók, TDK-munkák során ismertették.

Az intézet munkatársai aktív szerepet vállaltak középiskolás diákok és egyetemisták ismeretterjesztő oktatásában. „Szén-dioxid megkötő arany(I)tartalmú óriásmolekula előállítására” címmel került sor egyhetes programra a természettudományos pályaválasztást ösztönző, tehetséggondozását és utánpótlás-nevelését segítő „AKI kíváncsi kémikus” nyári kutatótáborban. A Népszabadságban „Ehető polimerek” és „Véres sztori a laborban” címmel, a Kémiai Panorámában „Elismerés a kvázikristályok felfedezéséért és az állhatatosságért. A 2011. évi kémiai Nobel-díj” címmel jelentettek meg közleményeket.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2012-ben

Egyetemi kapcsolatok

Az intézet kutatói aktív kapcsolatot tartanak az ELTE TTK, BME és SE egyetemekkel (doktori iskolákban Doktori Tanács tagjai, törzstagok, vezetőségi tagok).

Az intézet igazgatója „Elméleti Szerves Kémia” kötelezően választható kollégiumot és „Heteroaromás vegyületek kémiája” c. speciálkollégiumot tartott (heti 2 óra) (ELTE).

Az intézet kutatója „Anyagtudományi vizsgálati módszerek” tantárgy keretén belül a „Röntgendiffrakció” című előadást (2x3 óra időtartam) és Analitikai kémia laboratóriumi gyakorlatot tartott (BME).

Az Organokatalízis Laboratórium munkatársai aktívan vettek részt az ELTE oktatási tevékenységében (előadás tartása, 14x2 óra, valamint laboratóriumi gyakorlat tartása, egy félév, 14x1 nap).

„Fragmens alapú gyógyszerkutatás” kurzuson, illetve „Kristályok, szerkezetek, kristályosítás, fragmens keresés” címmel tartanak egyetemi előadást a BME-n.

Ipari kapcsolatok

Szerződéses kapcsolat a Servier-rel (2012-ben 200.000 Euro összértéket meghaladó szerződést kötöttek kutatás-fejlesztés területén) „Kondenzált heterociklusok szintézise” témakörben, valamint gyógyszeripari kutatás-fejlesztés területén. Ez volt az első olyan jellegű szerződéses tevékenység, ahol a megbízó az intézeti kutatócsoport eddig elért alapkutatási eredményre építette a kutatás-fejlesztési együttműködést.

Szerződéses gyógyszeripari kutatás-fejlesztési kapcsolat „Feszült gyűrűs vegyületek kémiájának feltárása és szintézise” tématerületen a Richter Gedeon Nyrt-vel. E munka keretében az intézeti kutatócsoport eredményei alapján, új szabadalmaztatható feszült-gyűrűs szerkezetek szintézisét valósítják meg. A Richter Gedeon Nyrt-vel „fehérje minták glikozilációs mintázatának meghatározása” területén is folytak szerződéses kutatások.

Két svájci vállalkozás (a parfümipari Givaudan és az agrokémiai Syngenta), a Sanofi cseh leányvállalata a Zentiva, valamint a Servier gyógyszeripari cég párizsi központja hívta meg az Organokatalízis Laboratórium vezetőjét előadást tartani. Ennek keretében ipari konzultációkra is sor került, kiemelendő, hogy egyik esetben a konzultáció célja elsősorban az általuk korábban kifejlesztett organokatalizátor ipari méretű alkalmazásával volt kapcsolatos.

Tömegspektrometriai ipari szerződéses vizsgálatokat végeztek a TEVA Gyógyszergyár, Debrecen számára (szennyezés vizsgálat), a Biosystem International Kft, Debrecen számára (proteomika), valamint a Glycom Kft., Budapest részére (szerkezetvizsgálat).

Nemzetközi tudományos kapcsolatok

Az Organokatalízis Laboratórium vezetőjét Szingapúrba, a NUS egyetemre hívták meg egy egyhetes előadókörútra és konzultációra. Ezen túlmenően két nemzetközi konferencián (Franciaországban és Angliában) volt meghívott előadó.

Szerződéses együttműködések folytak Olasz–magyar Tét 2012–2014 egyezmény keretében a Milano-Bicocca egyetemmel, ERA Chemistry (magyar–finn együttműködés) keretében ‘enolizáló organokatalizátorok fejlesztése’ terén a finn Jyväskylä-i egyetemmel. Eredmények: Elméleti és kísérleti módszerek közös alkalmazásával, több organokatalitikus folyamat mechanizmusát is feltárták. Az együttműködésből 2 közös publikáció született.

A Tömegspektrometriai Laboratórium szerződéses együttműködésben vett részt Ukrán-magyar MTA kétoldalú megállapodás keretében „Biomolekulák tömegspektrométerben végbemenő elemi reakcióinak modellezése” tématerületen. Együttműködő partnerintézmény: B. Verkin Institute for Low Temperature Physics and Engineering of the National Academy of Sciences of Ukraine, Kharkov, Ukrajna. Eredmények: Poliéter oligomereknek hisztidinnel képzett gázfázisú nemkovalens komplexein kimutatták, hogy a komplexeket többszörös hidrogén-híd kötések és koordinációs kötések stabilizálják, azáltal, hogy a polimer láncok körbeveszik a töltött amino csoportot. Szerkezetek modellezésénél fontos figyelembe venni a poliéter láncok ilyen „önszerveződését”. A munkából közös publikáció született.

Az Egykristály Röntgen-diffrakciós Laboratórium új kapcsolatot alakított ki a berlini Helmholtz-Zentrummal BESSY szinkrotron sugárforrás használatához.

Finn PhD-hallgató egyhónapos szakmai gyakorlaton vett részt az intézetben. A projekt egyik magyar résztvevője (Madarász Ádám) két hónapig vendégkutatóként dolgozott a finn Jyväskylä-i Egyetemen.

Intenzív szakmai kapcsolatot alakítottak ki a német „Institute for Organic Chemistry, Technical University Bergakademie Freiberg” kutatóhellyel „Izostrukturalitás és molekuláris izometritás vizsgálatok” témakörben. Az együttműködés keretében ritkán vizsgált peremen és laterálisan szubsztituált kalixarének konformációs viselkedését és zárványkomplex képzését tanulmányozták. A kutatásokból közös közlemény jelent meg.

Az intézet szervezésében külföldi előadók tartottak előadást Budapesten:

Prof. John R. Helliwell: Why does a lobster change colour on cooking? School of Chemistry, University of Manchester, UK, 2012. február 24.

Prof. Andreas Roodt: Perspectives in the Design of Radiopharmaceuticals as Drugs University of the Free State, Bloemfontein, South Africa, 2012. február 27.

Prof. D. L. Boger: Vinblastine, Synthetic and Mechanistic studies. The Scripps Research Institute, La Jolla, US „NOVARTIS LECTURES” sorozat keretében, 2012. május 23.

Dr. Guido Koch: The total synthesis of (+)-Discodermolide. Basel, Novartis, 2012. május 23. „NOVARTIS LECTURES” keretében

Részvétel nemzetközi rendezvények szervezésében

Az intézet munkatársai részt vettek

a „European Colloquium on Heterocyclic Chemistry szervezőbizottságában, kollokvium idején (Reading, UK, Aug. 13–17, 2012) rendezvényének megszervezésében és megtartásában,

a 29th Informal Meeting on Mass Spectrometry, 2012. április 29. – május 2. Olomouc, Csehország, szervezésében,

a 6th Central and Eastern European Proteomic Conference, 2012. október 14–17., Budapest, szervezésében,

a 27th European Crystallographic Meeting. August 6–11., 2012. Bergen, Norway szervezésében Szervezőbizottsági tagként,

az Executive Committee Meeting of the European Crystallographic Association, February 2012, Budapest szervezésében.

IV. A 2012-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Hazai pályázatok

„A glikozilációs folyamatok feltérképezése és kapcsolata a rákos megbetegedések patofiziológiájával” (OTKA NK83857) című pályázati témában vettek részt. A mintaelőkészítési módszereket továbbfejlesztették vérszérumból történő proteomikai, glikoproteomikai vizsgálatokhoz. Egy HPLC alapú módszer segítségével vérplazma proteinjeinek, glikoproteinjeinek elválasztását oldották meg, vizsgálták a módszer reprodukálhatóságát, meghatározták az elvesző anyagmennyiségeket, továbbá elkezdtek a módszer részletes optimalizálását a lehető legjobb elválasztás és kinyerés elérése céljából. Az eredményeket nemzetközi konferenciákon és tudományos publikációkban mutatták be.

A pályázat teljes támogatási összege 85 M Ft, ebből 2012-ben felhasznált rész 21 M Ft.

Az „Új szintézismódszerek kidolgozása és alkalmazása célzott hatásterületen aktív heterociklusos molekulák” (OTKA NK 77784) című pályázat során az elvégzett munka rövid értékelése: új katalitikus és szintetikus lépések kidolgozásával és fejlesztésével sokrétű munkát végeztek új gyűrűvázak előállítására, flash-vákuum pirolízises szintézis kidolgozására, gyógyhatású fenotiazinok felismerésére és szintézisére. Az eredményeket 18, főként magas

impakt-faktorú nemzetközi folyóiratban megjelent publikáció ismerteti, emellett több hazai és nemzetközi fórumon hangzottak el előadások. Az eredmények elérésében nélkülözhetetlen szerepet játszottak a résztvevő szerkezeti kémiai (főként NMR és MS-spektroszkópiái), elméleti kémiai és biokémiai laboratóriumok.

2012 szeptemberében lejáró támogatás, teljes értéke: 90 M Ft.

Az intézet „Önszerveződő szupramolekuláris arany komplexek” címmel Lendület programot nyert (LP2012-21/2012). Előállították és egykristály röntgendiffrakcióval szerkezetileg jellemezték egy kétmagvú arany(I)-makrociklus többféle módosulását. Tanulmányozni kezdték a vegyület különleges mechanokróm lumineszcenciáját, azaz a mechanikai erő hatására bekövetkező lumineszcens színváltozást. Vizsgálták az arany(I)tartalmú szupramolekula kristályszerkezete és a lumineszcens tulajdonságok közötti kapcsolatot. A pályázat teljes támogatási összege 147 M Ft, ebből 2012-ben felhasználható 11 M Ft volt.

Egy kutatójuk Bolyai János Kutatási Ösztöndíjat nyert el, 2012 szeptemberétől, 3 évre.

Egy kutatójuk „A szupramolekuláris kölcsönhatások szerepe egy- és többkomponensű szilárd fázisú rendszerek felépítésében” címmel OTKA K 100801 pályázatot nyert el. A pályázat keretében 2012-ben végzett munka fontosabb eredményei:

Nagyszámú újonnan szintetizált szerves és fémorganikus vegyület szerkezetét határoztuk meg és elemeztük, ahol a másodlagos kölcsönhatásokat szisztematikusan változtattuk, hogy megértsük a molekulák kristályban való elrendeződését irányító erőket. Egyaránt vizsgáltak egy- és többkomponensű rendszereket, zárványkomplexekeket és ko-kristályokat. A pályázati támogatás mértéke: 5.572 M Ft.

Egy kutatójuk TÉT (francia–magyar) pályázatot nyert el „Bakteriális antibiotikum-rezisztencia leküzdése farmakoför analízis segítségével” címmel (TET_11_FR-SZKI0228). A pályázati támogatás értéke: 1,6 M Ft. Együttműködő partner: University of Marseille.

Egy kutatójuk TÉT (osztrák–magyar) pályázatot nyert el „Proteomikában használatos tömegspektrometriai módszerek fejlesztése és alkalmazása” terén. Együttműködő partner: Vienna University of Technology / Institute of Chemical Technologies and Analytics. A pályázati támogatás értéke: 2 M Ft.

V. A 2012-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Takács D, Nagy I, Bombicz P, Egyed O, Jemnitz K, Riedl Z, Molnár J, Amaral L, Hajós Gy: Selective hydroboration of dieneamines. Formation of hydroxyalkylphenothiazines as MDR modulators. *Bioorganic and Medicinal Chemistry*, 20: 4258-4270 (2012)
2. Tárkányi G, Király P, Soós T, Varga Sz: Active conformation in amine-thiourea bifunctional organocatalysis performed by catalyst aggregation. *Chemistry-A European Journal*, 18(7): 1918-1922 (2012)
3. Szarka Gy, Domján A, Szakács T, Iván B: Oil from poly(vinyl chloride): unprecedented degradative chain scission under mild thermooxidative conditions. *Polymer Degradation and Stability*, 97: 1787-1793 (2012)
4. Aradi B, Turiak L, Misjak P, Paloczi K, Ozohanics O, Drahos L, et al (5, Vekey K): Proteomic analysis of thymus-derived apoptotic bodies and microvesicles. *European Journal of Clinical Investigation*, 42: 67-68 (2012)

**AZ MTA TERMÉSZETTUDOMÁNYI KUTATÓKÖZPONT FŐBB MUTATÓI ÉS
PÉNZÜGYI ADATAI 2012-BEN**

Főbb mutatók 2012-ben

MTA Természettudományi Kutatóközpont*

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám ¹ :	686	Ebből kutató ² :	356	
PhD, kandidátus:	196	MTA doktora:48	Rendes tag és levelező tag:	5
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :			10	
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :			160	

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :	559		
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :	530		
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:	39		
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:	25		
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:	383		
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció	350		
Könyv, atlasz	magyarul: 3	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 10	idegen nyelven:	28

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	1125,004	Összes független hivatkozás száma:	12759
Összes hivatkozás száma ⁸ :	14952		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2012-BEN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD:	14	MTA doktora:	1
---	------	----	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	1	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	1
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :	304		
poszterek száma:	238		
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	69	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	77
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :	53		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :	125		
Témavezetések száma: TDK munka:	58	Diplomamunka (BSc):	106
Diplomamunka (MSc):	97	PhD:	177

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :	3057 023	E Ft		
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁶ :	48	Teljes saját bevétel:	8668 532	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		5064	E Ft	
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:		103		
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	461 254	E Ft		
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:		67		
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	551 432	E Ft		
Az év folyamán az összes uniós forrásból támogatott témák száma:		51		
A tárgyévre vonatkozó bevétel ¹⁷ :	356 746	E Ft		
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:				
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	2991	E Ft		
A tárgyévre vonatkozó vállalkozásoktól származó és nem kutatási bevétel ¹⁸ :	7752 299	E Ft		

* A kutatóközponti adatok hitelesek, ellenőrzöttek; a kutatóközponton belüli intézeti adatok tájékoztató jellegűek

Részletezett pénzügyi adatok 2012-ben

MTA Természettudományi Kutatóközpont

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege:	3057 023	E Ft
Az időszak folyamán a teljes saját bevétel összege:	8668 532	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:	5064	E Ft
OTKA - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	461 254	E Ft
Innovációs Alapból - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	551 432	E Ft
ÚMFT - a tárgyévre vonatkozó bevétel:		E Ft
Egyéb hazai pályázatok - a tárgyévre vonatkozó bevétel:		E Ft
EU-s pályázatok - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	356 746	E Ft
Egyéb külföldi pályázatok - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	2991	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozásoktól származó bevétel - kutatásra:	170	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozásoktól származó bevétel - egyéb:	1142	E Ft
A tárgyévre vonatkozó egyéb kutatási bevétel:	7750 987	E Ft
A tárgyévre vonatkozó egyéb nem kutatási bevétel:		E Ft

Főbb mutatók 2012-ben

MTA TTK Anyag- és Környezetkémiai Intézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	118	Ebből kutató ² :	84	
PhD, kandidátus:	40	MTA doktora:15	Rendes tag és levelező tag:	1
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :				1
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :				26

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :	126		
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :	121		
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:	10		
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:	19		
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:	80		
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció	73		
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 2	idegen nyelven:	5

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	213,97	Összes független hivatkozás száma (2011):	6439
Összes hivatkozás száma (2011) ⁸ :			7577

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2012-BEN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 2	MTA doktora:	0
---	--------	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :	50		
posztterek száma:	52		
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	8	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	21
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :	0		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :	15		
Témavezetések száma: TDK munka:	4	Diplomamunka (BSc):	20
Diplomamunka (MSc):	16	PhD:	23

Főbb mutatók 2012-ben

MTA TTK Molekuláris Farmakológiai Intézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	66	Ebből kutató ² :	48	
PhD, kandidátus:	27	MTA doktora:7	Rendes tag és levelező tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :				1
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :				17

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :				76
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :				72
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:				2
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:				3
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:				66
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció				65
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:		0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:		1

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	212,21	Összes független hivatkozás száma (2011):		0
Összes hivatkozás száma (2011) ⁸ :				0

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2012-BEN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 0	MTA doktora:		1
---	--------	--------------	--	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :		0
--	---	---	--	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :				29
		poszterek száma:		28
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	3	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:		9
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :	14			

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :				21
Témavezetések száma: TDK munka:	5	Diplomamunka (BSc):		11
Diplomamunka (MSc):	12	PhD:		21

Főbb mutatók 2012-ben

MTA TTK Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Intézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	142	Ebből kutató ² :	79	
PhD, kandidátus:	43	MTA doktora:13	Rendes tag és levelező tag:	1
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :				2
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :				26

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :	144		
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :	140		
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:	1		
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:	4		
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:	116		
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció	101		
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 1	idegen nyelven:	4

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	257,16	Összes független hivatkozás száma (2011):	2655
Összes hivatkozás száma (2011) ⁸ :			3006

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2012-BEN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 1	MTA doktora:	0
---	--------	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	1	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	1
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :	99		
posztterek száma:	83		
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	36	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	12
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :	0		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			31
Témavezetések száma: TDK munka:	14	Diplomamunka (BSc):	30
Diplomamunka (MSc):	27	PhD:	33

Főbb mutatók 2012-ben

MTA TTK Szerves Kémiai Intézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	77	Ebből kutató ² :	62
PhD, kandidátus:	29	MTA doktora:	9
		Rendes tag és levelező tag:	1
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :			2
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :			34

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			90
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			86
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			2
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			1
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			81
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			78
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	1

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	270,88	Összes független hivatkozás száma (2011):	0
Összes hivatkozás száma (2011) ⁸ :			0

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2012-BEN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 3	MTA doktora:	0
---	--------	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			24
		poszterek száma:	21
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	5	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	11
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :	25		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			13
Témavezetések száma: TDK munka:	5	Diplomamunka (BSc):	2
Diplomamunka (MSc):	8	PhD:	22

Főbb mutatók 2012-ben

MTA TTK Enzimológiai Intézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	106	Ebből kutató ² :	61
PhD, kandidátus:	31	MTA doktora: ⁷	2
		Rendes tag és levelező tag:	2
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :			2
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :			27

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :	55		
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :	54		
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:	0		
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:	0		
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:	50		
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció	44		
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	2

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	206,1	Összes független hivatkozás száma (2011):	2189
Összes hivatkozás száma (2011) ⁸ :			2586

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2012-BEN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 6	MTA doktora:	0
---	--------	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :	36		
poszterek száma:	25		
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	4	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	11
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :	1		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :	12		
Témavezetések száma: TDK munka:	11	Diplomamunka (BSc):	8
Diplomamunka (MSc):	12	PhD:	20

Főbb mutatók 2012-ben

MTA TTK Kognitív Idegtudományi és Pszichológiai Intézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	78	Ebből kutató ² :	35
PhD, kandidátus:	15	MTA doktora: 5	Rendes tag és levelező tag: 0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :			2
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :			16

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			112
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			100
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			26
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			2
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			30
mindezekből recenzió, kritika magyarul: 4		idegen nyelven:	0
Megjelent könyv/monográfia, atlasz magyarul: 3		idegen nyelven:	0
könyvrész, könyvfejezet, térkép magyarul: 7		idegen nyelven:	15
Könyv szerkesztése ⁷ magyarul: 2		idegen nyelven:	2
Folyóirat, vagy sorozatszerkesztés magyarul: 1		idegen nyelven:	0

3. IDÉZETTSÉGI MUTATÓK (2011)

Összes hivatkozás száma ⁸ :	2233	Összes független hivatkozások száma:	1875
--	------	--------------------------------------	------

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2012-BEN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 2	MTA doktora:	0
---	--------	--------------	---

5. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Tud. előadások száma nemzetközi rendezvényen ¹⁰ :	66	hazai:	89
Nyilvános esemény megrendezése ¹³ :	3	kulturális rendezvények ¹⁴ :	6
Tanácsadói tevékenységek száma ¹¹ :			13
Nemzetközi tudományos bizottsági tagság:	13	hazai:	12
Nemzetközi folyóirat szerkesztőségi tagság:	13	hazai:	17

6. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹² :			33
Témavezetések száma: TDK munka: 19		Diplomamunka (BSc):	35
Diplomamunka (MSc): 22		PhD:	58