

**A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
KUTATÓHELYEINEK
2005. ÉVI TUDOMÁNYOS EREDMÉNYEI**

Természettudományi kutatóintézetek

Budapest

2006

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
KUTATÓHELYEINEK
2005. ÉVI TUDOMÁNYOS EREDMÉNYEI

Természettudományi kutatóintézetek

Budapest

2006

A Magyar Tudományos Akadémia természettudományi kutatóhelyeinek beszámolóí alapján –
az intézmények vezetőinek aktív közreműködésével – szerkesztették az MTA Titkársága
Természettudományi Főosztályának munkatársai

Szegő Károly főosztályvezető
Banczerowski Januszné főosztályvezető-helyettes

Benkó György

Fekete Márton

Gaugecz Janka

Hárs Titanilla

Herczeg György

Jolánkai Márton

Redler László

Tóth Beatrix

ISSN: 1418-835X

F.k.: Szegő Károly

Tartalomjegyzék I.

Előszó	5
A táblázatokkal kapcsolatos megjegyzések	7

Élettudományi kutatóintézetek

Állatorvos-tudományi Kutatóintézet	11
Balaton Limnológiai Kutatóintézet	21
Kísérleti Orvostudományi Kutatóintézet	32
Mezőgazdasági Kutatóintézet	45
Növényvédelmi Kutatóintézet	58
Ökológiai és Botanikai Kutatóintézet	69
Szegedi Biológiai Központ	
SZBK Központi Laboratóriumai	79
SZBK Biofizikai Intézet	81
SZBK Biokémiai Intézet	91
SZBK Enzimológiai Intézet	100
SZBK Genetikai Intézet	110
SZBK Növénybiológiai Intézet	120
Talajtani és Agrokémiai Kutatóintézet	126
Tájékoztató a VAHAVA kutatási projekt végrehajtásáról	137

Matematikai és természettudományi kutatóintézetek

Atommagkutató Intézet	141
Földrajztudományi Kutatóintézet	157
Geodéziai és Geofizikai Kutatóintézet	166
Geokémiai Kutatóintézet	177
Kémiai Kutatóközpont	187
Kémiai Kutatóközpont Biomolekuláris Kémiai Intézet	189
Kémiai Kutatóközpont Felületkémiai és Katalízis Intézet	198
Kémiai Kutatóközpont Szerkezeti Kémiai Intézet	207
Kémiai Kutatóközpont Anyag- és Környezetkémiai Intézet	218
Kémiai Kutatóközpont Izotópkutató Intézet	229
Konkoly Thege Miklós Csillagászati Kutatóintézet	238
KFKI Atomenergia Kutatóintézet	248
KFKI Részecske- és Magfizikai Kutatóintézet	262
Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Kutatóintézet	277
Rényi Alfréd Matematikai Kutatóintézet	292
Számítástechnikai és Automatizálási Kutatóintézet	304
Szilárdtestfizikai és Optikai Kutatóintézet	321

KÉMIAI KUTATÓKÖZPONT

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

Telefon: 438-1111, Fax: 438-1143

e-mail: palg@chemres.hu; honlap: <http://www.chemres.hu>

Biomolekuláris Kémiai Intézet

1025 Budapest Pusztaszeri út 59/67.
(1525 Budapest, Pf. 17.)
Tel.: 438-1110, Fax: 438-1145
e-mail: ghajos@chemres.hu

Felületkémiai és Katalízis Intézet

1025 Budapest Pusztaszeri út 59/67.
(1525 Budapest, Pf. 17.)
Tel.: 438-1111, Fax: 438-1143
e-mail: palg@chemres.hu

Szerkezeti Kémiai Intézet

1025 Budapest Pusztaszeri út 59/67.
(1525 Budapest, Pf. 17.)
Tel.: 438-1120, Fax: 438-1100/276 m
e-mail: kubinyi@chemres.hu

Anyag- és Környezetkémiai Intézet

1025 Budapest, Pusztaszeri út 59/67.
(1525 Budapest, Pf. 17.)
Tel.: 438-1130, Fax.: 438-1147
e-mail: szepvol@chemres.hu

Izotópkutató Intézet

1121 Budapest, Konkoly T. u. 29-33.
(1525 Budapest, Pf. 77.)
Tel.: 392-2531, Fax: 392-2533
e-mail: wojn@alpha0.iki.kfki.hu

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

A kutatóközpont fő feladata a kémia és a vele rokon tudományágak (elsősorban az élettudományok és a fizika) fontos területein olyan alapvető és nemzetközi színvonalú tudományos kutatások folytatása, amelyek nagyobb létszámú kutatócsoportok összehangolt tevékenységét és korszerű nagyműszeres módszerek koordinált alkalmazását igénylik.

A kutatóhely fontos feladata továbbá az egyetemi oktatómunkában és a posztgraduális képzésben való részvétel.

A központ tevékenységében lényeges szerepük van a gyakorlati célokat szolgáló kutatási programoknak. Ebből a szempontból kiemelkedő jelentősége van a 2004-ben elnyert, „Kémia az életminőség javításáért” c. (GVOP) kooperációs kutatóközpont pályázat feladatai 2005. évi teljesítésének.

Az MTA Kémiai Kutatóközpont 2005. évi tudományos kutatásait a *funkcionális anyagok kémiai kutatásának* tematikája foglalta egységes keretbe.

A kutatási tevékenység fő irányai a következők voltak:

- Biomolekuláris és szerves kémiai kutatások
- Felületkémiai és katalízis kutatások
- Szerkezeti kémiai és reakciókinetikai kutatások
- Anyagtudományi és környezeti kémiai kutatások
- Izotópkémiai kutatások.

VI. A kutatóhely 2005. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: Kémiai Kutatóközpont

Átlagléttség ¹ :	431	Ebből kutató ² :	247
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			128
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma:			389
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ³ :			374
<i>Ebből</i> idegen nyelvű külföldi folyóiratban:	288	idegen nyelvű hazai folyóiratban:	23
nemzetközi együttműködés keretében:	174	SCI által regisztrált folyóiratban:	298
összesített impakt faktor:	596,442	összes hivatkozás száma ⁴ :	4760
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			3886
Megjelent könyv:	-	könyvfejezet:	11
<i>ebből</i> magyar nyelven könyv:	-	könyvfejezet:	-
		jegyzet:	-
		jegyzet:	-
Megvédett PhD értekezés:	9	Megvédett MTA doktori értekezés ⁵ :	-
Bejelentett találmányok száma:	7	Megadott szabadalmak száma:	2
<i>ebből</i> külföldön:	4	<i>ebből</i> külföldön:	-
Értékesített szabadalmak száma:			-
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma:	178	poszterek száma ⁶ :	154
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ⁷ :			55
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	31	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	40
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ⁸ :		1.906,2 MFt	
Beruházási támogatás:	16,0 MFt	Fiatal kutatói álláshelyek száma ⁹ :	22
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			60
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	99,3 MFt	
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			16
NKFP:	9	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	258,1 MFt
Egyéb:	7	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	69,5 MFt
Az év folyamán művelt NFT témák száma ¹⁰ :			20
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	372,3 MFt	
Külföldi vagy nemzetközi forrásból művelt témák száma ¹¹ :			20
EU forrásból:	14	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	154,8 MFt
Egyéb:	6	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	6,8 MFt
Egyéb pályázatok keretében művelt témák száma ¹² :			4
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	6,72 MFt	
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			145
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	386,1 MFt	
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány ¹³ :			1,91 MFt

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

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

A Biomolekuláris Kémiai Intézet 2005. évi fő feladata volt: nemzetközi színvonalú tudományos kutatások folytatása az élő szervezetek kémiai folyamatainak, az ezekben szerepet játszó molekuláknak a megismerése, a folyamatok kedvező irányú befolyásolása, illetve a molekulák tervezése és szintézise területén.

Az intézet további feladatai voltak a következők: részvétel az egyetemi oktatásban és a posztgraduális képzésben, valamint szakmai tanácsadás és gyakorlati célú kutatási-fejlesztési feladatok elvégzése.

II. Az év folyamán elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények, azok gazdasági-társadalmi haszna

Alkalmazott szerves kémiai kutatások

Kidolgozták a glikoaminosavak előállításához szükséges formil C-glikozidok szintézisét. A szénhidrát-tartalmú peptidek és fehérjék (glikopeptidek és glikoproteinek) alapvető szerepet töltenek be számos biológiai folyamatban, így például az immunrendszer védekezési mechanizmusában. Ezek a biológiai makromolekulák fontos alkotói a sejtmembránoknak és szénhidrát alkotóelemeik kulcsfontosságúak a sejt felületén zajló molekulafelismerési folyamatokban. A normál és tumoros sejtek alapvetően különböző glikoprotein-profillal rendelkeznek a sejt külső felületén. A tumoros sejtek megváltozott membrán glikoproteinjeinek extracelluláris szegmensei viszont potenciálisan tumor antigén hatással rendelkezhetnek. Ilyen szerkezetű glikopeptidek, mint szintetikus vakcinák felhasználhatók a rák elleni védekezés immunoterápiás kezelésében. Az immunterápiában az O- és N-glikozidok használata viszont nagyfokú hidrolízisérzékenységük miatt korlátozott, ezért a kémiai és enzimatis hidrolízissel szemben sokkal kevésbé érzékeny C- vagy S-glikozidok szintézise előnyösebb. Az intézet kutatói által előállított formil C-glikozidokból a glikoaminosavak előállítása Strecker-szintézissel megvalósítható és az így nyert glikoaminosavak szilárdfázisú peptidszintézis során építhetők be a peptidláncba.

Izotiocianát típusú rovar attraktánsokat azonosítottak és szintetizáltak. Az előállított vegyületek rovarcsapdáknak történő felhasználása rendkívül fontos a rovarkártevők irtásában.

Kutatói kapacitás: 3 fő, ebből intézeti állományban: 3 fő. Teljes ráfordítás: 30 M Ft, ebből pályázati forrás: 1 M Ft.

Nagy fajlagos aktivitású tríciummal jelzett ciklotiazid előállítására szintézismódszert dolgoztak ki. A ciklotiazid GABA_A és glutamát receptorokkal történő kölcsönhatásának vizsgálata felhasználható az agy neurális aktivitásának kutatásában.

Kutatói kapacitás: 3 fő, ebből intézeti állományban: 2 fő. Teljes ráfordítás: kb. 20 M Ft.

A GVOP által támogatott, konzorciumi együttműködés keretében oligonukleotidokat szintetizáltak az uracil-DNS endonukleáz(UDE)-enzim kötődési tulajdonságainak tanulmányozására. Az említett enzim affinitáskromatográfiás tisztításához, nukleáz-rezisztens mátrix előállítása céljából, kísérleteket végeztek védett 2'-O-metil-ribonukleozid-3'-P-amidit reaktív monomerek racionális szintézisére.

Tekintve, hogy az UDE enzim a teljes átalakulással fejlődő rovarok egy adott fejlődési stádiumában fontos szerepet játszik, ezért megismerése különböző molekuláris biológiai alkalmazásokon kívül, esetleg lehetővé tenné új típusú rovarirtó szerek kifejlesztését is.

Új 5-szubsztituált-uracil peptid-nukleinsav (PNS) építőegységek előállítására alkalmas szintézismódszerek (különböző Pd-katalizált keresztkapcsolások) összehasonlító vizsgálata során megállapították, hogy a bázisrészén nem-védett 5-jód-uracil PNS monomerből kiindulva az 5-aril származékok csak az ún. Stille-kapcsolással (nagyreszt toxikus aril-trialkilon reagensek alkalmazásával) állíthatók elő. A sokkal szélesebb körben alkalmazható és veszélytelen Suzuki-kapcsolások (reakciók aril-boronsavakkal bázis jelenlétében) sikeres megvalósítása csak az uracil-bázis N3-védése után lehetséges. Az említett N3-védőcsoport bevezetése egyúttal kizárja a Sonogashira-kapcsolások (reakciók alkinil-réz vegyületekkel) során korábban kapott, nem kívánt melléktermékek képződését is.

Az 5-aril,- illetve 5-alkinil-uracil bázisokat tartalmazó peptid-nukleinsavak, várhatóan erős és szelektív hibridizációs tulajdonságaik folytán, főleg géndiagnosztikai szerekként (pl. PNS mikrochipekben) másrészt antiszensz vagy antigén oligonukleotidokba építve terápiás célra is alkalmazhatók.

Kutatói kapacitás: 3 fő, ebből intézeti állományban: 3 fő. Teljes ráfordítás: 25 M Ft, ebből pályázati forrás: 7 M Ft.

Szintetikus szerves kémiai kutatások

Palládium-katalizált keresztkapcsolások kiszélesítésével indolokinolin alkaloidok és analógjaik totálszintézisét valósították meg, ily módon újabb interkaláló tulajdonságú heterociklusokat nyertek. A biológiai aktivitás mérését brit kutatócsoporttal kooperációban végezték el.

Benzotriazin-vázú vegyületek körében a modern „flash vákuum” technika alkalmazásával elméletileg és szintetikus szempontból egyaránt lényeges gyűrűizomerizációt figyeltek meg és értelmeztek. Szintetizálták e gyűrűváz funkcionizált származékait: azometin-imineket, melyek cikloaddíciójával új, polikondenzált heterociklusok irányába hoztak létre szintetikus lehetőségeket. Ezeknél az átalakulásnál különös figyelmet fordítottak a folyamatok regio- és sztereoszelektív lefutására. Piridingyűrűs ikerionos vegyületek körében diaza és triaza Cope-átrendeződéseket mutattak ki.

Bifunkcionális kinin alapú organokatalizátorokat fejlesztettek ki és alkalmaztak szimmetrikus reakciókban. Olyan katalitikus hatású szerves molekulát állítottak elő, amely a katalitikus központban egyszerre Lewis-savas és -bázisos funkciós csoportokkal rendelkezik, hasonlóan

az enzimekhez. Ennek eredményeként e „mikroenzim” hatékonyan képes katalizálni számos aszimmetrikus Michael-addíciós reakciót. Fázisjelölést alkalmaztak katalizátorok visszanyerésének céljából, ennek következtében könnyen el tudták választani a katalizátort a reakcióelegytől, valamint vissza is tudták azt forgatni.

Kutatói kapacitás: 11 fő, ebből intézeti állományban: 9 fő. Teljes ráfordítás: 75 M Ft, ebből pályázati forrás: 20 M Ft.

Természetes szerves anyagok kutatása

A 8-oxo-ergolén sikeres szintézise alapján kísérleteket végeztek D-nor-ergolinvázas vegyületek szintézisére, melynek során a lizergsav D-gyűrűben öttagú analogonjainak származékait (észterek, nitril) állították elő. A cikloklavin alkaloid egy ígéretes intermedierének előállítását is megvalósították.

A lizergsav-származékok epimerizációjának vizsgálata során egy eddig nem tapasztalt dimerizációt figyeltek meg. A dimer szerkezetét és térszerkezetét finn NMR- és krisztallográfiai vizsgálatokkal tisztázták.

A 8-oxo-ergolénből kiindulva három új ergolinvázas alkaloid [(+)-szetoklavin, (+)-izoszetoklavin és (-)-9,10-dihidroiziszetoklavin] totálszintézisét valósították meg, a harmadiknak korábban mások által publikált szerkezetét (és helytelen elnevezését) korrigálták.

Új glükozidáz-inhibitor hatású polihidroxi-kinolizidinek és indolizidinek kutatása során 4-acetoxi-pipekolin észter antipódok, valamint természetes prolin acilezésével számos intermedier előállítása történt meg.

Az epiquinamide nevű, békabőrből izolált kinolizidin-vázas alkaloid totálszintézisét racém formában, az utolsó lépés kivételével, megvalósították.

Kutatói kapacitás: 5,25 fő, ebből intézeti állományban: 5 fő. Teljes ráfordítás: 47 M Ft, ebből pályázati forrás: 6 M Ft.

Molekulárfarmakológiai kutatások

Kimutatták GABA agonisták és endogén neuroszteroidok nanomólos affinitású kötődését GABA_A receptorok egy kisagyi populációján és kifejlesztettek egy alegység-szelektív, nanomólos, allostérikus modulátort: egy neuroaktív 17β-szubsztituált pregnán szteroidot.

Számítógéppel modellezték az 5-HT₃ típusú szerotonin receptor ligandkötő üregét és a kötődés allostérikus modulációját.

Összefoglaló tanulmányban értelmezték az ionotróp receptorok aktivációjának, az agonista és antagonisták kötődésnek termodinamikai diszkriminációját.

Jellemezték a természetes apokarotinoidok közé tartozó bixin kötődését humán szérumban albuminhoz és α₁-savanyú glikoproteinhez. Elsőként vizsgálták CD-spektroszkópiás módszerrel a leukotrién-albumin kölcsönhatást. Tanulmányozták a bors alkaloidjának, a piperinnek és a *transz*-parinarinsavnak a kötődését egy lipokalin fehérjéhez (β-laktoglobulin).

Kutatói kapacitás: 10 fő, ebből intézeti állományban: 6 fő. Teljes ráfordítás: 37 M Ft.

Neurokémiai kutatások

Új típusú GABA transzportfolyamatot ismertek fel, melyet transzportálódó glutaminsav analógok specifikusan gátolnak. A felismert Glu-szenzitív GABA transzportfolyamatot vagy egy már ismert GABA transzporter altípus (GAT3, GAT4), vagy egy eddig ismeretlen idegi transzportfehérje szabályozza.

Elsőként mutatták ki, hogy a metabolikus prekursor szukcinsav kötődik a szinaptikus gammahidroxivajsav receptorhoz.

A korábbi vizsgálataik szerint potenciális antiepileptikumként jellemzett 2-metil-4-oxo-3H-kinazolin-3-acetil piperidin (Q5) molekula hatásmechanizmusát vizsgálva kimutatták, hogy a Q5 csökkenti a neuronális hálózat serkenthetőségét, amelyet vagy egy, az I. osztályba tartozó metabotróp glutaminsav receptor (mGluR) altípus, vagy egy eddig ismeretlen mGluR altípus szabályozhat.

Kimutatták a foszfodieszteráz 5/6 (PDE5/6) enzim katalitikus inhibitor sildenafil fényválasznövelő hatását izolált patkány retinában. Az inhibitor paradox fényhatásának értelmezéséhez elkészítették a PDE6 enzim homológia modelljét és vizsgálták a sildenafil, valamint az enzim cGMP katalitikus kötőhelye között fellépő kötődési kölcsönhatást *in silico*. Így felismerhetővé vált a sildenafil paradox fényhatásának molekuláris mechanizmusa: a sildenafil a cGMP katalitikus kötőhelyhez kötődve gátolja az enzimaktivitást gátló PDE6 gamma alegység kötődését ehhez a kötőhelyhez.

Kutatói kapacitás: 8 fő, ebből intézeti állományban: 8 fő. Teljes ráfordítás: 64 M Ft, ebből pályázati forrás: 17 M Ft.

Farmakobiokémiai kutatások

A biológiai hasznosíthatóság kialakításában és a gyógyszerinterakciókban, rezisztenciában kulcsszerepet játszó transzport proteinek közül a *mdr1*, *mrp2* és *mrp3* aktivitásának mérését patkány és humán máj primer hepatocita kultúrában végezték. Igazolták, hogy néhány kolesztatikus szer, mint a rifampicin, indometacin, klofibrát és probenecid a kanalikuláris *mrp2* gátlásán keresztül csökkenti a bilirubin konjugátumok epébe történő szekrécióját, ami magyarázza a vegyületek májkárosító hatását. Kimutatták, hogy enziminduktorok a transzporter-aktivitás növelésével antikolesztatikus hatásúak.

Kimutatták, hogy a humán máj S9 frakcióval történő metabolikus aktiválás során sokkal több mutagén metabolit képződik 2-aminoantracénből, mint patkány máj S9 esetében. Ez a tény felhívja a figyelmet arra, hogy a patkány máj S9 frakció hagyományos alkalmazása az Ames-tesztben jelentős mértékben alábecsüli a vegyület mutagén potenciálját. Kísérletesen igazolták, hogy a metabolikus aktiválás más enzimeken keresztül történik a két fajban, ezért a patkány máj S9 frakció használata ennél a vegyületnél félrevezető eredményekhez vezet. Ez az eredmény azt igazolja, hogy az Ames-tesztben a humán máj S9 frakció használata a megfelelő.

Kutatói kapacitás: 4 fő, ebből intézeti állományban: 4 fő. Teljes ráfordítás: 25 M Ft, ebből pályázati forrás: 1,3 M Ft.

Újonnan szintetizált szenzibilizátorok felhalmozódását és fotodinamikus hatását vizsgálták sejtenyészetben a daganatos betegségek terápiájában használható hatásos gyógyszerek

fejlesztése céljából. Tumoros és idegi eredetű sejteken kimutatták, hogy a Parkinson-kór terápiájában használatos magyar fejlesztésű R-(-)-deprenyl mechanizmusában szerepet játszhat a vegyület sejtletapadást befolyásoló hatása.

Paraméteres és nemparaméteres tesztek alkalmazásával sikerült megoldaniuk nagyon eltérő tulajdonságú (ortogonális) kromatografiás rendszerek kiválogatását. A módszer jelentősége a gyógyszeripari elválasztások kisebb munkaigényű, olcsóbb megoldásában rejlik. Különböző modellezési eljárásokat fejlesztettek ki, amelyekkel több száz (>500) gyógyszerjelölt vegyület közül sikerült a mellékhatásaik miatt további fejlesztésre alkalmatlanokat kiválogatni.

Kutatói kapacitás: 6 fő, ebből intézeti állományban: 4,2 fő. Teljes ráfordítás: 30 M Ft, ebből pályázati forrás: 6 M Ft.

Szénhidrátkémiai kutatások

Egy új reagenst dolgoztak ki tioglikozidok glikozilezési reakciókban történő aktiválására. E reagens alkalmazásával egy rendkívül erőteljes és hatékony glikozilezési módszert vezettek be, mellyel mind *cisz*, mind *transz* glikozidokat jó hozammal és sztereoszelektivitással állítottak elő. A kidolgozott módszert sikeresen alkalmazták heparin oligoszacharidok szintézisére is.

A glikózaminoglikánok oligoszacharid egységeinek előállítására kidolgozott szintézis stratégiájukat kiterjesztették magasabb tagszámú oligoszacharidok szintézisére. Ily módon ortogonálisan védett tetraszacharidokat szintetizáltak. Így pl. egy védett oligoszacharidból a heparin és a heparin-szulfát alkotórészét képező szulfatált célvegyületeket állítottak elő biológiai vizsgálatok céljára. Újabb azacukor-tartalmú glikozidáz inhibitorokat sikerült előállítaniuk.

Kutatói kapacitás: 5 fő, ebből intézeti állományban: 5 fő. Teljes ráfordítás: 30 M Ft, ebből pályázati forrás: 6 M Ft.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Az intézetnek igen széles körűek mind a hazai, mind a külföldi tudományos kapcsolatai. Az együttműködések közös hazai és EU-projektek, MTA, illetve TÉT-egyezmények keretében folynak, de jelentősek az egyezményen kívüli kapcsolatok is.

Hazai kapcsolatok

Számos kutatási téma kidolgozásában működnek együtt a hazai egyetemek megfelelő tanszékeivel. A munka eredményeit mutatja a 2005-ben megjelent 31 közös publikáció. Az oktatómunkában való tevékeny részvételüket igazolja, hogy az intézet kutatói közül hatan tartanak fő-, illetve speciális kollégiumot kilenc témakörben, öt kutató vezet hat témakörben gyakorlatokat több hazai felsőoktatási kutatóhelyen. Különösen szoros kapcsolatok fűzik az intézet kutatóit az ELTE és a Semmelweis Egyetem több tanszékehez. Ezek a kapcsolatok segítik az intézetet abban is, hogy biztosítsa a megfelelő színvonalú kutatói utánpótlást.

Az intézetben, 2005-ben 23-an dolgoztak PhD-értekezésük elkészítésén, és ketten sikerrel fejezték be PhD-disszertációjuk elkészítését. A fiatal kutatók számára rendszeresen tartanak szakmai előadásokat.

Különösen gyümölcsözőek a több közös publikációt eredményező tudományos együttműködések a következő hazai kutatóhelyekkel: Pécsi Tudományegyetem, Kémiai Tanszék; Szegedi Egyetem, Mikrobiológiai Tanszék; Semmelweis Egyetem, Orvosi-vegytani Tanszék, illetve Transzplantációs és Sebészeti Klinika, továbbá Neuromorfológiai Laboratórium, ELTE Általános Állattani Tanszék; MTA Neurobiológiai Kutatócsoport.

Több akadémiai intézettel is közös kutatási témákon dolgoznak. Így pl. az MTA Növényvédelmi Kutatóintézetével kooperációban kidolgozták a vadgesztenyét károsító aknázómoly egy új, kétkomponensű, szexattraktánsának előállítási eljárását.

Az intézetnek hagyományosan széles körű kutatási kapcsolatai vannak a hazai gyógyszeripari vállalatokkal, így az EGIS Gyógyszergyár Rt-vel, a Richter G. Rt-vel, a TEVA Gyógyszergyár Rt-vel és a Chinoin Rt-vel. Ezeknek a kapcsolatoknak részben közös GVOP-projektek, részben kétoldalú szerződések nyújtanak pénzügyi keretet. Mind új anyagok előállítása, mind azok azonosítása, valamint fiziológiai sajátásaik, metabolizmusuk, hatásmechanizmusuk kutatása témái az együttműködéseknek. Hatóanyagok és intermedierek előállításában a Cyclolab Kft-vel és az Ubichem Kft-vel működnek együtt.

Nemzetközi kapcsolatok

Magyar-török Tét-egyezmény keretében (együttműködő partner: University of Ankara) a „Várhatóan multidrog rezisztenciát gátló benzotiazolok” c. témában új, kondenzált gyűrűvázakat szintetizáltak. Az EU 5 keretprogram támogatásával az Antwerpen-i Egyetemmel kialakított hosszú távú együttműködésük közös eredménye egy új, palládium-katalizált kapcsolással egybekötött gyűrűzárási eljárás kidolgozása. A magyar-osztrák Tét-egység együttműködés (együttműködő partner: University of Vienna) „Enzimes átalakítások” c. témájának keretében enzimes reakciók alkalmazását kezdték el nitrogén-heterociklusok átalakítására.

MTA-NSF-OTKA egyezmény keretében, az Idaho State University-vel együttműködve, a növényolajok fontos alkotórészei, a zsírsav-észterek retenciós adatainak előrejelzését oldották meg, miközben továbbfejlesztették a nagy elméleti jelentőségű torzítás és variancia optimalizálásának módszerét. Az előrejelzésnek a vegyületek azonosításában van jelentősége.

Magyar-szlovén Tét-egyezmény keretében a Ljubljani Egyetem kutatóival együtt vizsgálják a koleszterin homeosztázis és a gyógyszermetabolizmus közötti kölcsönhatásokat transzkriptom és szterol-metalom szinten.

MTA-egyezmény keretében a Poznan University of Technology-val közös munkában a polimerek és töltőanyagok közötti kölcsönhatásokat osztályozták inverz gázkromatográfiás adatok főkomponens-elemzésével. Az eljárás lehetővé teszi a polimerek, fogászati tömőanyagok stb. csoportosítását, jellemzését.

A Silesian University, Katowice kutatóival közös konferenciát szerveztek és alkil-benzolok retenciós adatait határozták meg. Az eredményeket vegyületek azonosításánál, gázkromatográfiás oszlopok kiválasztásánál lehet felhasználni.

Különösen fontos tudományos kapcsolatokat építettek ki a Pharmaceutical Sciences, Copenhagen, Dánia és a Cardiff University, UK kutatóhelyekkel.

A közös publikációkat eredményező együttműködések külföldi partnerei közül a következők emelhetők ki: University of Edinburgh; University of Alaska, Fairbanks; University of Düsseldorf; Norwegian University, Trondheim; Oakland University, USA.

A következő külföldi vállalkozások részére végeznek mind tudományos, mind gazdasági szempontokból jelentős tevékenységet: Hawaii Biotech (USA), ALTANA Pharma AG (Konstanz, Németország); BASF AG (Németország) Sigma-Aldrich (Steinheim, Németország), Laboratorios Dr. Esteve SA (Spanyolország). Megemlítendő, hogy az intézetnek az Applied Biosystems Co. céghez fűződő jó kapcsolatai révén sikerült hozzájutnia egy modern LC/MSMS készülékhez.

Az intézet kutatói közül öten nemzetközi tudományos szervezetek (International Society of Heterocyclic Chemistry, International Society for the Study of Xenobiotics, European Medicine Agency, COST B16, COST D31 Committee) különböző bizottságainak tagjai. Hat kutató, nyolc különböző nemzetközi folyóirat szerkesztőbizottságának tagja (Pest Management Science; Heterocyclic Communications; ARKIVOC; Current Topics in Medicinal Chemistry; Drug Metabolism Reviews; European Journal of Pharmacokinetics, Drug Metabolisms; Acta Chromatographica; Biomacromolecular Mass Spectrometry).

Az intézet nemzetközi együttműködéseinek eredményességét igazolja a 2005-ben megjelent 25 közös publikáció.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

Az intézet hazai pályázatai közül kiemelkedő jelentősége van a 2005-ben elnyert MEDICHEM II (Hatóanyagtervezés népegészségügyileg kiemelten fontos megbetegedésekben szerepet játszó validált célmolekulák alapján) NKFP-pályázatnak, amelyben hét hazai kutatóhely működik együtt. A pályázat fontos lehetőséget biztosít ahhoz, hogy a kémiai, biokémiai és klinikai orvostudományi kutatásokat koordináltan műveljék. A program előrehaladásáról az évente megtartott MEDICHEM-Szimposium ad kitűnő tájékoztatást. Az interdiszciplináris kutatási potenciált összefogó konzorcium munkájának elsődleges célja, hogy hozzájáruljon a Magyarországon legfőbb halálókként szereplő szív- és érrendszeri, valamint daganatos megbetegedések, továbbá bizonyos idegrendszeri megbetegedések korai felismerését célzó, diagnosztikai eljárások kidolgozásához, diagnosztikai reagensek kifejlesztéséhez, valamint a betegségek kezelésére irányuló specifikus gyógyszerek előállításához és terápiás kipróbálásához.

Az intézet fontos kutatási programja a „Kémia az életminőség javításáért” c. Koordinációs Kutatóközpont pályázat keretében végzett tevékenység. Ez a program igen eredményesen segíti az intézet alkalmazott kutatási irányokban folytatott gyógyszerkutatásait, részvételét a gyógyszeripari partnerekkel közös hatóanyag-fejlesztésben.

A külföldi pályázatok közül a „Center of Excellence for Biomolecular Chemistry”- projekt nyújtott jó lehetőségeket nemzetközi részvételű tudományos rendezvények megszervezésére, konferenciákra történő kiutazásokhoz és tanulmányutak lebonyolításához. Különösen eredményesek voltak az együttműködések a következő kutatóhelyekkel: Institute for Neurophysiology, Charité-Universitätsmedizin, Berlin; Danish University of Pharmaceutical Sciences; Catholic University of Louvain-la-Neuve; University Hospital, Malmö; European Institute of Oncology, Milano; FOM Institute for Atomic and Molecular Physics, Amsterdam. A projekt keretében együttműködtek a Grazi Műszaki Egyetem Szerves Kémiai Tanszékével is. Az e pályázat keretében Budapesten tartott „Novel Pharmacophores with New Functions” konferencián az említett tanszék öt munkatársa vett részt és tartott előadást vagy szerepelt

társszerzőként előadásokban. A közös munka eredményeiről 2005-ben három közlemény jelent meg.

Az EU Joint Research Centre, Ispra, Italy intézettel közösen eljárásokat dolgoztak ki olívaolajok és kávéminták eredetének megállapítására. Közös kutatási programban (INCO-SWC-3 „Arenavirus: Biology, characterization and inhibition”) vesznek részt öt európai és öt dél-amerikai kutatóhellyel.

A „Steroltalk” c. EU-program keretében 11 partnerintézet közös munkájával egy olyan tesztrendszer dolgoznak ki, amely alkalmas a vér koleszterin-szintjét csökkentő gyógyszerek hatásának tanulmányozására és új gyógyszer-jelölt vegyületek kiválasztására. Emellett lehetőség nyílik az ismert xenobiotikumok, gyógyszerek okozta koleszterin-homeosztázis változások poszt-genomiális értékelésére.

V. Az év folyamán megjelent jelentősebb publikációk, szabadalmak és más bemutatható eredmények

1. Gróf Cs, Hegedűs G, Riedl Zs, Hajós Gy, Egyed O, Csámpai A, Kudar V, Stanovnik B: Selective synthesis and cycloaddition reactions of new azomethine imines containing a 1,2,4-triazine ring, *European Journal of Organic Chemistry*, (16), 3553-3561 (2005)
2. Vakulya B, Varga Sz, Csámpai A, Soós T: Highly enantioselective conjugate addition of nitromethane to chalcones using bifunctional cinchona organocatalysts, *Organic Letters*, 7(10), 1967-1969 (2005)
3. Moldvai I, Temesvári-Major E, Incze M, Dörnyei G, Szentirmay É, Szántay Cs: Synthetic route to ergot alkaloids, *Helvetica Chimica Acta*, 88(6), 1344-1356 (2005)
4. Fügedi P: Glycosylation methods, In: *The Organic Chemistry of Sugars*, (Eds Levy DE, Fügedi P), CRC Press, Boca Raton, 2005, pp 89-179
5. Maksay G, Bíró T: High affinity, heterogeneous displacement of [H-3]EBOB binding to cerebellar GABA(A) receptors by neurosteroids and GABA agonists, *Neuropharmacology*, 49(4), 431-438 (2005)
6. Kovács R, Kardos J, Heinemann U, Kann O: Mitochondrial calcium ion and membrane potential transients follow the pattern of epileptiform discharges in hippocampal slice cultures, *Journal of Neuroscience*, 25(17), 4260-4269 (2005)
7. Veres Zs, Török G, Tóth É, Vereczkey L, Jemnitz K: The spectrum of enzymes involved in activation of 2-aminoanthracene varies with the metabolic system applied, *Mutation Research-Genetic Toxicology and Environmental Mutagenesis*, 586(1), 18-27 (2005)

VI. A kutatóhely 2005. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: Kémiai Kutatóközpont, Biomolekuláris Kémiai Intézet

Átlagléttség ¹ :	88	Ebből kutató ² :	63
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			36
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma:			62
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ³ :			61
<i>Ebből</i> idegen nyelvű külföldi folyóiratban:	53	idegen nyelvű hazai folyóiratban:	-
nemzetközi együttműködés keretében:	25	SCI által regisztrált folyóiratban:	52
összesített impakt faktor:	134,341	összes hivatkozás száma ⁴ :	615
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			523
Megjelent könyv:	-	könyvfejezet:	2
<i>ebből</i> magyar nyelven könyv:	-	könyvfejezet:	-
		jegyzet:	-
		jegyzet:	-
Megvédett PhD értekezés:	2	Megvédett MTA doktori értekezés ⁵ :	-
Bejelentett találmányok száma:	-	Megadott szabadalmak száma:	-
<i>ebből</i> külföldön:	-	<i>ebből</i> külföldön:	-
Értékesített szabadalmak száma:			-
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma:	31	poszterek száma ⁶ :	26
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ⁷ :			14
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	5	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	8
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ⁸ :			326,4 MFt
Beruházási támogatás:	- MFt	Fiatal kutatói álláshelyek száma ⁹ :	5
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			9
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	12,9 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			1
NKFP:	-	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	- MFt
Egyéb:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	12,0 MFt
Az év folyamán művelt NFT témák száma ¹⁰ :			4
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	42,8 MFt
Külföldi vagy nemzetközi forrásból művelt témák száma ¹¹ :			4
EU forrásból:	3	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	43,8 MFt
Egyéb:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	- MFt
Egyéb pályázatok keretében művelt témák száma ¹² :			-
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	- MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			40
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	125,1 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány ¹³ :			0,43 MFt

Kémiai Kutatóközpont
FELÜLETKÉMIAI ÉS KATALÍZIS INTÉZET
1025 Budapest, Pusztaszeri út 59/67; 1525 Budapest, Pf. 17.
Telefon: 438-1111, Fax: 438-1143
e-mail: palg@chemres.hu, honlap: <http://www.chemres.hu>

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

A Felületkémiai és Katalízis Intézet fő feladata 2005-ben a következő volt: nemzetközi színvonalú tudományos kutatások folytatása a felületkémia és a heterogénkatalízis-kutatás területén, különös tekintettel a határfelületekre, az aszimmetrikus katalízisre, a nano-dimenziójú részecskékre és szerkezetekre.

Az intézet további feladatai voltak még a következők: részvétel az egyetemi oktatásban és a posztgraduális képzésben, szakmai tanácsadás, valamint gyakorlati célú kutatási-fejlesztési feladatok elvégzése.

II. Az év folyamán elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények, azok gazdasági-társadalmi haszna

Oxidáz és oxigenáz modellek hatásmechanizmusának vizsgálata

A biomimetikus katalízis kutatások során pirokatechin oxidáz és fenoxazinon szintetáz típusú funkcionális enzimmodelleket állítottak elő dioximáto-ligandumok felhasználásával. A kinetikai vizsgálatok szerint metanolban a 3,5-diterc-butil-pirokatechin (H₂dtbc) és a 2-amino-fenol (H₃ap) modell-szubsztrátum esetében a báziskatalizált oxidáció mellett, [Mn(Hdmdt)]⁺ komplex jelenlétében egy új oxidációs effektus és mechanizmus is működésbe lép. Ennek hatására a reakció felgyorsul a bázis-katalizált pirokatechin oxidációhoz képest, annak ellenére, hogy a [Mn(Hdmdt)]⁺ önmagában nem reagál dioxigénnel. Az effektus oka az, hogy a Hdtbc⁻ monoanionból O₂ megkötéssel keletkező hidroperoxid *közti termék* koordinálódik a [Mn(Hdmdt)]⁺ szabad kötőhelyén és ezáltal az oxidáció felgyorsul, ami egyszerű mechanizmussal értelmezhető.

Kutatói kapacitás: 2,5 fő, ebből intézeti állományban: 2,5 fő. Teljes ráfordítás: 10 M Ft.

Szén-nanocsövek kutatása

2005. év folyamán sikerült π - π kölcsönhatással arilhidroxámsavakkal módosított szén nanocsöveket előállítani. A funkciós csoport lényegesen megnövelte a különböző oldószerekben, a módosítatlan nanocsöveknél már korábban megállapított diszpergálhatóságot. A gumiarábikum, az alkoholhidroxámsavak, valamint a nátriumdodecilsulfát vizes oldata is rendelkezik felületmódosító hatással azáltal, hogy ezek a molekulák a csövek falán fizikai adszorpció útján megkötődnek. Sikerült különböző szerves csoportok nanocsöve történő kovalens kapcsolásával kémiailag funkcionalizálni többfalú nanocsövet úgy, hogy a diszpergálhatóság, a szénszálkötegek egyedi szállá bomlása és ezzel együtt kompozitokba való beépíthetősége nagymértékben javult. Szén nanocsövek kovalens módosítását alapvetően háromféle reakcióval valósították meg. A kidolgozott eljárás az EU6 IP PolyCond projekthez

kapcsolódik, társadalmi-gazdasági haszna pedig a megváltozott tulajdonságú (pl. megnövelt vezetőképességű) műanyagok előállításában fog megmutatkozni.

Kutatói kapacitás: 4 fő, ebből intézeti állományban: 4 fő. Teljes ráfordítás: 20 M Ft, ebből pályázati forrás: 10 M Ft.

Megállapították a polikarbonátba ágyazott többfalú nanocső erősítő hatását a kompozitban. Kimutatták, hogy a kompozit mechanikai tulajdonságai (keménység és rugalmassági modulus) a kompozitba ágyazott nanocső koncentrációjának hozzávetőleg kétszeresével javulnak (pl. 15% MWCNT hozzávetőleg 30%-kal emeli a keménységet és rugalmassági moduluszt).

Vizes közegű szol-gél eljárást alkalmazva TiO_2 nanorészecskékkel borított szén nanocsöveket állítottak elő, amelyek stabil vizes szuszpenziót képeztek. Az elválasztott portermék jellemzése során igazolták, hogy a TiO_2 nanorészecskék homogén eloszlásban borítják a nanocsövek felületét. Kimutatták, hogy az előállított kompozit anatóz típusú kristályos TiO_2 -ot tartalmaz, valamint, hogy a krisztallitméret növekszik a portermék kezelési hőmérsékletének (100-300 °C között) emelésével.

Gráfelméleti módszert alkalmazva megszámlálták a Kekulé-határszerkezeteket derékszögű grafitrácsokban és vizsgálták, hogyan változik a grafitrácsok aromás jellege funkcionálizálás hatására. A funkcionálizálást hiányos grafitmintázatokkal modellezték. A megszámlálást az erre a célra kifejlesztett algoritmussal végezték. E számításokat a szokásos kvantumkémiai módszerekkel nem lehetett volna elvégezni a vizsgált rendszerek nagy méretei miatt. Kimutatták, hogy a funkcionálizálás nem befolyásolja lényegesen a csövek reakciókészségét. Az eredmény lehetővé teszi a funkcionálizált nanocsövek tulajdonságainak elméleti előrejelzését.

Kutatói kapacitás: 5 fő, ebből intézeti állományban: 5 fő. Teljes ráfordítás: 35 M Ft, ebből pályázati forrás: 8,5 M Ft.

Korróziógátló nanorétegek kutatása

Új módszert dolgoztak ki a foszfonátos kezelés festékalapozóként történő alkalmazására. Kimutatták a különböző difoszfonát vegyületek inhibitor adalékanyagként történő alkalmazhatóságát vizes bázisú bevonatokban, melyek alkalmasak lehetnek toxikus antikorrozív pigmentek kiváltására. A foszfonátok igen fontos korróziógátló adalékanyagok. A kutatást a Festékipari Kutatóintézzettel együttműködésben végezték, az eredményeket az FKI hasznosítja.

Új, nagy hatékonyságú korróziós inhibitorkeveréket fejlesztettek ki – a Petroleum Research Center (Tripoli, Líbia) megbízásából - nagy kloridion koncentrációjú hűtővizekben történő alkalmazásra. A kutatásnak nagy jelentősége van a nagy nátriumklorid-tartalmú líbiai hűtővizek kezelése szempontjából.

Megállapították, hogy a vas passzíválása során alkalmazott potenciál, hatással van a foszfonátréteg képződésére, minél nagyobb az alkalmazott potenciál, annál jobb védőképességű foszfonátréteg alakul ki. A passzív oxidréteg morfológiáját AFM-mel vizsgálták. Kimutatták, hogy a felület morfológiája függ a passzíválás során alkalmazott potenciáltól, a foszfonátos felületkezelés az oxidréteg szerkezetének jelentős stabilizálását eredményezi. A kutatásnak a passzív védőrétegek kialakításában van rendkívül fontos szerepe.

Kutatói kapacitás: 3 fő, ebből intézeti állományban: 3 fő. Teljes ráfordítás: 13 M Ft, ebből pályázati forrás: 1,4 M Ft.

Nanoszerkezetű anyagok előállítása és vizsgálata

Szol-gél technológiát alkalmazva Ba-hexaferrit kompozitokat állítottak elő szervesetlen prekursorokból kiindulva. Megállapították, hogy w-típusú, nanoszerkezetű Ba-hexaferrit előállításánál sztöchiometriai összetételből kiindulva magnetit és kristályos m-hexaferrit keverék keletkezik. A reakciótermék kalcinálása során a hőmérséklet növelése 900-1100°C fok között a krisztallit méretnövekedését eredményezte.

Megvalósították az $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{TiO}_2$ pigment kompozit gyártásához korábban kidolgozott laboratóriumi eljárás méretnövelését. Tízszeres méretnövelést alkalmazva a laborkísérletekben kapott termék minőségével azonos anyagot állítottak elő nagylaboratóriumi körülmények között. További, 100-szoros méretnöveléssel félüzemi körülmények között a technológiai paraméterek (tartózkodási idő és keverési paraméterek) jelentős változtatására kényszerültek. Meghatározták a reakció előrehaladásának követésére alkalmas analitikai vizsgálatokat.

Megállapították, hogy hosszú apoláris láncú hidroxám- és foszfon-savakból felépített Langmuir-Blodgett filmek alkalmazásával az apoláris oldallánc és a rétegszám növelésével a korróziós folyamatok nagymértékben csökkenthetők és jelentősen visszaszorítható a korróziót okozó mikroorganizmusok megtapadása. A módszer széles körben alkalmazható a mikroelektronikától kiindulva a lényegesen nagyobb felületek védelmére is.

Vizsgálták különböző hosszúságú alkil-foszfonátok rétegeképítő tulajdonságait csillám felületén vizes és etanos oldatból. A folyamatot atomierő-mikroszkóppal követték. Kimutatták, hogy csillám felületén az alkil-foszfonát molekulák szigeteket alkotnak, melyek a kezelési idő előrehaladtával összenőnek, és beborítják a felület jelentős részét. A szigetek szerkezete az alkil-láncok hosszától függ. Az önszerveződést nemcsak szerves oldószerekkel készített oldatból figyelték meg, hanem vizes oldatból is. Kimutatták, hogy az ioncserélt csillám felületén a foszfonát-molekulák négyzetesen rendeződnek.

Négyzet és háromszög alakú szupramolekulák önszerveződését tanulmányozták grafit felületén AFM- és STM-módszerrel. Kimutatták, hogy a háromszög alakú molekuláknál az erős kontrasztos pontok a fenantrén csoportok (a háromszögek csúcsainak) találkozásai, a „bipiridil” csoportok (a háromszög oldalai) pedig gyengébb kontrasztot adnak. Feltételezésük szerint a sötét területek a molekulák közötti tereknek felelnek meg.

Kutatói kapacitás: 10 fő, ebből intézeti állományban: 9 fő. Teljes ráfordítás: 60 M Ft, ebből pályázati forrás: 29,4 M Ft.

Heterogénkatalitikus kutatások

A 2005. évben további vizsgálatokat végeztek a szénmonoxid alacsony hőmérsékletű oxidációjában mind hidrogén jelenlétében (PROX-reakció), mind hidrogén jelenléte nélkül. A PROX reakcióra hét komponensből álló katalizátorkönyvtárat terveztek. Az első három katalizátorgenerációban jelentősen növelték a katalizátor aktivitását és szelektivitását. Kimutatták, hogy az Au/MgO-katalizátorok redox jellegű fénoxidokkal való módosítása során a katalitikus aktivitás tovább növelhető a katalizátor-előkezelés hőmérsékletének és atmoszférájának megfelelő kiválasztásával. Az előkezelés során végbemenő változásokat *in situ* XPS-mérésekkel követték.

Folytatták a piroszőlősav-etilészter heterogénkatalitikus aszimmetrikus hidrogénezésének tanulmányozását. Vizsgálták a kinolin és hasonló poliaromás molekulák hatását a reakció kinetikájára. Az eredmények alapján megkérdőjelezhető az a mások által korábban feltételezett reakciómechanizmus, amely szerint a cinkona alkaloidok kinolin gyűrűje

meghatározó szerepet tölt be az alkaloidnak a Pt-felületén történő stabilizálásában. Kimutatták továbbá az izocinkoninek anomális viselkedését aprotikus oldószerekben. Ezen eredmények további bizonyítékkal szolgálnak a korábban javasolt "shielding effect" reakciómechanizmusra. Nemzetközi együttműködés keretében XPS-vizsgálatokat végeztek a metán alacsony hőmérsékletű oxidációjában, kombinatorikus úton tervezett, többkomponensű Au-Pt-Pd/CeO₂ katalizátorokon. Kimutatták, hogy a kis mennyiségű arany promotorhatása egyrészt a Pd^{δ+}/Pd^o arány megváltoztatásával, másrészt a részlegesen redukált Ceⁿ⁺ specieszek felületi koncentrációjának növelésével értelmezhető.

Kutatói kapacitás: 9 fő, ebből intézeti állományban: 9 fő. Teljes ráfordítás: 65 M Ft, ebből pályázati forrás: 5 M Ft.

Mikro és mezopórusos anyagok kutatása

Az egyenes szénláncú C₆-C₁₆ alkánok hidrokonzverziójában nagy izomerizációs szelektivitású, bifunkciós Ni/Béta és Ni/MCM-22 zeolit katalizátort állítottak elő. A tágpórusú beta zeolitot alumíniumtartalmú rétegszilikátból (magadiitból) szilárd fázisú átkristályosítással bórax jelenlétében szintetizálták. Az MCM-22 zeolitot hidrotermális eljárással készítették. A Ni/Beta-zeoliton egyszeres és többszörös elágazású izomerek egyaránt képződtek. A Ni/MCM-22-zeoliton alakszelektivitás érvényesült; elsősorban egyszeresen elágazott izomerek képződtek, mivel az MCM-22 mikropórusaiban a geminális és vicinális izomerek kialakulása térben gátolt. A katalizátorokkal a kutatás-fejlesztésben együttműködő partner, a SZIKKTI Kft., a Mol Rt. paraffinmentesítő GOKIII üzem katalizátortöltetének cseréjére kiírt versenytárgyalásán kíván indulni 2007-ben.

Kutatói kapacitás: 4 fő, ebből intézeti állományban: 3 fő. Teljes ráfordítás: 18 M Ft, ebből pályázati forrás: 2 M Ft.

Felületek kutatása spektroszkópiai módszerekkel

Korróziógátló hatású, önszerveződő és Langmuir-Blodgett monorétegek szerkezetét határozták meg összegfrekvencia-keltési spektroszkópia és röntgenfotoelektron-spektroszkópia segítségével.

Aminosavak adszorpcióját oxidos Ti és kvarcüveg felületen tanulmányozták. Megállapították, hogy a savas oldalláncot tartalmazó aminosavak irreverzibilisen adszorbeálódnak TiO₂-felületre, míg a semleges oldalláncúak vizes öblítéssel eltávolíthatóak. Kimutatták, hogy üveg-hordozót alkalmazva még a savas oldallánccal rendelkező aminosavak esetében sincs számottevő adszorpció. A megfigyelt eltérés feltehetően kapcsolatba hozható a TiO₂ biokompatibilis viselkedésével.

Biológiai szempontból jelentős, vízdoldható poli(etilén-oxid)-poli(propilén-oxid)-poli(etilén-oxid) (PEO-PPO-PEO) blokkos kopolimerek víz/levegő határfelületi viselkedését tanulmányozták. A vizes oldat tömbi fázisából a felületre adszorbeált és a vízfelületre illékony szerves oldószeres oldatból terített rétegek szerkezetét hasonlították össze felületi-oldalnyomás izotermák mérésével és összegfrekvencia-keltési spektroszkópiával.

Többfalú szén nanocsövek kémiai módszerekkel végzett felületmódosításának eredményességét vizsgálták a nanocső minták összetételének és kötésviszonyainak röntgen fotoelektron-spektroszkópiával történő elemzésével.

Kutatói kapacitás: 4 fő, ebből intézeti állományban: 4 fő. Teljes ráfordítás: 32 M Ft.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Az intézet széles körű kapcsolatokat alakított ki mind hazai, mind külföldi egyetemekkel, kutatóhelyekkel, gazdálkodó szervezetekkel.

Hazai kapcsolatok

A hazai egyetemek kutatói az intézetnek fontos együttműködő partnerei. Néhány együttműködő partner és téma a következő: Eötvös Loránd Tudományegyetem, Kolloidkémiai Tanszék: Tenzidelegyek és polimer-tenzid elegyek határfelületi szerkezetének vizsgálata; PEO-PPO-PEO blokkos kopolimerek víz/levegő határfelületi viselkedésének tanulmányozása; ELTE, Nukleáris Módszerek és Szerkezeti Kémiai MTA Kutatócsoport: Hordozós Sn-Pt katalizátorok Mössbauer-spektroszkópiai vizsgálata; Veszprémi Egyetem: Szilárd NMR-vizsgálatok; Szegedi Egyetem, Szerves Kémiai Tanszék: Heck-reakció vizsgálata ionos palládiumot tartalmazó hordozós katalizátorokon.

Az együttműködések hatékonyságát, illetve az eredményességet jellemzi, hogy 2005-ben 30 közös publikációt jelentettek meg. Az intézet tevékeny részt vállal az egyetemi oktatómunkában. A kutatók közül négyen tartanak kilenc témakörben rendszeresen egyetemi előadásokat, öten vezetnek hat témakörben gyakorlatokat. A Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetemen, az Eötvös Loránd Tudományegyetemen és a Veszprémi Egyetemen végeznek jelentős oktatási feladatokat az anyagtudomány elmélete és mérési módszertana, az elektrokémia, valamint a katalízis témaköreiben.

Az intézetben 2005. év folyamán 16 fiatal kutató dolgozott PhD disszertációján. 2005-ben egy fiatal kutató védte meg PhD-munkáját.

Nemzetközi kapcsolatok

Az intézetnek igen széles körűek a nemzetközi tudományos kapcsolatai. Ezek erősségét mutatja, hogy 2005-ben 22 közös tudományos publikációban és számos előadásban számoltak be az együttműködés eredményeiről.

A „Nanokristályos ónoxid előállítás, jellemzése és elektrokémiai redox, illetve pH-érzékeny szenzorként történő alkalmazása” c. témában magyar-román Tét-egyezmény keretében több közös előadást tartottak.

A „Mikrobiálisan befolyásolt korrózió különböző fémekben – inhibíció és gazdasági vonatkozásai” c. magyar-portugál Tét-egyezményes téma keretében közös előadást tartottak a University of Lisboa, Faculty of Sciences kutatóival.

„A réz új korróziós inhibitorai – csökkenthető-e a környezeti kockázat?” c. magyar-horvát Tét-együttműködés keretében (együttműködő partner: University of Zagreb, Faculty of Chemical Engineering and Technology) közös konferencia-előadásban számoltak be eredményeikről.

„A nanocsövek kémiai sajátságainak modellezése” és a „Csökkentett környezeti hatású, nanokristályos, vékony ónoxid bevonatok jellemzése” c. témákban az MTA-Horvát és MTA-Román Akadémia közötti egyezmények keretében több közös publikáció és közös előadás született a National Institute of Chemistry, Ljubljana, Szlovénia, az Institute Rudjer Bošković, Zágráb, Horvátország és a University of Cluj-Napoca, Románia intézmények kutatóival.

A „Természetes polimerek és mesterséges analógjaik viselkedése fémeken és fémszulfidokon” c. MÖB-DAAD együttműködési téma (együttműködő partner: University of Hamburg, Németország) eredményeiről közös előadásban számoltak be.

A „Szén nanocsövek dinamikus sajátosságai” c. témában (együttműködő partner: School of Chemistry, University of Edinburgh, UK), ami az ESEP/JP Joint Project Grant of The Royal Society és az MTA közötti egyezmény keretében folyt, több tanulmányút valósult meg. Az együttműködés eredményeiből 2005-ben négy közlemény és kilenc konferencia-előadás született.

Az „Új zeolit és zeolit-szerű anyagok előállítás és szilárd-fázisú módosítása” c. témában (együttműködő partner: Institute of Organic Chemistry, Bulgarian Academy of Sciences, Szófia, Bulgária), ami a Bolgár Tudományos Akadémia és az MTA közötti egyezmény keretébe tartozik, InO^+ /MCM-22 és Cs/MCM-22 zeolitikatalizátorokat készítettek, és aktivitásukat a toluol diszproporcionálódási reakciójában vizsgálták. Az eredményeket egy közleményben, illetve nemzetközi konferencián mutatták be.

Az „Olajfinomítói szennyvíz fotokatalitikus bontása” c. témában (MTA-Egyiptomi TA közötti egyezmény) az Egyptian Petroleum Research Institute, Nasr City, Kairó kutatóival közösen számoltak be az elért eredményekről a SOLAR '05, Luxor, Egyiptom, fotokémiai és nanotechnológiai konferencián.

Magyar-görög Tét-egyezmény keretében (együttműködő partner: Institute of Chemical Engineering and High Temperature Chemical Processes, Patra) a „Membránreaktorokban alkalmazható, módosított zeolitmembránok előállítása és jellemzése” c. témában elért eredményekről közös előadásban számoltak be a „Symposium on High Temperature PEM Fuel Cells” c. szimpóziumon.

Az "Új heterogén katalizátorok kifejlesztése finomkémiai reakciókhoz" c. témában (együttműködő partner: CINDECA, La Plata), argentin-magyar Tét-egyezmény keretében acetofenont hidrogéneztek királis ónvegyülettel módosított Pt/SiO₂ katalizátoron. Az ónvegyület felvitele a redukált Pt/SiO₂ katalizátorra irányított felületi reakcióban történt. Nagy áteresztőképességű reaktorrendszerben vizsgálták a reakcióparaméterek (hőmérséklet, nyomás, koncentráció, katalizátormennyiség) hatását a reakció sebességére és a kemoszelektivitásra mind Pt/SiO₂, mind ónnal módosított katalizátorokon.

A „Hordozós aranykatalizátorok előállítása és vizsgálata oxidációs reakciókban” c. témában (együttműködő partner: Instituto de Catálisis y Petroleoquímica, Madrid, Spanyolország) MTA-CSIC egyezmény keretében elvégzett XPS-vizsgálatok lehetőséget adtak az intézetben előállított Au-Pt-Pd/CeO₂, Au/SnO_x-SiO₂, Au/SnO_x-Al₂O₃ és Au/MgO Au/VO_x-MgO, továbbá Sn-Pt-Re/Al₂O₃ katalizátorok szerkezetének felderítésére.

Néhány további jelentős külföldi tudományos kutatási partner és téma:

University of Concepción, Department of Chemistry, Chile: „Aszimmetrikus hidrogénezési reakciók tanulmányozása” és "Kombinatorikus módszerek alkalmazása katalitikus reakciók vizsgálatára";

Instituto de Investigaciones en Catálisis y Petroquímica (INCAPE), Santa Fe, Argentína: "Nanostrukturált kétfémes hordozós katalizátorok előállítása és vizsgálata";

Lille University of Sciences and Technologies, Laboratory of Catalysis, valamint ECOLE Nationale Supérieure de Chimie de Lille, Franciaország: "Többkomponensű katalizátorok előállítása szénhidrogén reakciókhoz".

Néhány fontosabb külföldi ipari együttműködő partner és téma

A JOSAB International AB, Helsingborg (Svédország) céggel egy új technológiát dolgoztak ki ivóvíz előállítására fluoridionokkal szennyezett nyers vízből, töltött adszorbens oszlop alkalmazásával. A Petroleum Oil Research Center (Tripoli, Líbia) és az intézet közötti szerződés eredményeként új korróziós inhibitorösszetételt dolgoztak ki nagy kloridion-koncentrációjú hűtővizekhez. Együttműködnek a biofilmek monitorizálása modern módszereinek kidolgozásában és a biocidok hatékonyságának optimalizálásában is. A közös kutatások kiterjednek a kombinatorikus módszerek alkalmazása katalizátorok tervezésére és a szénhidrogén frakciók oxidatív kénmentesítése témákra is.

A University of Sao Paulo, Brazília kutatóival: „Potenciálisan korróziógátló hatású szilán bevonatok vizsgálata” c. témában dolgoznak együtt.

Az intézet hat kutatója hét különböző nemzetközi tudományos szervezet vezető tisztségviselője, illetve fontos bizottságának tagja. Így pl. a következőknek: International Society of Electrochemistry, European Corrosion Union, Electrochemical Society (USA), International Geothermal Association, European Federation of Catalysis Societies, International Academy of Mathematical Chemistry, COST D21 Committee). Négyen tíz nemzetközi folyóirat szerkesztőbizottságának tagjai (Reaction Kinetics and Catalysis Letters; Corrosion Reviews; Corrosion Engineering, Science and Technology; Materials and Corrosion; Journal of Electrochemical Society; International Journal of Electrochemical Science; NANO; Croatica Chemica Acta; Indian Science Press; Applied Catalysis A).

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

Az intézet igen aktív és eredményes munkát végez mind a hazai, mind a nemzetközi (elsősorban EU) pályázatokkal kapcsolatban. A jelentős számú elfogadott pályázat nemcsak a kutatások anyagi háttérét erősíti, de jelentősen hozzájárul ahhoz, hogy az intézet betagozódhasson az európai kutatási térségbe, erősödő nemzetközi kapcsolatokat építsen ki, továbbá, hogy a kutatások eredményei közel kerülhessenek az ipari megvalósításhoz.

Igen jelentős a Koordinációs Kutatóközpont GVOP-pályázat, amelynek keretében az intézet több hazai kis és közepes vállalattal dolgozik közös K+F-témákon. A pályázat biztosítja a szervezett, koordinált információcsere lehetőségét a résztvevők számára anyagtudományi, nanotechnológiai és korróziós kutatásokban is.

Az intézet felületkutatással foglalkozó csoportjainak tematikája a legkorszerűbb irányzatokhoz kapcsolódik. Az intézet által koordinált „A különleges tulajdonságú, nanoszerkezetű bevonatok fejlesztése környezetbarát felületmódosítási eljárásokkal” c. projekt (NANOTECH) keretében fémfelületeken olyan komplex, nanostrukturált bevonatrendszereket dolgoztak ki, amelyek ellenállóak a legkülönbözőbb külső hatásokkal (mechanikai, tribológiai, korróziós) szemben. Új, korszerű felületmódosító eljárásokat vezettek be, a jelenleg használatos felületkezelési technológiákat új, környezetbarát eljárásokkal fejlesztették tovább. Nanoszerkezetű, speciális tulajdonságú, többretegű bevonatrendszereket alakítottak ki szol-gél technikával, a molekulák önszerveződése alapján, nem-egyensúlyi elektrokémiai eljárásokkal, CVD-, PVD-módszerekkel. Lézeres felületmódosítással újabb, ipari hasznosításra alkalmas, önszerveződő molekulákat tartalmazó, korrózióvédő alapanyagokat fejlesztettek ki.

Az intézet kutatásaiban jelentős szerepük van az NKFP, illetve a GVOP-programoknak. Ezeket széles körű együttműködésekben végzik. A K+F-munka mind katalitikus technológiák vizsgálatára, mind funkcionális nanoszerkezetek, illetve nanokompozit-anyagok kutatására kiterjed.

A „Hungarian Network of Excellent Centers on Nanosciences” projekt keretében lehetőség nyílt egy virtuális Magyar Nanotudományi Központ kiépítésére, továbbá arra, hogy ösztönözzék a hazai K+F-helyeket az európai együttműködésekben való aktív részvételre, előmozdítsák a kutatók-fejlesztők információcseréjét és a fiatal kutatók szakmai továbbképzését.

Fontos hazai vállalati, egyetemi és kutatóintézeti együttműködő partnereikkel közös GVOP-feladatok megoldásában vesznek részt. Így pl. a SzIKKTI Szilikát és Kerámia Anyagkutató és Fejlesztő Kft-vel, valamint a Kalória Hőtechnikai Kft-vel új, szelektív alkán-hidroizomerizációs katalizátorokat fejlesztettek ki a katalitikus technológiák környezet-terhelésének csökkentése céljából. A Multiprojekt Fejlesztő, Vállalkozó, Kivitelező Kft., Budaörs és a Jelen és Jövő Kft., Szeged szervezetekkel új eljárást hoztak létre flokkulálószerként alkalmazható vas(III)-klorid oldat gyártására.

„Az új nanoszerkezetű funkcionális anyagok fejlesztése” c. COST-projektben az intézet (a „Nanoszerkezetű bevonatok AFM szerkezetvizsgálata, illetve mikrokeménység mérése” témakörben) két PhD-hallgatót fogadott Angliából és Romániából.

A „Javított minőségű nyomópapírok felületének jellemzése” c. COST-téma keretében lehetővé vált egy szakmai tanulmányút lebonyolítása, s ennek révén a pásztázó elektronmikroszkópos vizsgálatokhoz szükséges különleges mintaelőkészítési módszer elsajátítása.

A COST NANOSTAG c. téma keretében megszervezték a jelentős sikerrel zárult, nemzetközi részvételű Nanokonferenciát.

V. Az év folyamán megjelent jelentősebb publikációk, szabadalmak és más bemutatható eredmények

1. Csanády Á, Sajó I, Lábár JL, Szalay A, Papp K, Balaton G, Kálmán E: Nanocomposite bulk of mechanically milled Al-Pb samples consolidated pore-free by the HERF technique, *Journal of Nanoscience and Nanotechnology*, 5(6), 869-874 (2005)
2. Tompos A, Margitfalvi JL, Tfirst E, Végyvári L, Jaloull MA, Khalfalla HA, Elgarni MM: Development of catalyst libraries for total oxidation of methane. A case study for combined application of "holographic research strategy and artificial neural networks" in catalyst library design, *Applied Catalysis A-General*, 285(1-2), 65-78 (2005)
3. Gutierrez L, Ulla MA, Lombardo EA, Kovács A, Lónyi F, Valyon J: Study of the deactivation of Co- and Pt, Co-mordenite during the SCR of NO_x with CH₄, *Applied Catalysis A-General*, 292, 154-161 (2005)
4. Varga I, Keszthelyi T, Mészáros R, Hakkell O, Gilányi T: Observation of a liquid-gas phase transition in monolayers of alkyltrimethylammonium alkyl sulfates adsorbed at the air/water interface, *Journal of Physical Chemistry B*, 109(2), 872-878 (2005)
5. Szegedi Á, Hegedűs M, Margitfalvi JL, Kiricsi I: Low temperature CO oxidation over iron-containing MCM-41 catalysts, *Chemical Communications*, (11), 1441-1443 (2005)
6. Simándi TM, May Z, Szigyártó ICs, Simándi LI: Hydrogen atom vs electron transfer in catecholase-mimetic oxidations by superoxometal complexes. Deuterium kinetic isotope effects, *Dalton Transactions*, (2), 365-368 (2005)

VI. A kutatóhely 2005. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: Kémiai Kutatóközpont Felületkémiai és Katalízis Intézet

Átlagléttség ¹ :	57	Ebből kutató ² :	39
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			18
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma:			62
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ³ :			61
<i>Ebből</i> idegen nyelvű külföldi folyóiratban:	39	idegen nyelvű hazai folyóiratban:	-
nemzetközi együttműködés keretében:	22	SCI által regisztrált folyóiratban:	38
összesített impakt faktor:	58,760	összes hivatkozás száma ⁴ :	512
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			440
Megjelent könyv:	-	könyvfejezet:	4
<i>ebből</i> magyar nyelven könyv:	-	könyvfejezet:	-
		jegyzet:	-
		jegyzet:	-
Megvédett PhD értekezés:	1	Megvédett MTA doktori értekezés ⁵ :	-
Bejelentett találmányok száma:	2	Megadott szabadalmak száma:	1
<i>ebből</i> külföldön:	-	<i>ebből</i> külföldön:	-
Értékesített szabadalmak száma:			-
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma:	35	poszterek száma ⁶ :	29
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ⁷ :			6
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	7	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	10
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ⁸ :		275,0 MFt	
Beruházási támogatás:	- MFt	Fiatal kutatói álláshelyek száma ⁹ :	5
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			11
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	18,0 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			6
NKFP:	2	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	11,4 MFt
Egyéb:	4	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	41,8 MFt
Az év folyamán művelt NFT témák száma ¹⁰ :			5
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	58,7 MFt
Külföldi vagy nemzetközi forrásból művelt témák száma ¹¹ :			7
EU forrásból:	6	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	97,8 MFt
Egyéb:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	- MFt
Egyéb pályázatok keretében művelt témák száma ¹² :			1
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0,78 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			11
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	52,03 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány ¹³ :			0,94 MFt

Kémiai Kutatóközpont
SZERKEZETI KÉMIAI INTÉZET

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

Telefon: 438-1120 Fax: 438-1100/276 m

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

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

A Szerkezeti Kémiai intézet fő feladata 2005-ben a következő volt: nemzetközi színvonalú tudományos kutatások végzése a molekulák és a szupramolekuláris szerkezetek sajátosságainak különböző spektroszkópiai és diffrakciós mérési módszerekkel, továbbá elméleti kémiai vizsgálatokkal történő feltárására.

Az intézet további feladatai voltak még a következők: részvétel az egyetemi oktatásban és a posztgraduális képzésben, szakmai tanácsadás, valamint gyakorlati célú kutatási-fejlesztési feladatok elvégzése.

II. Az év folyamán elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények, azok gazdasági-társadalmi haszna

Molekulaspektroszkópiai kutatások

2005. év folyamán folytatták egy FTIR-spektroszkópiai diagnosztikai módszer kidolgozását az emberi szervezet általános fiziológiai állapotának értékelésére. A kiválasztott személyeket betegségspecifikusan vizsgálták csoportonként orvosi ellenőrzés mellett. Megállapították, hogy a gyógyulási folyamatok sikeresen követhetők a viszonylag egyszerű és olcsó infravörös spektroszkópiai vizsgálatokkal.

Rezgési spektroszkópiai (FT-IR és FT-Raman) mérésekből és kvantumkémiai számításokból származó erőterekkel végzett rezgési analízis, valamint spektrumszimulációk alapján részletesen értelmezték közepes méretű szerves molekulák (izokromanon- és kumarin-származékok) spektrumait. Tisztázták a skálázott kvantummechanikai (SQM) erőtermészet alkalmazhatóságát egyes elektromosan töltött molekulák rezgési spektrumainak szimulálásában.

Kutatói kapacitás: 6 fő, ebből intézeti állományban: 5 fő. Teljes ráfordítás: 35 M Ft.

NMR-spektroszkópiai kutatások

Zeolitok, mezopórusos anyagok és Sn/SiO₂ katalizátorok szilárdtest NMR-spektrumainak segítségével új, általuk kidolgozott számítási módszer alapján következtetéseket vontak le a zeolitok dezaluminálódásának mechanizmusára és a szilanol hibahelyek eredetére vonatkozóan.

Az ón(IV)-, illetve a platina-tartalmú, szupramolekuláris szerveződést mutató fémkomplexek oldatdinamikája NMR-rel történő tanulmányozásának során, mérési módszereket dolgoztak ki a -100 °C-tól +100 °C-ig terjedő hőmérséklettartományban heteromagok (³¹P, ¹¹⁹Sn) egy- és többdimenziós NMR-technikákkal történő mérésére (¹H-¹¹⁹Sn-HMQC, ¹H-³¹P-HMQC, ¹H-DOSY). A mérésekből értékes termodinamikai paraméterek, sebességi állandók,

izomerizációs energiatagok számíthatók. E kutatások a reakciókinetikában, a katalizátor- és a felületi kémiai kutatásokban jelentenek előrelépést.

Kutatói kapacitás: 3 fő, ebből intézeti állományban: 3 fő. Teljes ráfordítás: 20 M Ft.

ESR-spektroszkópiai kutatások

Biológiai folyamatokban fontos szerepet játszó szabad gyökök kimutatására dolgoztak ki új módszert a spincsapda-eljárás és a ciklodextrénes kapszulázás kombinálásával. A spin csapda vektorizálásával a szabad gyököknek a képződési helyen való detektálására javasoltak új módszert. Kimutatták különböző rézkomplexek SOD (szuperoxid dizmutáz) aktivitását.

Kutatói kapacitás: 3 fő, ebből intézeti állományban: 3 fő. Teljes ráfordítás: 20 M Ft.

Lézerspektroszkópiai és fotokémiai kutatások

Lézer-Raman spektroszkópiai vizsgálatokat végeztek többfalú és egyfalú szén nanocső mintákon. Az eredmények alapján minősíteni tudták a nanocsőminták amorf szén és grafit tartalmát. A vizsgálatok angol-magyar Tét-együttműködés keretében folytak. A kutatások előkészítik a hazánkban eddig még nem használt lézeres szén nanocső szintézismódszerek alkalmazását.

“A hatóanyag-tervezés népegészségügyileg kiemelten fontos megbetegedésekben szerepet játszó validált célmolekulák alapján“ című NKFP-projekt résztvevőjeként fluoridionok érzékelésére alkalmas új jelzőanyagot fejlesztettek ki, új naftálimid származékokat állítottak elő és feltárták ezek fény hatására végbemenő folyamatait.

Az Országos Gyógyintézeti Központ Fül-Orr-Gégeosztályán folytatódtak az 5-amino-levulénsav alapú fotodinamiás terápia bevezetésének klinikai próbái, melyhez az intézet munkatársai fejlesztették ki a szükséges instrumentális háttérrel (fényforrás, száloptikai eszközök és fényintenzitás-mérő eszközök).

Meghatározták szubsztituált profirinek és ftalocianinok fotofizikai paramétereit, a fotodinamikus terápiában történő használhatóság megítélésére érdekében.

Kutatói kapacitás: 7 fő, ebből intézeti állományban: 7 fő. Teljes ráfordítás: 30 M Ft, ebből pályázati forrás: 3,45 M Ft.

Reakciókinetikai kutatások

Az acetone az egyik legfontosabb szerves anyag a légkörben, amelynek foto-oxidációs lebomlása döntően meghatározza a troposzféra egészségének kímáját, így az ózonkoncentrációt is. A troposzféra-kémia egyik erősen vitatott kérdésének, az acetone légköri szerepének tisztázására irányuló vizsgálataik eredményeként kidolgoztak egy exciplex-lézer fotolízist alkalmazó eljárást, amellyel meghatározták az acetone fotobomlási kvantumhatásfokának hőmérséklet- és nyomásfüggését szintetikus levegőben. Megállapították, hogy a kvantumhatásfok jelentős mértékben csökken a hőmérséklet csökkenésével. Ez a felismerés ellentmondásban van a korábbi irodalmi közlésekkel és az IUPAC ajánlásával, kiválóan egyezik azonban a legújabb, teljesen más módszerrel végzett vizsgálatok eredményeivel. Az acetone légköri fotokémijára vonatkozóan cáfolták továbbá azt az irodalmi megállapítást, mely szerint a vízgőz jelenléte nagymértékben lecsökkenti az acetone kvantumhatásfokát.

Az előző évben publikált termodinamikai egyenleteiket sikerrel alkalmazták a hidrogénhidás komplexképződés kinetikájának leírására: kísérletileg meghatározott spektrális és fotofizikai jellemzők felhasználásával becsülhetővé vált a hidrogénhidás komplexek képződésének és bomlásának sebessége.

Femtosekundum felbontású mérések segítségével megmutatták, hogy az elektron-gerjesztett 4-(amino)benzonitrilek tetrafluor-származékai poláros közegben rendkívül gyors ($\tau \sim 90$ fs) folyamatban alakulnak át a helyileg gerjesztett állapotú molekulából a töltésátviteli állapotúba. Ez arra utal, hogy a belső konverziós reakcióban az oldószer-dipólus relaxáción kívül más folyamatok nem játszódhatnak le.

Kutatói kapacitás: 4 fő, ebből intézeti állományban: 4 fő. Teljes ráfordítás: 40 M Ft, ebből pályázati forrás: 9 M Ft.

Kristály-, por- és folyadékdiffrakciós kutatások

Dél-afrikai kutatókkal együttműködésben tisztázták több zárvány-vegyület szerkezetét röntgenkristallográfiai módszerekkel.

Új típusú Sn- és Pd-komplexeket állítottak elő. Az Sn-komplexek vizsgálatának alapján sikerrel folytatták a diszmutációs szilárd fázisú reakciók újabb eseteinek leírását.

Új cukorszármazékok és szervesetlen sók közti komplexeket fedeztek föl, amelyek várhatóan szilárd fázisú reakciókban is felhasználhatóak.

Hazai együttműködésben folytatták különböző komplex-, zárvány- és szupramolekuláris-kémiai szempontból érdekes vegyületcsaládok egykristály-diffrakciós szerkezetvizsgálatát.

Amerikai kutatókkal együttműködésben feltárták egyes önszerveződő szupramolekuláris rendszerek (makrociklusos platinakomplexek) szerkezetét. A kialakuló szupramolekuláris formákat geometriailag jellemezték.

Hazai együttműködésben meghatározták egyes vaskomplexek szerkezetét röntgen-diffrakcióval és sűrűségfüggő számításokkal. Jellemezték a komplexek kinetikai viselkedését. Ilyen jellegű vizsgálatokat még nem írtak le az irodalomban. A módszernek potenciálisan komoly hatása lehet a katalíziskutatásra

Osztrák együttműködésben (TÉT) ab initio számításokat, molekuláris dinamikai szimulációkat, röntgen-diffrakciós és neutron-diffrakciós méréseket végeztek Li^+ - és Be^{2+} -iont tartalmazó oldatokon (acetonitril és dimetilszulfid oldószerekben).

Kutatói kapacitás: 12 fő, ebből intézeti állományban: 12 fő. Teljes ráfordítás: 68 M Ft, ebből pályázati forrás: 10 M Ft.

Tömegspektrometriai kutatások

Az elmúlt években végzett orvosi-diagnosztikai tömegspektrométeres kutatásaikat sikerrel folytatták. A kutatások egyik fő iránya a glikoproteinek vizsgálata, ami részben nemzetközi, részben az Országos Onkológiai Intézzel folytatott együttműködésen alapul. Céljuk új diagnosztikai módszerek kidolgozása rosszindulatú daganatos megbetegedések korai kimutatására. Korábban megállapították, hogy a vérben található alfa-1-savas-glikoprotein (AGP) oligoszaccharid részében bekövetkező szerkezetváltozás a rákos megbetegedés kialakulását jól jelzi. 2005. folyamán sikerült az AGP glikozilációs mintázatát meghatározniuk. Újszülöttkori anyagcsere-betegségek kiszűrésének érdekében, szterolok vérből történő kimutatására új HPLC-MS módszert fejlesztettek ki, majd ezt a gyakorlatban alkalmazták.

A tömegspektrométerben lejátszódó folyamatok modellezésére létrehozott Windows-alapú, számítógépes programot (MassKinetics) továbbfejlesztették. A program alkalmazhatóságát a több mint 1000 regisztrált felhasználó jelzi. A programot sikeresen használták entrópia-effektusok és molekuláris komplexek vizsgálatára. A programot, ami szabadalmaztatás előtt áll, továbbfejlesztették peptidok és proteinek vizsgálatára is.

Biomolekulák, peptidok, fehérjék szerkezetvizsgálatával jelentős mértékben hozzájárultak az ország vezető peptidkémiai, illetve biológiai kutatócsoportjainak munkájához (ELTE, SzTE, SZBK Enzimológiai Kutatóintézet).

Kutatói kapacitás: 8 fő, ebből intézeti állományban: 8 fő. Teljes ráfordítás: 56 M Ft, ebből pályázati forrás: 6,7 M Ft.

Elméleti kémiai kutatások

Kvantumkémiai számítások segítségével feltárták a metanol és a széndioxid alifás karbodiimidekkel katalizált reakciójának mechanizmusát, amelynek során dimetil-karbonát (DMC) keletkezik. A vegyiparban nagy mennyiségben felhasznált DMC gazdaságos és környezetkímélő előállítására jelenleg nincs megoldva, a kutatások eredményei új eljárások kidolgozásában használhatók fel.

Direkt dinamikai kváziklasszikus trajektóriaszámításokkal megállapították, hogy a B3LYP/6-31G** szintű potenciálfelület jobban értelmezi a (H + CH₄) reakció dinamikájáról kapott kísérleti eredményeket, mint a magas szintű számítások adataira alapuló, legjobbnak ismert illesztett potenciálfelület. Kváziklasszikus trajektóriaszámításokkal megmutatták, hogy a rezgésileg erősen gerjesztett molekulák reakcióinak sebessége a hőmérséklettel csökken.

Periodikus modellen elvégzett kvantumkémiai számítások segítségével jellemezték a Pd(111) és Rh(111) felületeken adszorbeált metanolmolekula dehidrogénezésének folyamatát. Meghatározták a metanol-láncok legvalószínűbb szerkezetét Rh(111) felületen. Megmutatták, hogy ezen láncokban kétféle hidrogénkötés található.

Vizsgálták a ródiium(I)-foszfin-komplexek által katalizált hidrogén/deutérium kicserélődési reakció mechanizmusát vizes közegekben. Protonált vízklaszterekkel modellezték a vizes közeget és leírták a hidrogéncsere lehetséges mechanizmusát.

Folytatták a molekulák kvantumkémiai energiafelbontásának vizsgálatát, és kiterjesztették azt a DFT-elméletre. Megállapították, hogy itt a kicserélődési funkcionál lokális jellege elvi nehézségeket okoz, és ez szükségessé teheti egy teljesen új megközelítés kidolgozását is.

Kísérleti és elméleti módszerekkel azonosították a víz-acetonitril oldatokban meglévő inhomogenitásokat.

Molekuláris dinamikai és diffrakciós módszer segítségével megmutatták, hogy a lítiumsók DMSO oldatában Li⁺-ion első solvátszférájában négy DMSO-molekula található.

Periodikus modellen elvégzett kvantumkémiai számítások segítségével meghatározták a piritkristály felszínén található hibahelyek szerkezetét és kémiai tulajdonságait.

Ab initio molekuladinamikai számításokat végeztek acetone vizes oldatban végbemenő tautomerizációjának leírására. Megmutatták, milyen mechanizmuson keresztül csökkenti a vízmolekulák jelenléte a tautomerizációs gátat és kimutatták, hogy a protontranszfer vízmolekulákból álló láncon keresztül, intermolekulárisan megy végbe.

Kutatói kapacitás: 8 fő, ebből intézeti állományban: 8 fő. Teljes ráfordítás: 59 M Ft, ebből pályázati forrás: 6 M Ft.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Hazai kapcsolatok

Az intézetnek számos eredményesen folytatott együttműködése van egyetemi kutatókkal. Így pl. a Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszékével „Ródiium(I)-foszfin-komplexek által katalizált hidrogén/deutérium kicserélődési reakció mechanizmusának feltárása” című, a Veszprémi Egyetem Általános és Szervetlen Kémia Tanszékével a „Ruténiumkomplexek gerjesztett elektronállapotai szerkezetének meghatározása kvantumkémiai módszerekkel” és az „Átmenetifém-porfirin komplexek alap- és gerjesztett állapotainak meghatározása kvantumkémiai módszerekkel” című témákban dolgoznak együtt. A BME Fizikai Kémia Tanszékén működik a Vegyészmérnöki Kar és az MTA KK közös Lézerspektroszkópai Laboratóriuma, amelynek fő kutatási területe a fotoaktív makrociklusok vizsgálata.

A Veszprémi Egyetem, MTA Analitikai Kémiai Tanszéki Kutatócsoportjával és a Veszprémi Egyetem Informatikai Kar, MÜKKI-vel együttműködve a „Légköri szennyezők FTIR vizsgálata”, illetve „Fémorganikus vegyületek szerkezetkutatása” c. témákban három közös közlemény született. Különböző szerkezetkutatási témákban a Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszékével, illetve a Szegedi Élelmiszeripari Főiskolai Kar kutatóival közösen négy cikket publikáltak. Fontos partnerük a BME Fizikai Intézete is (két közös publikáció).

Tevékenyen részt vettek az egyetemek oktatási feladatainak ellátásában is. Speciálkollégiumokat tartanak, illetve laborgyakorlatokat vezetnek a következő egyetemeken: Semmelweis Egyetem, Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Szegedi Egyetem, Eötvös Loránd Tudományegyetem, Veszprémi Egyetem. Hét kutató 11 témakörben tart előadásokat, míg 6 kutató 9 témakörben vezet gyakorlatot. Az intézetben 11 PhD-hallgató dolgozik. 2005-ben négyen védték meg PhD-disszertációjukat.

Több egyetemi hallgató az intézetben végez tudományos diákköri munkát, illetve itt készíti el szakdolgozatát.

Az egyetemekkel közös kutatások eredményeit 31 publikáció foglalja össze.

Számos hazai kutatóhellyel folytatnak közös munkákat, így pl. az Országos Onkológiai Intézettel „A humán szérum savanyú α -1-glikoprotein szerkezetének és marker jellegének vizsgálata” c. téma 2005-ben egy közös publikációt eredményezett.

Több publikációt jelentettek meg más MTA-intézetekkel közösen az együttműködések eredményeiről (pl. SzBK Enzimológiai Intézet).

Jelentős a szerkezetvizsgálatokkal kapcsolatos munkájuk, amit hazai gyógyszer- és vegyipari vállalatok részére végeznek.

Legfontosabb partnereik és témáik a következők:

- EGIS Gyógyszergyár Rt., Richter G. Rt., Chinoin Gyógyszergyár Rt.: Molekulák szerkezetvizsgálata spektroszkópai és diffrakciós szerkezetkutatási módszerekkel,
- Nemzetbiztonsági Szakszolgálat: Robbanóanyagok GC-MS, illetve kábítószer HPLC-MS vizsgálata,
- Béres Gyógyszergyár Rt.: Borok, szőlőmagolajok, szőlőmagok analitikai vizsgálata.

Nemzetközi kapcsolatok

Az intézet igen jól kihasználja a Tét-együtműködések keretében adódó tanulmányúti lehetőségeket. Így pl. eredményesen kutatnak a magyar-spanyol Tét-egyezmény (együtműködő partner: University of Gimona, Spanyolország) „Energiadekompozíciós és kötésrendszámítási módszerek” c. témájában. 2005-ben megoldották a "fuzzy atomos" energiefelbontás DFT-általánosítását, elvégezték az energiakomponensek analizését, különös tekintettel a kicserélődési potenciál térbeli eloszlására. Magyar-országi Tét-egyezmény keretében előtanulmányokat folytattak egy "ab initio molekulamechanikai módszer" létrehozásának lehetőségéről (geminálhullámfüggvény energiaképlete átfedő bázis esetére) a Karpov Institute of Physical Chemistry, Moszkva kutatóival. MTA-NSF-OTKA-egyezmény keretében a Northwestern University-vel egy tanulmányút alkalmával számítógépes programot dolgoztak ki sokatomos molekulák reakciódinamikai vizsgálatára.

A Tét/DAAD-egyezmény keretében folyó, „A hatodik mellékcsoport dioxo-fém(VI) komplexeinek, mint katalizátoroknak a kutatása az olefinek epoxidálási reakcióiban” című témában (együtműködő partnerintézet: Inorganic Chemistry Department, TU München) egy közös publikáció született. Magyar-osztrák Tét-egyezmény keretében a „Biológiai rendszerekben használható lumineszkáló jelzőmolekulák” c. témában (együtműködő partner: Max Perutz Laboratories, University of Vienna) N-metil-5-cianoindolin és rokon vegyületek fotofizikai paramétereit állapították meg különböző oldószerekben. Magyar-angol Tét-keretében „Egyfalú szén nanocsövek szintézise nagyenergiájú lézerrel és új típusú spektroszkópiai analizisük” c. témában (együtműködő partner: Centre for Applied Laser Spectroscopy, DEOS, Royal Military College of Sciences, Cranfield University, Shrivenham, Swindon) egy közös publikációt készítettek el.

Olasz-magyar Tét-együtműködés keretében a fehérjék tömegspektrometriás fragmentációját vizsgálják. 2005-ben több kölcsönös tanulmányutat bonyolítottak le (közös publikáció előkészületben). Román-magyar Tét együtműködésben „Molekulaklaszterek fragmentációs tulajdonságainak MS-vizsgálata” folyik, míg spanyol-magyar együtműködésben humán szérum AGP-vizsgálatát folytatják. Több tanulmányutat bonyolítottak le, egy közös publikáció van előkészületben. Röntgendiffrakciós szerkezetkutatói témában a dél-afrikai-magyar Tét-egyezmény keretében több tanulmányút valósult meg mindkét fél részéről.

NSF-OTKA Tét-megállapodás keretében igen sikeres együtműködést folytatnak a University of Utah kutatóival új, nemesfém koordinálta szupramolekuláris szerkezetek előállítására és tulajdonságaik feltárására. Az együtműködés eddigi eredményeiről készült cikket az egyik vezető kémiai folyóirat (Journal of the American Chemical Society) publikálta.

MTA-Bolgár TA együtműködés keretében a „Kombinált kísérleti és elméleti számításos módszer kidolgozása a folyadékkristályban orientált molekulák rezgési spektroszkópiai vizsgálatához” c. témában (együtműködő partnerintézet: Institute of Organic Chemistry, BAS, Szófia) három közös publikációt jelentettek meg.

Az osztrák és a magyar akadémiák közötti egyezmény „Ab initio-, molekuladinamikai számítások és röntgendiffrakciós mérések formamid és DMSO oldatokon” c. témájában a University of Innsbruck kutatóival (Institute for Ion Physics) két publikációt jelentettek meg 2005-ben.

Számos nemzetközi kutatási együttműködésük van egyezményeken kívül is. A legfontosabb partnerintézmények a következők:

Université de Provence, Marseille, Franciaország (4 közös publikáció);

Centre for Heavy Metals, University of Sidney (1 közös publikáció);

University of Tennessee, Space Institute, Tullahoma, Tennessee USA (2 közös publikáció),

Departments of Chemistry and Mathematics, Rose-Hulman Institute of Technology, USA (1 közös publikáció);

Department of Chemistry, University of Perugia, Olaszország (M. Curie Training Network pályázat közös benyújtása és reakciódinamikai programok grid változatának kidolgozása);

Department of Chemistry, University of New Mexico, USA (téma: közös számítások végzése az ózonképződés sebességének izotópfüggésével kapcsolatban);

University of Bari, Olaszország (téma: új katalizátorok szerkezetének és reaktivitásának felderítése);

University of Innsbruck, Ausztria (téma: ionok szolvatációjának vizsgálata),

University of Canterbury, UK (téma: folyékony hangyasav szerkezetének vizsgálata neutrondiffrakcióval);

Institut für Chemie – Physikalische und Theoretische Chemie, Freie Universität, Berlin, Németország (téma: gerjesztett elektronállapotokhoz tartozó potenciálfelületek és átmeneti dipólmomentumok számítása MS-CASPT2 módszerrel);

Institute of Solid State Physics, Graz University of Technology, Ausztria (téma: metanol adszorpciójának vizsgálata Rh(111) felületen);

University of Milano (téma: pirit felszíni tulajdonságai és reaktivitása);

University of Modena (téma: „ritka események” leírása az ab initio molekuladinamika segítségével).

A University of Helsinki kutatóival a partner által kifejlesztett számítógépi program segítségével, kvantumkémiai erőterekkel rezgési analíziseket végeznek.

Társrendezőként 2005-ben megszervezték a 23rd Informal Meeting on Mass Spectrometry nemzetközi konferenciát a CNR, Padova olasz kutatóintézetével.

Nyolcan tíz nemzetközi szervezet tisztségviselői (European Molecular Liquide Society; ICORS International Steering Committee; European Photochemistry Association; Combustion Institute; European Combustion Federation; International Union of Crystallography; AMPERE Committee; COST D23, COST D26, COST P15 Committee).

Négy kutató elnöke, illetve tagja tíz különböző nemzetközi tudományos folyóirat szerkesztőbizottságának (Croatia Chemica Acta, Asian Journal of Spectroscopy, Applied Spectroscopy Review, Journal of Raman Spectroscopy, Vibrational Spectroscopy, Journal of Coordination Chemistry, Journal of Mass Spectrometry, Mass Spectrometry Reviews, Annali di Chimica: Journal of Analytical Environmental and Cultural Heritage, Rapid Communications in Mass Spectrometry).

Az intézet nemzetközi együttműködéseinek eredményességét jelzi, hogy 2005-ben 56 publikációt jelentettek meg külföldi partnerintézetekkel közösen.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

Az intézet arra törekszik, hogy olyan korszerű, kémiai szerkezetvizsgáló műszerparkot hozzon létre és vizsgálati módszereket fejlesszen ki, amelyeknek a segítségével mind a hazai, mind a nemzetközi, kiemelt jelentőségű projektek feladatainak elvégzéséhez is hozzá tud járulni.

Az intézet kutatócsoportjai szerkezetkutatási problémák megoldásával eredményesen vesznek részt mind a Medichem II., mind a Center of Excellence for Biomolecular Chemistry c. EU-programban.

Az intézet aktívan dolgozik olyan kooperációs projektekben, amelyekben egyetemi kutatók is részt vesznek. Ezeket a munkákat az OTKA támogatja. A tudományos eredményekről a beszámoló II. fejezetében olvasható tájékoztatás.

A projektek közül érdemes megemlíteni azokat a kutatásokat, amelyek a sztratoszférában lejátszódó, az éghajlatot befolyásoló kémiai folyamatok körülményeinek és okainak feltárására irányulnak egy SCOUT-program keretében. A projekt fontosságát mutatja, hogy különösen nagy (64) a résztvevők száma, s a támogatás mértéke is jelentős.

2005-ben megrendezték az „Advanced Paramagnetic Resonance Methods in Molecular Biophysics” c. COST-konferenciát Budapesten számos európai kutatóhely részvételével. Egy multidiszciplináris anyagkutatási program (VENEUSOS) keretében, „Szinterelt anyagok pórusszerkezetének kisszögű szórásvizsgálata, modellezése és elméleti értelmezése” c. témában, több hazai és külföldi kutatóhellyel együtt folytatnak eredményes munkát.

Részt vesznek a Physical Chemistry of the Atmosphere – Bettering by Research (ARCUS / PhyCAFoR, 2006/08.) 2005-ben elnyert francia, magyar, román és cseh közös “mobility” projektben, valamint az „Intra- and Intermolecular Electron Transfer” c., a Volkswagen Foundation által támogatott együttműködésben. Ez utóbbiban együttműködő partnerük a Max-Planck-Institut for Biophysical-Chemistry, Göttingen, Németország, aminek kutatóival két közös dolgozatot jelentettek meg.

V. Az év folyamán megjelent jelentősebb publikációk, szabadalmak és más bemutatható eredmények

1. Tárkányi G, Jude H, Pálinkás G, Stang PJ: Dynamic NMR study of the hindered Pt-N(bipyridine) rotation in metal-directed self-assembled macrocycles, *Organic Letters*, 7(22), 4971-4973 (2005)
2. Megyes T, Jude H, Grósz T, Bakó I, Radnai T, Tárkányi G, Pálinkás G, Stang PJ: X-ray diffraction and DOSY NMR characterization of self-assembled supramolecular metallocyclic species in solution, *Journal of the American Chemical Society*, 127(30), 10731-10738 (2005)
3. Deák A, Tárkányi G: Demethylation of the [Me₃Sn(PhN₂O₂)](4) tetramer into dimeric [Me₂Sn(PhN₂O₂)(2)](2): a thermally induced methyl-transfer between supramolecules, *Chemical Communications*, (32), 4074-4076 (2005)

4. Kálmán A: Morphotropism: link between the isostructurality, polymorphism and (stereo) isomerism of organic crystals, *Acta Crystallographica Section B-Structural Science*, 61, 536-547 (2005)
5. Korányi TI, Nagy JB: Distribution of aluminum in different periodical building units of MOR and BEA zeolites, *Journal of Physical Chemistry B*, 109(33), 15791-15797 (2005)
6. Rockenbauer A, Csányi G, Fülöp F, Garaj S, Korecz L, Lukács R, Simon F, Forró L, Pekker S, Jánossy A: Electron delocalization and dimerization in solid C₅₉N doped C-60 fullerene, *Physical Review Letters*, 94(6), 66603/1-66603/4 (2005)
7. Hermann KA, Somogyi Á, Wysocki VH, Drahos L, Vékey K: Combination of sustained off-resonance irradiation and on-resonance excitation in FT-ICR, *Analytical Chemistry*, 77(23), 7626-7638 (2005)
8. Imre T, Schlosser G, Pócsfalvi G, Siciliano R, Molnár-Szöllősi É, Kremmer T, Malorni A, Vékey K: Glycosylation site analysis of human alpha-1-acid glycoprotein (AGP) by capillary liquid chromatography-electrospray mass spectrometry, *Journal of Mass Spectrometry*, 40(11), 1472-1483 (2005)
9. Demeter A, Bérces T: Hydrogen-bond formation between isoindolo[2,1-a]indol-6-one and aliphatic alcohols in n-hexane, *Journal of Physical Chemistry A*, 109(10), 2043-2049 (2005)
10. Aresta M, Dibenedetto A, Fracchiolla E, Giannoccaro P, Pastore C, Pápai I, Schubert G: Mechanism of formation of organic carbonates from aliphatic alcohols and carbon dioxide under mild conditions promoted by carbodiimides. DFT calculation and experimental study, *Journal of Organic Chemistry* 70(16), 6177-6186 (2005)

VI. A kutatóhely 2005. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: Kémiai Kutatóközpont, Szerkezeti Kémiai Intézet

Átlagléttség ¹ :	78	Ebből kutató ² :	62
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			32
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma:			106
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ³ :			104
<i>Ebből</i> idegen nyelvű külföldi folyóiratban:	98	idegen nyelvű hazai folyóiratban:	-
nemzetközi együttműködés keretében:	56	SCI által regisztrált folyóiratban:	94
összesített impakt faktor:	226,975	összes hivatkozás száma ⁴ :	1620
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			1377
Megjelent könyv:	-	könyvfejezet:	2
<i>ebből</i> magyar nyelven könyv:	-	könyvfejezet:	-
		jegyzet:	-
		jegyzet:	-
Megvédett PhD értekezés:	4	Megvédett MTA doktori értekezés ⁵ :	-
Bejelentett találmányok száma:	-	Megadott szabadalmak száma:	-
<i>ebből</i> külföldön:	-	<i>ebből</i> külföldön:	-
Értékesített szabadalmak száma:			-
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma:	36	poszterek száma ⁶ :	32
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ⁷ :			11
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	10	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	10
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ⁸ :			349,2 MFt
Beruházási támogatás:	16,0 MFt	Fiatalkutatói álláshelyek száma ⁹ :	3
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			15
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	24,9 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			2
NKFP:	-	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	- MFt
Egyéb:	2	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	15,7 MFt
Az év folyamán művelt NFT témák száma ¹⁰ :			5
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	131,7 MFt
Külföldi vagy nemzetközi forrásból művelt témák száma ¹¹ :			1
EU forrásból:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	2,1 MFt
Egyéb:	-	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	- MFt
Egyéb pályázatok keretében művelt témák száma ¹² :			1
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0,84 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			23
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	26,2 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány ¹³ :			- MFt

VI/a. A kutatóhely 2005. évi tudományos teljesítményének egyéb bemutatható eredményei¹⁴

Az intézet neve: Kémiai Kutatóközpont, Szerkezeti Kémiai Intézet

Saját kutatás-fejlesztési munka alapján elkészítettek és eredményesen teszteltek egy lézer-fotolízis reaktort, ami alkalmas reakciókinetikai mérések elvégzésére, a felső troposzférára jellemző alacsony hőmérsékleteken.

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

Az intézet küldetése nemzetközileg jegyzett, magas színvonalú kémiai és interdiszciplináris kutatások végzése az anyagtudomány és anyagtechnológia, valamint a környezetvédelem egyes kiemelt területein. Témáik kiválasztásakor kiemelt figyelmet fordítanak egyfelől a tudományos újszerűsége, másfelől a kutatási feladatok gyakorlati vonatkozásaira.

Tevékenységük alapvető jellemzője, hogy a szakmai-tudományos kérdésekre komplex módon, többféle elméleti, kísérleti és anyagvizsgálati módszer együttes alkalmazásával keresik a megfelelő válaszokat.

II. Az év folyamán elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények, azok gazdasági-társadalmi haszna

Anyagkémiai kutatások

Nanorétegek kialakítása és vizsgálata

A szén – szilícium – nitrogén rendszerbe tartozó rétegek előállítását tanulmányozták metán és tetrametil-szilán keverékből, alacsony hőmérsékletű, ún. hidegplazmában. Meghatározták a kialakult rétegek kémiai összetételét, kémiai-szerkezeti és mechanikai tulajdonságait.

Plazma-immerziós ionimplantációs berendezésben ún. ECWR plazmából növesztett és egyidejűleg pulzáló N_2^+ vagy Ar^+ ionbombázásnak alávetett rétegeknél megfigyelték, hogy a kiindulási anyaghoz képest - a plazmában kialakított feszültségkülönbségtől függően - jelentősen csökkent a széntartalom, ugyanakkor számottevő mennyiségű nitrogén épült be a rétegbe. A nitrogén/szilícium arány növelésével csökkent a rétegek nanokeménysége és redukált modulusa.

Kimutatták, hogy DLC típusú rétegek - az ismert plazmás előállítási módszereken kívül - a polietilén ion-, illetve atomsugaras kezelésével is kialakíthatók. Hidrogénben és héliumban döntően amorf hidrogénezett szén, nitrogénben pedig amorf hidrogénezett szén-nitrid rétegek képződnek. A beépült nitrogén három kémiai állapotát azonosították. A kezelt rétegek keményebbek és kopásállóbbak voltak, mint a minták kezeletlen felülete.

Kutatói kapacitás: 4 fő, ebből intézeti állományban van: 4 fő. A becsült intézeti ráfordítás: 54,5 MFt, ebből pályázati forrás: 12,8 MFt.

Korszerű anyagok szintézisének vizsgálata termikus plazmában

Nanoméretű szemcsékből álló oxid-rendszerek előállítását vizsgálták rádiófrekvenciás termikus plazmaberendezésben különböző fémsó oldatokból kiindulva. Megállapították, hogy az adott módszerrel egy lépésben állíthatók elő egyszerű oxidok (ZnO , SiO_2), valamint tetszőleges összetételű, többalkotós oxidrendszerek (ferritek, szilárd oldatok) is.

Megállapították, hogy a kísérleti paraméterek változtatásával a képződő ZnO szemcsék mérete és alakja is befolyásolható: nanorudak, ún. tetrapodok vagy poliéderek szemcsék egyaránt képződhetnek. Az adott módszerrel termodinamikailag kevésbé preferált, ún. inverz-spinel szerkezetű cink-ferritek is előállíthatók. Ezek a kedvező mágneses tulajdonságú anyagok számos elektrotechnikai célra előnyösen használhatók fel.

Kutatói kapacitás: 4 fő, ebből intézeti állományban van: 4 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 5 MFt, ebből pályázati forrás: 1 MFt.

Fullerének szintézise rádiófrekvenciás, termikus plazmában

Fullerének előállítását tanulmányozták grafitporokból rádiófrekvenciás termikus plazma-reaktorban. Megállapították, hogy az általuk vizsgált és részleteiben kidolgozott előállítási módszer számos vonatkozásban előnyösebb, mint az eddig elterjedten alkalmazott egyenáramú ívplazmás fullerén előállítási eljárás. Olcsóbbak a kiindulási anyagok, nagyobb a fullerén-kihozatal és nagyobb hányadban képződnek nagyobb szénatom-számú (molekulatömegű) fullerének.

Meghatározták a grafitporok elpárolgásának és a fullerénklaszterek kialakulásának legkedvezőbb feltételeit. Értelmezték a fullerén képződés mechanizmusát és meghatározták a fullerén-kihozatalt a reaktor különböző részeiben. Eddigi kísérleti eredményeik alapján jó esély van egy újszerű, olcsó és hatékony fullerén előállítási technológia kidolgozására.

Kutatói kapacitás: 4 fő, ebből intézeti állományban van: 2 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 3 MFt, ebből pályázati forrás: 1 MFt.

Újszerű polimer rendszerek vizsgálata

Tanulmányozták csillag és hiperelágazásos polimerek kvázielő gyökös polimerizációval történő szintézisének törvényszerűségeit. Új szintézis koncepciót dolgoztak ki hiperelágazásos polimerek előállítására; az eljárás az eddigi technológiáknál gazdaságosabbnak tűnik. A csillag és hiperelágazásos polimerek iránt világszerte nagy az érdeklődés, ugyanis ezek az anyagok szabályozni képesek egyes folyadékok (pl. motorolajok és kenőanyagok) tulajdonságait, alkalmasak lehetnek molekuláris kapszulázásra, nanorészecskék szintézisére, új típusú polimer keverékek és térhálósító adalékok előállítására, és a gyógyszerkémiában is várhatóan széles körben használhatók fel.

Folytatták kutatásaikat a szupramolekuláris rendeződésre képes, szintetikus polimerekkel kapcsolatban. Kvázielő karbokationos polimerizációval szintetizált, tökéletes láncvégi funkcionalitással rendelkező háromágú csillag poliizobutilénből kiindulva új szupramolekuláris polimer rendszert állítottak elő. Ebből szupramolekuláris rendeződéssel létrejövő, nano-fázisban elkülönülő, reverzibilis gélesedésre képes anyagokat állítottak elő. Ezek az anyagok különleges tömítőanyagokban, termoplasztikus elasztomerekben és polimer blendekben használhatók fel.

Az általuk felderített nanofázisú szerkezet alkalmazásával néhány nanométer méretű ezüst részecskékből és amfilil kotérhálókból álló, érdekes optikai tulajdonságokkal rendelkező anyagokat állítottak elő. Kimutatták, hogy a kotérhálók duzzadás során is megőrzik különleges morfológiájukat, ami többféle nanotechnológiai alkalmazást tesz lehetővé.

Az intézet amfilil kotérhálók foglalkozó kutatócsoportja szervezte meg 2005-ben a tématerület első nemzetközi szimpóziumát Budapesten, International Symposium on Polymer Conetworks, Gels and Membranes: Science, Technology and Applications címmel.

Kutatói kapacitás: 10 fő, ebből intézeti állományban van: 10 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 50 MFt, ebből pályázati forrás: 7 MFt.

Polimerek degradációja és stabilizációja

Polimerek degradációjának és stabilizációjának kutatása kapcsán vizsgálták a Phillips technológiával előállított polietilénhez adott foszfortartalmú antioxidánsok hatásmechanizmusát. Megállapították, hogy az irodalomban elfogadott általános bomlási séma erre az anyagrendszerre nem érvényes. A stabilizátorok hatékonyságát és a hatás mechanizmusát nagymértékben befolyásolja szerkezetük és a foszforhoz kapcsolódó szerves ligandumok jellege. Egyes stabilizátorok a feldolgozási stabilitást javítják, míg mások kedvező hatást gyakorolnak a termék színére.

Reológiai módszert dolgoztak ki a polietilén feldolgozása során bekövetkező szerkezetváltozás követésére. Összefüggést állapítottak meg a polimer reológiai jellemzői, valamint a belőle készült film mechanikai tulajdonságai között.

A HDPE egyik legnagyobb felhasználója a csőgyártás. A vízzel érintkező csövek stabilizátorainak sorsa egyelőre nem ismert, bár ennek a kérdésnek jelentős egészségügyi és környezetvédelmi vonatkozásai vannak. Korábbi kísérleteik folytatásaként megállapították, hogy egyes fenolos antioxidánsok hidrolitikus stabilitása kicsi, és erősen függ a stabilizátor kémiai szerkezetétől. Megkezdték az ipari körülmények között gyártott csövekből vízzel kioldható adalékok, illetve reakciótermékek vizsgálatát.

Kutatói kapacitás: 2 fő, ebből intézeti állományban van: 2 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 6 MFt, ebből pályázati forrás: 2,5 MFt.

Heterogén polimer rendszerek

Az elmúlt években általános összefüggést állapítottak meg a heterogén polimer rendszerek alkotóinak elegyíthetősége, a keverés során kialakult szerkezet, valamint a keverék tulajdonságai között. A különböző összetételű keverékeken szerzett tapasztalataikat egy összefoglaló publikációban tették közzé.

Vizsgálták a szerkezet és a tulajdonságok kapcsolatát töltőanyag-tartalmú társított rendszerekben. Megállapították, hogy a kialakult szerkezet és a tulajdonságok nagymértékben függenek a töltőanyag felületkezelésétől és a komponensek közötti határfelületi kölcsönhatásoktól. Külső feszültség hatására a kompozitokban mikromechanikai deformációs folyamatok indulnak meg. Akusztikus emisszióval és térfogati deformációval vizsgálták ezeket a folyamatokat. Kimutatták, hogy töltőanyagot tartalmazó kompozitokban a határfelületek elválása az uralkodó folyamat. Méréseik alapján a felületek elválása és a mátrix nyírési folyása egymást követően megy végbe.

Jelentős haladást értek el a delaminációval előállított rétegszilikát nanokompozitok tanulmányozásában. Különböző mátrixú nanokompozitok vizsgálatával megállapították, hogy a rétegszilikát gyakorlatilag mindig részlegesen delaminálódik. A feldolgozás során bonyolult szerkezet alakul ki, ami tartalmaz eredeti szemcséket, a polimer által duzzasztott szilikát egységeket, delaminált egyedi lemezeket, nagy szilikáttartalomnál pedig kártyavárszerű szerkezet is létrejöhet. A delamináció mértékét a komponensek kölcsönhatása és kinetikai tényezők határozzák meg, de az eddigi információk alapján a szerkezet mennyiségileg még nem jellemezhető. Megállapították, hogy PP/OMMT kompozitokban, a fizikai kémiai kölcsönhatások mellett kémiai reakciók is lejátszódnak és ez jelentősen befolyásolja a delaminációt.

Kutatói kapacitás: 5 fő, ebből intézeti állományban van: 3,5 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 47 MFt, ebből pályázati forrás: 41 MFt.

Biológiailag lebontható műanyagok kutatása

Vizsgálták cellulóz acetát módosítását polikaprolaktonnal. Meghatározták, hogy a módosítás körülményei, valamint katalizátor alkalmazása miként befolyásolja a termék szerkezetét és tulajdonságait. Megállapították, hogy kaprolaktám esetén a maximális ojtási fok, illetve a legkedvezőbb tulajdonságok milyen hőmérsékleten és katalizátor koncentrációnál érhetők el. Részletes elemzéssel azonosították a lágyított cellulóz acetát, szélesebb értelemben a cellulóz származékok relaxációs átmeneteihez tartozó szerkezeti egységeket.

Természetes erősítőanyagok felhasználásával módosított PP kompozitokat állítottak elő, melyek mindennapi cikkek és akusztikus eszközök előállítására alkalmazhatók. Vizsgálták a komponensek típusának, valamint a határfelületi kölcsönhatásoknak a kompozit tulajdonságaira gyakorolt hatását. Megállapították, hogy a kombinált reaktív/nem-reaktív felületkezelés jelentősen növeli a szilárdságot, a feldolgozhatóság azonban romlik az erősítőanyag mennyiségének növelésével. Az előállított kompozitok tönkremeneteli folyamatainak vizsgálata során megállapították, hogy terhelés hatására a szokásos mikromechanikai deformációs folyamatok mellett a faliszt szemcsék törése is bekövetkezhet, ami jelentősen befolyásolja a társított anyagok mechanikai jellemzőit.

Kutatói kapacitás: 6 fő, ebből intézeti állományban van: 2 fő. Becsült int. ráfordítás: 5 MFt.

Elektrokémiai, elektroszorpciós, elektrokatalízis és korróziós kutatások

Ir(100) és Rh(111) egykristályokon, mint elektródokon végeztek elektrokémiai vizsgálatokat. Egyszerű vizes oldatokban jellemezték az ezeken végbemenő adszorpciós folyamatokat. A folyamatok hasonlóak a platinacsoport más fémein végbemenő adszorpcióhoz. A kapott kapacitás-elektrodpotenciál összefüggések alapján az Ir(100) és Rh(111) egykristály elektródokon kialakuló kettősréteget hasonlóan találták az Ir(111) elektródon kialakulthoz.

Nagyérzékenységű elektrokémiai mérőberendezést (ún. bipontenciosztátot) fejlesztettek ki nanorések kialakítására, valamint a résekben történő molekuláris vezetőképesség mérésekhez. A berendezéssel nanoréseket és nanodrótokat állítottak elő. Ez irányú kutatásaik új generációs nanoelektronikai áramkörök kifejlesztéséhez járulhatnak hozzá.

A cink anódos oldódásának mechanizmusára vonatkozó elképzelések kritikai elemzéséből kiindulva megállapították, hogy az anionok adszorpciója kulcsszerepet játszik az oldódási folyamatban. E körülményt a töltés- és anyagmérleg felállításakor messzemenően figyelembe kell venni. A kutatások hatékonyabb katódos védelmi eljárások kialakítását eredményezhetik.

Vizsgálták a vascsoport fémeinek viselkedését perklorát oldatokban. Kimutatták, hogy valamennyi esetben számolni kell perklorát - fém kölcsönhatással, amelynek mértéke erősen függ a fém minőségétől. Kifejezetten erős a kölcsönhatás vas és kobalt esetén.

A réz-alumínium kétfémes rendszer korróziós sajátosságainak vizsgálata során megállapították, hogy a réz elsősorban az alumínium lyukkorróziós hajlamát növeli meg. Kloridos közegben, ahol egyébként is fennáll a lyukkorrózió veszélye, a réz ezt nagymértékben fokozza. Ezek a felismerések lehetővé teszik fűtési rendszerek korróziós károsodásainak csökkentését.

Elektrokémiai impedancia módszerrel vizsgálták környezetbarát, vízhígítású festékanyagokból kialakított bevonatok korrózióvédő mechanizmusát. Megállapították, hogy a fizikai úton száradó sztírol-akrilát alapú bevonatrendszerek felhasználás során tapasztalt időbeli javulása a

vízben oldódó komponensek kioldódásával magyarázható. Vizsgálataik adalékot szolgáltatnak alacsony VOC tartalmú festékszerkezetek és környezetbarát bevonatok kifejlesztéséhez.

Kutatói kapacitás: 6,5 fő, ebből intézeti állományban van: 6 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 40 MFt, ebből pályázati forrás: 6 MFt.

Különleges fémkomplexek előállításának és vizsgálata

A fém-poligalakturonát (-Pg) komplexek kutatása során a különböző körülmények között történő komplexképzést és a keletkező termékek szerkezetét tanulmányozták részletesebben. Nagy hangsúlyt fektettek az előállítás első lépésének, a pektin hidrolízisének vizsgálatára. Megállapították, hogy a hidrolízis körülményeitől függően a keletkező Pg-savak fizikai és kémiai tulajdonságai hogyan változnak, és ezek a változások miként befolyásolják a reakció következő lépésében keletkező fém-Pg szerkezetét és fizikai tulajdonságait. Új laboratóriumi és ipari gyártástechnológiát dolgoztak ki a komplexek előállítására a 2004-ben beadott és 2005-ben közzétett új szabadalmi eljárásuk alapján.

Az MTA Kémiai Kutatóközpont licence alapján gyártott, az IN VITRO Kiszövetkezet által forgalmazott, a vashiányos anémia kezelésére ajánlott Fe-, Mn-, Zn-, Co- és Cu-tartalmú Pg készítmény, a FERROCOMP tablettá gyógyszerként már forgalomban van. Az új gyártási technológiával javítható a termék gazdaságossága, ezáltal piaci versenyképessége is.

Kutatói kapacitás: 4 fő, ebből int. állományban van: 4 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 1 MFt.

Környezetkémiai kutatások

Veszélyes hulladékok ártalmatlanítása magas hőmérsékletű plazmákban

Modellvegyületekkel és különféle veszélyes hulladékokkal végzett kísérleteik alapján megállapították, hogy szerves és szervetlen hulladékok egyaránt hatékonyan bonthatók el akár rádiófrekvenciás, akár ívplazmás termikus plazmareaktorokban. Az intézetben végzett kutatások, valamint a PLASMA Bt-nél és a REMONDIS Kft-nél végzett fejlesztő tevékenység eredményeire alapozva kidolgozták egy évente 100000 t kommunális, 30000 t veszélyes, fémtartalmú ipari hulladék és 10000 t veszélyes szerves hulladék kezelésére és feldolgozására alkalmas, plazmatechnológiás kezelést is tartalmazó, komplex technológia folyamatsémáját. A technológiával egyrészt megszüntethető a hulladékok veszélyes jellege, másrészt kereskedelmi forgalomban értékesíthető termékeket (ötvözött nyersvasat, üveg- és kerámia lapokat, habüveg termékeket, szigetelő paneleket, nagy diszperzitású kormot, fém- és fém-oxid porokat), valamint energiahordozókat (fűtőolajt, villamos energiát, hőt) lehet előállítani.

Kutatói kapacitás: 6 fő, ebből intézeti állományban van: 6 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 20 MFt, ebből pályázati forrás 15 MFt.

A PVC környezetileg előnyös lebontása és átalakítása

Tanulmányozták a világon harmadik legnagyobb mennyiségben gyártott polimer, a PVC [poli(vinil-klorid)] oxidáló körülmények közötti, környezetileg előnyös átalakításának lehetőségeit. Kimutatták, hogy az általuk korábban kidolgozott oxidációs eljárás eredményesen alkalmazható lágyítót tartalmazó PVC láncok láncszakítására, azaz kisebb molekulatömegű, oxidált szerkezeteket tartalmazó polimer előállítására. Ez lehetőséget teremt a PVC másodlagos újrahasznosítására olyan területeken is, ahol az eredeti PVC - szerkezete miatt - nem alkalmazható.

Kutatói kapacitás: 2 fő, ebből int. állományban van: 2 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 5 MFt.

Műanyag hulladékok pirolitikus újrahasznosítását elősegítő kémiai reakciók kutatása

Kutatásokat végeztek az elektronikai hulladékok pirolízis-olajából és a halogéntartalmú égésgátlókból származó szennyezők kiszűrésére használt bázikus zeolitok regenerálására. Megállapították, hogy az elhasznált zeolitok a szokásos, levegőben történő kiégetéshez képest közel 100°C-kal alacsonyabb hőmérsékleten, vízgőzben történő hevítéssel sikeresen regenerálhatók.

Egy bróm-aromás, valamint egy szerves és egy szervesen foszfortartalmú égésgátlóval összegegyűrt *biszfenol A* alapú polikarbonát mintán, 500°C-on végzett pirolízis esetén tanulmányozták az égésgátló adalékok hatását a műanyag hőbomlására. Megállapították, hogy a poli-karbonátból előállított olaj összetételét jelentősen csak az ammónium polifoszfát égésgátló változtatja meg, míg a szerves bróm- és foszfortartalmú adalékok bomlástermékei szennyezik az olajt.

Kutatói kapacitás: 2 fő, ebből intézeti állományban van: 2 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 20 MFt, ebből pályázati forrás: 5 MFt.

Biomassza anyagok hasznosításának kutatása termikus módszerekkel

Vonatkozó kutatásaikban korszerű, környezetkímélő technológiák és energiatermelési eljárások kémiai alapfolyamatait vizsgálták. Laboratóriumi kísérletekben tisztázták az ipari folyamatok szempontjából lényeges tényezők hatását és olyan ismeretekre tettek szert, amelyek hozzájárultak a lejátszódó folyamatok mélyebb megértéséhez a következő területeken: (i) energiaültetvények termékeinek jellemzése, termikus viselkedésüket meghatározó tényezők felderítése, (ii) biomassza anyagok energetikai hasznosítása faszenek előállításával és elgázosításával, (iii) folyékony üzemanyag előállítása biomassza anyagok katalitikus pirolízisével és (iv) faanyagok papíripari hasznosítása új, környezetkímélő technológiákkal.

Közreműködtek a Karlsruhei Kutatóközpont biomassza alapú pirolízis-olajok termelésére szolgáló kísérleti pirolízátorának átalakításában. Az általuk kidolgozott analitikai pirolízis módszer megfelelőnek bizonyult a bioolajok finomítására szolgáló katalizátorok gyors és egyszerű tesztelésére.

Kutatói kapacitás: 3 fő, ebből intézeti állományban van: 3 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 25 MFt, ebből pályázati forrás: 3 MFt.

Anyag- és energiatakarékos környezetvédelmi technológiák fejlesztése

Hidas és Garé térségében a talajba jutott több ezer tonna poliklórbenzol környezeti szétterjedését az úgynevezett depressziós módszerrel akadályozzák meg. A folyamatosan szivattyúzott klórbenzolos talajvizet a Hidas UV-oxidációs Üzem tisztítja meg.

Az intézet munkatársai, ipari partnerekkel együttműködve újszerű, kombinált, 50 m³/nap kapacitású víztisztító reaktort fejlesztettek ki. A 2005-ben szabadalmaztatott technológia legfontosabb ismérvei: nappal a mozgó folyadékrétegben a klórbenzolok fotokatalitikusan oxidálódnak, míg nappal és éjjel a mozgó vízréteg ellenáramú sztrippelés játszódik le. Az eljárás kiegészül a kihajtott klórbenzolok oxidációjával hordozós fémkatalizátoron. Nappal a reaktor napkollektorként is működik, melegíti a vízréteget, ami jelentősen növeli a sztrippelés határfokát. A technológia megbízható és rendkívül energiatakarékos: megfelelő méretnöveléssel, mintegy 140 MFt-os beruházással ki tudná váltani a jelenleg működő UV-oxidációs üzemet. Teljes életciklus költség számítások alapján a beruházás 20 év alatt 1200 MFt megtakarítást eredményezne.

Kutatói kapacitás: 2 fő, ebből intézeti állományban van: 2 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 11 MFt, ebből pályázati forrás 9,6 MFt.

A Környezetkémiai Laboratórium tevékenysége

Bíztató eredményeket értek el egy propilénglikol bázisú hűtőközegben alkalmazható, környezetbarát korróziógátló adalékkompozíció kifejlesztésében. Az eredmények alapján valós esély van az eddig használt etilénglikolt kiváltó, propilénglikol alapú, - gépjárművek hűtőrendszere mellett ipari rendszerekben is használható - alacsony dermedéspontú hűtőközeg létrehozására. A kidolgozott korrózióvédő kompozíció kísérleti gyártása és üzemi vizsgálata ipari partnerüknél megkezdődött.

Befejezték az MTA KK AKI Környezetvédelmi Laboratóriumának akkreditálását a Nemzeti Akkreditáló Testületnél. A Laboratórium akkreditálásával az intézet intenzívebben kapcsolódhat be a hazai környezetvédelmi problémák feltáró, tisztázó jellegű analitikai vizsgálataiba, ezen keresztül azok megoldására irányuló kutatásokba.

Kutatói kapacitás: 2 fő, ebből intézeti állományban van: 2 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 7,5 MFt, ebből pályázati forrás: 1 MFt.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Hazai kapcsolatok

Az AKI kutatói számos hazai kutatóhellyel, közülük is elsősorban akadémiai kutatóintézetekkel (MTA Geokémiai Kutatóintézet, MTA Szilárdtestfizikai és Optikai Kutatóintézet) és egyetemekkel (Eötvös Loránd Tudományegyetem, Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Semmelweis Egyetem, Nyugat-Magyarországi Egyetem, Szent István Egyetem, Veszprémi Egyetem) dolgoznak együtt különféle kutatási témákban. Az intézet a Veszprémi Egyetem Műszaki Kémiai Intézetével közös professzori laboratóriumot működtet. Az Alkalmazott Polimer Fizikai Kémiai Osztály gyakorlatilag egy szakmai egységet alkot a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Műanyag- és Gumiipari Tanszékével.

Az intézet munkatársai több egyetemen (Central European University, Debreceni Egyetem, Dunaújvárosi Főiskola, Eötvös Loránd Tudományegyetem, Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Miskolci Egyetem, Semmelweis Egyetem, Veszprémi Egyetem) vezetnek szemináriumokat és tartanak graduális és posztgraduális előadásokat.

Nemzetközi kapcsolatok

Témáik többségét nemzetközi kutatási együttműködésben művelik. A közös kutatások kereteit egyrészt EU projektek, másrészt a következő, kétoldalú együttműködések adják.

Fullerének termikus plazmában végzett szintézisével kapcsolatban a belgrádi Vinca Atommag Kutatóközponttal, ritkaföldfém oxidok termikus plazmában történő előállítása terén a madridi Kerámia és Üveg Intézettel, nanodrótok és nanorések elektrokémiai előállítása, jellemzése és módosítása témában a Jülichi Kutató Központtal, az elektrokémiai kettősréteg vizsgálatában pedig az Ulmi Egyetemmel működnek együtt.

A polipropilén plazmás felületkezelésében a pozsonyi Comenius Egyetemmel, a permanganát-komplexek szintézisében az indiai Jodhpur Egyetemmel, a napenergiás desztillálók fejlesztésében a Cagliari Egyetemmel folytatnak közös kutatásokat. Szelektív oszlopmódosító szereket dolgoztak ki HPLC-hez a prágai Élettani Intézettel együttműködésben.

A Bécsi Egyetemmel együttműködve új, reverzibilis térhálósodásra képes supra-molekuláris polimer rendszert, a Drezdai Polimer Intézettel új ojtásos kopolimereket, míg a Ciprusi Egyetem munkatársaival poliizobutiléne alapuló, szabályozott szerkezetű amfifil polimereket állítottak közösen elő.

Polimertechnológiai témákban hazai vállalatokkal, a TVK Rt-vel, a HCL Kft-vel és a Plastline Kft-vel dolgoztak együtt. A francia Clariant Huningue céggel, a penangi Malajzia Egyetemmel, a koreai Inha Egyetemmel, a Kaiserslauteni Egyetemmel, a brüsszeli Free Egyetemmel és a Twenti Egyetemmel végzett kutatásaik eredményeit közös publikációkban és előadásokban jelentették meg.

Műanyag hulladékok újrahasznosítási lehetőségeinek kutatásában a japán Okayama Egyetemmel, halogéntartalmú anyagok integrált termikus – kémiai kezelése terén a Karlsruhei Kutatóközponttal, a Torinói Egyetemmel és a Milanói Egyetemmel végeznek közös kutatásokat.

Faszemek vizsgálata terén Hawaii Egyetemmel, a biomassza anyagok energetikai felhasználásának kutatásában a Norvég Műszaki Egyetemmel és a Katalán Műszaki Egyetemmel, míg a környezetkímélő rostpép fehérítési eljárások vizsgálatában a portugáliai Covilhã Egyetemmel működnek együtt.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

Az intézet kutatói által 2005-ben művelt OTKA pályázatok közül a következőkben értek el figyelemreméltó eredményeket:

- Szén alapú nanokompozitok előállítására és komplex szerkezeti jellemzésére irányuló pályázatukban Si-tartalmú DLC-rétegeket növesztettek CVD módszerrel (T043359).
- Nanoporok plazmaszintézisére irányuló projektjükben fullerének, továbbá nanoméretű cink-oxid és cink-ferrit szemcsék plazmatechnológiával történő előállításának részfolyamatait tanulmányozták és értelmezték (T047360).
- Nanoszerkezetű amfifil kotérhálók és gélek kutatása kapcsán néhány nanométeres ezüst részecskékből és amfifil kotérhálókból álló, érdekes optikai tulajdonságokkal rendelkező anyagokat állítottak elő (T046759).
- Az elektrokémiai adszorpcióval kapcsolatos kutatásaik hozzájárultak a korróziós folyamatok első elemi lépésének pontosabb megismeréséhez, ami jó alapot ad az eddigieknél hatékonyabb korrózióvédelmi eljárások kidolgozásához (T045888, T042452).
- A réz-alumínium fémpár korróziós sajátosságainak felderítése és az azokat befolyásoló tényezők megismerése lehetővé teszi a fűtési rendszerekben fellépő korróziós károsodások csökkentését (T037693).
- Az égésgátló szereket tartalmazó műanyagok hőbomlásának kutatása fontos információkat szolgáltatott arra, hogy az adott hulladékféleség újrahasznosítása miként valósítható meg környezetre ártalmatlan melléktermékek képződése nélkül (T047377).
- Laboratóriumi kísérletekben, termikus elemzéssel tisztázták biomassza anyagok ipari hasznosítása szempontjából lényeges folyamatjellemzők hatását (T037705).

Az intézet kutatói a következő egyéb hazai kutatási pályázatok művelésében vettek részt:

- Lezárult a Környezetvédelmi Laboratórium akkreditálása (Akkreditálási okirat száma: NAT-1-1378/2005). Az akkreditálás lehetőséget teremt arra, hogy a laboratórium az eddigieknél is hatékonyabban támogassa az intézetben folyó kutatásokat, és képes legyen

környezetvédelmi tényfeltáró és kárelhárítási technológiák kidolgozását megalapozó környezetvédelmi analitikai feladatok elvégzésére.

- Klórbenzolokkal szennyezett talaj és talajvíz tisztítása (KMFP-000318/2004): ipari partnereikkel együtt a Garé és Hidas térségében található, poliklórbenzolokkal szennyezett talajvíz tisztítására egy újszerű, kombinált technológiájú, 50 m³/nap kapacitású kísérleti üzemet terveztek és építettek meg. A rendszert 2005-ben optimalizálták.
- Eljárást dolgoztak ki nagy kapacitású festőüzemben használt adszorbensek regenerálására, az elsődleges levegőáramnál mintegy százszor kisebb tömegáramú levegő, mint hajtógáz segítségével (GVOP 748/2005).
- Veszélyes hulladékok plazmatechnológiás ártalmatlanításának hazai megalapozása (KMFP-000547/2004): az intézetben végzett kísérletek, valamint a PLASMA Bt-nél és a REMONDIS Kft-nél végzett fejlesztő tevékenység eredményeire alapozva kidolgozták egy évente 100000t kommunális, 30000t veszélyes, fémtartalmú ipari hulladék és 10000t veszélyes szerves hulladék kezelésére és feldolgozására alkalmas, plazmaeljárást is alkalmazó komplex technológia folyamatsémáját.
- Kültéri műanyag medenceszegély profil anyagának és gyártástechnológiájának kifejlesztése német piacra (GVOP-3.1.1-2004-05-0027/3.0): A HCL Kft, a Plastline Kft és az intézet közös fejlesztésbe kezdett, melynek célja egy különleges geometriájú kültéri medence profil kidolgozása volt. Az intézet feladata a kerti medence szegély alapanyagának kifejlesztése, a szegély előállítására alkalmas PVC adalékrendszerének összeállítása volt. A munka során kifejlesztettek egy ólom stabilizátort nem tartalmazó, nagy ütés- és hőállóságú, jó mechanikai tulajdonságú termék előállítására alkalmas PVC alapanyagot.

Az intézet kutatói a következő EU pályázatok kidolgozásában vettek részt 2005-ben:

- Új, felületmódosított protézisek (G5ST-CT-2002-50247): száraz levegőben végzett plazma-immertiós ionimplantációval jelentősen javították titán- és alumínium-tartalmú titánötvözetek keménységét és kopásállóságát.
- Halogéntartalmú anyagok integrált termikus és kémiai kezelése (GRD1-CT-2002-03014): analitikai pirolízises módszert dolgoztak ki a műanyag hulladékok pirolízisekor kapott olajok finomítására használt katalizátorok gyors és egyszerű tesztelésére. A módszerrel nyomon követték, hogy az elektromos és elektronikai hulladékok pirolízis olajának halogén-mentesítésére szolgáló zeolit katalizátorok aktivitása a felhasználás közben miként változik. Regenerálási eljárást javasoltak az elszennyeződött katalizátorok aktivitásának visszaállítására. Az eljárás gazdaságosságát az EU projektben üzembe helyezett ipari reaktor hosszabb idejű, folyamatos működése alapján lehet majd megítélni.

Egyéb nemzetközi pályázatok:

- A Cagliari Egyetemmel folytatott együttműködés keretében az intézet kutatói megterveztek és Szardínia szigetén üzembe helyeztek egy üzemi napenergiás modult, amely elhagyott sólepárlók medencéire telepítve a korábbiaknál lényegesen gazdaságosabban állít elő édesvizet. A rendszert bevizsgálták, elméleti analízise és optimalizálása folyamatban van.
- Osztrák-magyar TÉT együttműködésben új szupramolekuláris polimer rendszert állítottak elő kvázielő karbokationos polimerizációval szintetizált, tökéletes láncvégi funkcionalitással rendelkező, háromágú csillag poliizobutilénből kiindulva.

- A DuPont amerikai céghez benyújtott kutatási pályázatukkal DuPont Research Award címen nyertek támogatást új típusú, funkciós, hiperelágazásos polimerekkel kapcsolatos kutatásaikhoz.
- A Ciprusi Egyetemen közös TÉT pályázatuk keretében poliizobutiléne alapuló, új szerkezetű kotérhálókat állítottak elő.

V. Az év folyamán megjelent jelentősebb publikációk, szabadalmak és más bemutatható eredmények

1. Blaszó M: In situ modification of pyrolysis products of macromolecules in an analytical pyrolyser, *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*, 74, 344-352 (2005)
2. Bruns N, Scherble J, Hartmann L, Thomann R, Iván B, Mülhaupt R, et al. (7): Nanophase separated amphiphilic conetwork coatings and membranes, *Macromolecules*, 38, 2431-2438 (2005)
3. Cserhádi T, Forgács E: Effect of pH and salts on the binding of free amino acids to the corn protein zein studied by thin-layer chromatography, *Amino Acids*, 28, 99-103 (2005)
4. Főglein KA, Szabó PT, Babievskaya IZ, Szépölggyi J: Comparative study on the decomposition of chloroform in thermal and cold plasma, *Plasma Chemistry and Plasma Processing*, 25, 289-302 (2005)
5. Gatos KG, Százdí L, Pukánszky B, Karger-Kocsis J: Controlling deintercalation phenomena in hydrogenated nitrile rubber (HNBR)/organo-montmorillonite nanocomposites cured by peroxide, *Macromol. Rapid Commun.* 26, 915-919 (2005)
6. Groenewolt M, Brezesinski T, Schlaad H, Antonietti M, Groh PW, Iván B: Polyisobutylene-block-poly(ethylene oxide) for robust templating of highly-ordered mesoporous materials, *Advanced Materials*, 17, 1158-1162 (2005)
7. Ladó C, Hajdú M, Farkas E, Then M, Taba G, Szentmihályi K: Study on the transfer of components of *Aetheroleum carvi* and *Aetheroleum foeniculi* oils, *Fitoterapia*, 76, 166-172 (2005)
8. Pajkossy T, Kibler L A, Kolb DM: Voltammetry and impedance measurements of Ir(111) electrodes in aqueous solutions, *Journal of Electroanalytical Chemistry*, 582, 69-75 (2005)
9. Stéger C, Varga V, Horváth L, Rév E, Fonyó Zs, Meyer M, et al (7): Feasibility of extractive distillation process variants in batch rectifier column, *Chemical Engineering and Processing* 44, 1237-1256 (2005)
10. Tóth A, Mohai M, Ujvári T, Bertóti I: Surface and nanomechanical properties of Si:C:H films prepared by RF plasma beam CVD, *Diamond and Related Materials*, 14, 954-958 (2005).

VI. A kutatóhely 2005. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: Kémiai Kutatóközpont, Anyag- és Környezetkémiai Intézet

Átlagléttség ¹ :	67	Ebből kutató ² :	45
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			23
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma:			109
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ³ :			107
<i>Ebből</i> idegen nyelvű külföldi folyóiratban:	66	idegen nyelvű hazai folyóiratban:	4
nemzetközi együttműködés keretében:	31	SCI által regisztrált folyóiratban:	65
összesített impakt faktor:	114,083	összes hivatkozás száma ⁴ :	1068
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			834
Megjelent könyv:	-	könyvfejezet:	2
<i>ebből</i> magyar nyelven könyv:	-	könyvfejezet:	-
		jegyzet:	-
		jegyzet:	-
Megvédett PhD értekezés:	1	Megvédett MTA doktori értekezés ⁵ :	-
Bejelentett találmányok száma:	5	Megadott szabadalmak száma:	1
<i>ebből</i> külföldön:	4	<i>ebből</i> külföldön:	-
Értékesített szabadalmak száma:			-
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma:	35	poszterek száma ⁶ :	37
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ⁷ :			20
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	3	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	7
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ⁸ :			355,9 MFt
Beruházási támogatás:	- MFt	Fiatal kutatói álláshelyek száma ⁹ :	5
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			14
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			20,5 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			3
NKFP:	3	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	27,7 MFt
Egyéb:	-	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	- MFt
Az év folyamán művelt NFT témák száma ¹⁰ :			4
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			39,5 MFt
Külföldi vagy nemzetközi forrásból művelt témák száma ¹¹ :			4
EU forrásból:	2	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	8,4 MFt
Egyéb:	2	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	5,4 MFt
Egyéb pályázatok keretében művelt témák száma ¹² :			1
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			0,2 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			35
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			63,3 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány ¹³ :			0,54 MFt

Kémiai Kutatóközpont
IZOTÓPKUTATÓ INTÉZET

1121 Budapest, Konkoly T.M.u. 29-33., 1525 Budapest, Pf. 77.
Telefon : 392-2531, Fax: 392-2533, e-mail: wojn@iki.kfki.hu

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

Az intézet 2005. évi tevékenységét két alapvető kutatási területre, a széles értelemben vett nukleáris (azaz nukleáris kémiai, ellenőrzési és sugárdozimetriai, valamint sugárzásos technológiai eljárások) technika alkalmazását, elterjesztését és biztonságát célzó kutatásra és fejlesztésre, valamint a heterogén katalitikus folyamatok mechanizmusának, katalizátor rendszerek szintézisének és viselkedésének kutatására összpontosította.

Fontos, folyamatos feladatként szerepelt az intézet céljai között e két kutatási irány összekapcsolásával egy szélesebb kutatási program kialakítása. Ennek egyes elemei mutatkoznak: izotóp nyomjelzéses és besugárzásos felület- és szerkezetkutatás, sejt kultúrák szeparálását célzó ojtásos polimerek előállítása, a technécium előállítás célanyaga, a $\text{MoO}_x/\text{Al}_2\text{O}_3$ fiziko-kémiájának kutatása. Az intézet helyzetében 2006. január 1-vel bekövetkezett szervezeti változás miatt fel kell gyorsítani e folyamatot.

A fő (nem közvetlen kutatási) feladatok:

- PHARE program keretében kapott (ICP-MS) berendezés üzembe helyezése megtörtént, az e célból előirányzott feladatok teljesültek,
- a sérült nukleáris üzemanyagot tartalmazó paksi tokok hasadóanyag tartalmának meghatározásához szükséges eljárást kidolgozták, a berendezés elkészült, laboratóriumi próbáit elvégezték, az üzemi próbamérések folyamatban vannak,
- a neutron-nyalábban működő Mössbauer mérőhely üzembe helyezése érdekében elkészült a berendezés mérőkamrája,
- az Országos Atomenergia Hivatal (OAH) számára az intézet folyamatosan végezte fejlesztő és egyéb „szakmai háttér” tevékenységét, többek között a sugárzó anyagok nyilvántartása és szállítása, valamint a nukleáris ellenőrzés terén.

II. Az év folyamán elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények, azok gazdasági-társadalmi haszna

A következőkben ismertetett kutatások eredményeként közzétett tudományos dolgozatok száma 77 (2004: 51%), 84 %-uk (2004: 67%) külföldi és idegen nyelvű, 82 %-uk (2004: 75%) SCI által regisztrált folyóiratban jelent meg. Csökkent a könyvek, könyvfejezetek múlt évi magas száma, amely nukleáris kémiai, prompt gamma aktivációs analitikai (PGAA), illetve katalízis témájú monográfiák megjelenésével volt kapcsolatos.

Nukleáris kutatások (célzott alapkutatás, kísérleti fejlesztés)

A PGAA módszer nukleáris alkalmazása

Nyalábszagató technikával és gamma-gamma koincidencia módszerrel atommagok pontosabb hatáskeresztmetszet értékeit mérték és neutronbefogási energiákat határoztak meg.

Hatáskeresztmetszeteket mértek egy, csillagászati ciklusban (CNO) szerepet játszó $^{12}\text{C}(\alpha,\beta)^{16}\text{O}$ reakcióban. ^{124}Sn atommagban három-fononos mag-gerjesztést fedeztek fel.
Kutatóév: 1. Becsült intézeti ráfordítás: 10 MFt. Pályázati forrás: 2,2 MFt.

A módszer egyéb alkalmazásai: Bór koncentrációt határoztak meg különböző geológiai formációkban, közöttük a Bodai Aleurolitban, kompozit kerámiák, szén nanocsövek, TL dózismérők szennyezettségét mérték, archeometriai minták, gyógynövények összetételét állapították meg. Halogénlámpában alkalmazott fémhalogenidek összetételét határozták meg a General Electric cég számára.

Kutatóév: 3. Becsült intézeti ráfordítás: 25 MFt, pályázati forrás, illetve megbízás: 6 MFt.

A PGAA mérés technika fejlesztése: nyalábszaggató módszert dolgoztak ki rövid felezési idejű izotópok parciális gammakeltési hatáskeresztmetszetének mérésére, nemes gázok, továbbá ^{13}C , ^{15}N meghatározását standardizálták. A meghatározás módszerét fejlesztették, feltérképezték a PGAA mérések hátterét. Összekapcsolták a PGAA és a Brookhaven-i nukleáris adatbázist.

Kutatóév: 2. Becsült intézeti ráfordítás: 16 MFt; pályázati forrás: 2,8 MFt.

A módszer alkalmazásának közvetlen gazdasági haszna a vállalatok számára végzett elem-analízis terén és technológiai folyamatok paramétereinek inaktív nyomjelzéses meghatározásában mutatkozik (GE Lighting, Mecsekérc Rt.). További gazdasági eredmény a NAP VENUS 05 NKTH pályázat keretében várható, ha a konzorciumban részt vevő vállalkozások átveszik a neutron optikai kutatási eredményeket. A nukleáris adatok pontosabb meghatározása az új típusú nukleáris reaktorok, illetve gyorsítók tervezésénél hasznosuló eredmény. Elsősorban az életminőség terén jelentkező eredménnyel járnak a kulturális örökség és a geológia körébe tartozó kutatások.

Sugárbiztonsági kutatás-fejlesztés (célzott alapkutatás, kísérleti fejlesztés és gyakorlati alkalmazás)

Ellenőrző módszerek: Az intézetben kidolgozott kormeghatározási módszert alkalmassá tették tetszőleges formájú és kémiai összetételű urán-minták korának (a dúsítás, illetve reprocessálás óta eltelt idő) meghatározására. A neutronforrások transzurán tartalmának meghatározására kidolgozott módszer alkalmazását elősegítő hordozható berendezést készítettek. A Paksi Atomerőmű RT megbízásából kidolgozták a sérült üzemanyagot tartalmazó tokok hasadóanyag tartalmának meghatározására szolgáló, a gamma-spektroszkópia és neutronszámlálás együttes alkalmazásán alapuló eljárást. Elkészítették és laboratóriumi körülmények között kipróbálták a berendezést, amelyet a vállalat elfogadott. Az üzemi próbák folyamatban vannak.

Kutatóév: 5. Becsült intézeti ráfordítás: 16 MFt, pályázati forrás, illetve megbízás: 53 MFt.

Sugárdozimetria: Új termolumineszcens anyagokat (Mn- és Ag-lítium-tetraborát) állítottak elő. Megállapították, hogy a kristályos szerkezetekben egy lumineszcencia centrum típus van jelen, míg amorf Ag-lítium-tetraborát anyagban legalább kettő.

Környezeti gamma dozimetriai célra kiválóan alkalmazható $\text{Li}_2\text{B}_4\text{O}_7:\text{Cu}$ egykristályt fejlesztettek ki. Sugártechnológiai alkalmazás céljából meghatározták polivinilalkohol-metilbolya film gamma- és elektron dozimetriai paramétereit.

Kutatóév: 4. Becsült intézeti ráfordítás: 23 MFt, pályázati forrás, illetve megbízás: 6 MFt.

Izotópmigráció: Radioizotópok migrációját vizsgálták a Bodai Aleurolit agyagkőzet mintákban. Megállapították, hogy a $^{99}\text{TcO}_4^-$ és $\text{H}^{14}\text{CO}_3^-$ anionok látszólagos diffúziós állandója gyakorlatilag azonos $\sim 1 \times 10^{-12} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$. A vizsgálatok eredményei a kiegészített paksi atomerőművi fűtőelemek végleges hazai elhelyezése számára alkalmas hely kiválasztását segítik a Radioaktív Hulladékokat Kezelő Kht irányításával folyó távlati projekt keretében és beépülnek egy széles körű (50 résztvevős) EU-6-os EURATOM keretprogramba is.

Kutatóév: 1,5. Becsült intézeti ráfordítás: 4,5 MFt, pályázati forrás: 1,5 MFt.

Az ICP-MS technika bevezetése: Elvégezték a kis izotóp mennyiségeket tartalmazó környezeti minták elemzésére alkalmas módszerek jelentős részének kidolgozását, megkezdték a gyakorlati célú méréseket.

Kutatóév: 3. Becsült intézeti ráfordítás: 13 MFt, pályázati forrás: 12 MFt.

Az e témakörben elért eredmények úgyszólván teljesen gyakorlati felhasználásra kerülnek. Miután e felhasználások nukleáris és sugárvédelmi, illetve védettségi célokat szolgálnak, ezért gazdasági hasznuk közvetlenül nem értékelhető. A gazdasági eredmény annak a tevékenységnek a keretében realizálódik, amelynek elvégzését a hatóságok csak akkor engedélyezik, ha a biztonságos alkalmazás feltételei mind sugárvédelmi, mind védettségi szempontból adottak.

Sugárhatáskémiai kutatások (célzott alap kutatás, fejlesztés)

Polimerizációkinetika: Folytatták az izopropilgyök sugárindított addíciójának tanulmányozását akrilát, metakrilát, maleinát és fumarát típusú vegyületekkel, valamint akrilamid származékokkal. Tizenkét folyamat sebességi együtthatóit határozták meg. Összefüggést állapítottak meg a monomer szerkezete és a sebességi együttható értékek között: a fumarátok és a maleinátok között jelentős különbség mutatkozik.

Kutatóév: 0,5. Becsült intézeti ráfordítás: 3,5 MFt, pályázati forrás: 2 MFt.

Ipari szennyvizek sugárzásos ártalmatlanítása: Textil színezék sugárzásos degradációjának vizsgálata során, modellvegyületeket (H-sav, azaz 4-amino 5-hidroxinaftalin 2,7-diszulfonsav és egy származéka) alkalmazva megállapították, hogy mindkét kiinduló vegyület 6-8 kGy sugárdózis hatására gyakorlatilag teljes mértékben elbomlik a vizes oldatban hidratált elektron és hidroxilgyök hatására. Az eredmények alapján perspektivikusnak látják a sugárzásos kezelés és a hagyományos, biológiai kezelés kombinációjának alkalmazását erősen színezt, textilipari és papíripari szennyvíz tisztítására.

Kutatóév: 1,3. Becsült intézeti ráfordítás: 9,2 MFt, pályázati forrás: 2,8 MFt.

Programozott tulajdonságú polimerek: Különböző (NIPAAm-akrilsav) monomerek sugárzásos ojtásával polisztirolra, polietilénre és polietiléntereftalátra olyan felszíneket alakítottak ki, amelyekről a sejt kultúrák enzim alkalmazása nélkül eluálhatnak.

Kutatóév: 1,8. Becsült intézeti ráfordítás: 12,6 MFt, pályázati forrás: 2 MFt.

Katalizátor rendszerek és katalitikus folyamatok vizsgálata

Különböző PROX-katalizátor rendszerek előállítás, szerkezetük és katalitikus tulajdonságaik (célzott alap kutatás)

A szén-monoxid hidrogén jelenlétében lejátszódó preferenciális oxidációja (PROX) hatékony, szelektív katalizátorainak kifejlesztése a tüzelőanyag cellák széleskörű bevezetésének egyik

feltétele. Fontos szerepük van e katalizátoroknak a cellákban használt hidrogén tisztításában. A különböző katalizátor rendszerek szerkezetének, működési mechanizmusának, a folyamat kinetikájának széleskörű – nemzetközi együttműködésben is végzett - vizsgálatai során a következő fő eredményeket érték el:

Különböző módszerekkel kontrolláltan előállított, különböző Au-Ti arányú Au-TiO₂ nanoszerkezeteket tartalmazó AuTiO₂/SiO₂ vizsgálata során kimutatták, hogy a katalizátor a PROX reakcióban aktívabb és szelektívabb, mint a szilícium-hordozó nélküli Au/TiO₂.

Kidolgozták olyan AuPt/TiO₂CeO₂ rendszer előállításának feltételeit, amely lényegesen aktívabb és szelektívabb a Pt-t nem tartalmazó rendszernél. Más feltételek mellett Pt hozzáadása az Au/TiO₂/CeO₂ rendszerhez, csökkenti annak aktivitását és szelektivitását. E különbségeket a felületi nanoszerkezet alapján értelmezték.

TiO₂/Au/Si(100) modellrendszer vizsgálata alapján megállapították, hogy az arany csökkenti a folytonos, zárt TiO₂ fedőréteg katalitikus aktivitását a CO oxidációban az Au/TiO₂ határfelületen fellépő elektron kölcsönhatások következtében. Az arany nanorészecskék hatása a katalitikus tulajdonságokra kisebb, mint a tömbi jellegű arany filmé.

MnO_x és Au/MnO_x katalizátorokat szintetizáltak és kezeltek különböző módszerekkel. Bizonyították a rácsoxigén részvételét a PROX reakcióban, a CO és H₂ adszorpció kompetitív voltát, az aranyak a mangán centrumokat stabilizáló szerepét. Alacsony (50-60 °C) hőmérsékleten nagy szelektivitást tapasztaltak, de az aktivitás kisebb volt, mint a TiO₂ hordozós mintán.

Megállapították, hogy a Pt/CeO₂ CO oxidációs szelektivitása jóval nagyobb, mint Pd/CeO₂-é. Ennek oka a Pd-hidrid képződése miatti jelentős vízképződés, míg Pt/CeO₂ esetében a hordozón van jelentős víz adszorpció.

Értelmezték a katalizátor szelektivitás hőmérsékletfüggésének mechanizmusát és meghatározták az optimális hőmérséklettartományt Pt/CeO₂ (90-110°C) és CuO/CeO₂ (150-170 °C) esetében.

Megállapították, hogy állandó mennyiségű oxigén jelenlétében Pt/CeO₂-n a PROX szelektivitásnak maximuma van a szén-monoxid parciális nyomás függvényében.

Kutatóév: 8. Becsült intézeti ráfordítás: 55,5 MFt, pályázati forrás: 6,5 MFt.

Metán aktiválása Ga/H-ZSM-5 zeolitokon (célzott alapkutatás)

Alapvető cél: a metán aktiválása és nagyobb szénhidrogénekké alakítása során az oxidáció visszaszorítása az oxigénnél gyengébb oxidáló hatású dinitrogén-oxid (N₂O) alkalmazása útján.

Bifunkciós Me/Ga/H-ZSM-5 (Me = Mo, Co, Pt, Ag) katalizátorokon N₂O bontásakor kétféle aktív oxigénformát azonosítottak XPS, TPR, TPD, TPO, TPSR vizsgálatokkal, valamint CO adszorpció útján és reakciókinetikai módszerrel: a zeolit vázba beépülő oxigén (O_a) és a gázfázisba jutó rövid életű aktív tranziens oxigén formát (O_n).

Kimutatták, hogy Mo/Ga/H-ZSM-5 katalizátoron az N₂O 250 °C hőmérsékleten történő bontása révén a zeolit szerkezetbe beépült aktív oxigén – O_a – szobahőmérséklettől kezdve reagál a gázfázisú metánnal; 100 °C hőmérsékleten 6 %-os konverzió mellett 89 %-os szelektivitással aromás szénhidrogének keletkeznek. A 150°C hőmérsékleten kemisorbeált metán szpecieszek 25 %-a N₂O-val reagálnak, és 82 %-os szelektivitással szintén aromás szénhidrogénné alakul át az adott körülmények között túlsúlyban lévő O_n tranziens oxigénformának köszönhetően.

A kétféle aktív oxigénforma kis hőmérsékletű aktivitásban és szelektivitásban játszott szerepének felismerése és bizonyítása jelentős eredmény.

Kutatóév: 2. Becsült intézeti ráfordítás: 17 MFt, pályázati forrás: 2 MFt.

Kétfémes katalizátorok vizsgálata (tisza alapkutatás)

Cél: főleg szénhidrogének átalakításait katalizáló fémek Pt, Pd, Ru, Ge, illetve aktivitás-csökkentő hatású különböző kombinációik katalitikus viselkedésének (szelektivitásának és aktivitásának) vizsgálatával új információk szerzése a katalitikus aktív helyek természetéről. A főbb megállapítások:

Pt felületére leválasztott kis mennyiségű Ge szelektíven blokkolja az (111) szimmetriájú aktív helyeket. Hasonló folyamat játszódik le Ge-Rh kölcsönhatásnál nagy diszperzitású Rh/Al₂O₃ katalizátoron. A kis mennyiségű 1/4-1/2 felületi rétegnek megfelelő ón ugyancsak blokkolja a Rh alacsony Miller-indexű felületi helyeit. Nagyobb mennyiségű ón a Rh katalitikus aktivitását megszünteti, valószínűleg ötvözetfázist képez,

elektrokémiai úton előállított PtRh rendszer a két fém egyes katalitikus tulajdonságait – a Rh aktivitását és a Pt szelektivitását - megtartja,

különböző Pt:Pd arányú hordozómentes katalizátorok szelektivitásában a két fém arányának megfelelő egyedi katalitikus tulajdonságai tükröződnek az akrolein hidrogénezés melléktermékeiben.

A PtGe/Al₂O₃ katalizátoron szénképződés is lejátszódik, amely – ellentétben az egyfémes mintáknál tapasztalt poliénes úttal – C₁ köztiterméken keresztül játszódik le.

Kutatóév: 3. Becsült intézeti ráfordítás: 13,5 MFt, pályázati forrás 2,5 MFt.

Felületi és tömbi szerkezeti kutatások (tisza alapkutatás)

A kutatások célja ismeretek szerzése elsősorban katalitikus reakciók értelmezése céljából:

Nagymértékű azonosságot – többek között felületi π -komplex képződést – állapítottak meg furán, tetrahidrofurán és a gyűrűs szénhidrogének platinán lejátszódó adszorpciójának régebben megállapított mechanizmusa között.

A katalizátor-kén izotópcseré vizsgálatok eredményei azt bizonyítják, hogy a hidroszulfurálás aktív centrumai nem teljesen azonosak a H₂S kemisorpció helyekkel.

⁶⁰Co (gamma-fotonok), illetve nehéz ionokkal (⁸⁴Kr, ²⁰³Bi) történő besugárzás hatásainak kitett Zr és Hf foszfátok, valamint a Ti volframát stabilis, stabilitásukat nagy sugárdózisok mellett is megőrzik, eredeti sajátosságaik (kristályszerkezet, ioncsere képesség, elektromos vezetőképesség) alig változnak. A γ -Ti-foszfát viszont kis dózisok hatására is károsodik: amorf lesz.

Különböző összetételű, szol-gél módszerrel előállított króm-vanádium oxidok szerkezetét, termikus átalakulásait vizsgálták. megállapították, hogy változó Cr/V arányok mellett három összetételnél alakul ki meghatározott összegképlettel leírható homogén szerkezet.

Redukáló, illetve oxidáló kezeléseknek kitett mikropórusos Fe-ZSM-5, Fe-FER, Fe-MCM-22, illetve mezopórusos Fe-MCM-41, Fe-SBA-15 anyagok in situ Mossbauer spektrumainak összehasonlítása azt mutatja, hogy a Fe³⁺/Fe²⁺ redox folyamatban szerepet játszó vas ionok hányadának kialakulásában meghatározó a pórusos anyag szerkezete: a mezo- szerkezetben, az amorf pórusfalakban elhelyezkedők szinte teljesen, míg a mikropórusos szerkezetben levő vas-ionok gyakorlatilag egyáltalán nem vesznek részt a folyamatban.

Kutatószám: 6. Becsült ráfordítás: bér + 4,5 MFt, ebből pályázati forrás: 0,5 MFt.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

A kutató-fejlesztő tevékenység túlnyomó részét nemzetközi és/vagy hazai együttműködésben végzik. A bemutatás együttműködési témakörök szerint történik.

A PROX kutatások az EU FP6 CA „CONCORDE” projekt, illetve MTA-CNR kapcsolat keretében folynak oxid, Au/fémoxid nanodiszperz rendszerek vizsgálata terén svéd, görög, illetve olasz intézményekkel együttműködésben. A 3A/058 2004 NKFP projekt „A hidrogén tisztítására, valamint tárolására alkalmas specifikus anyagok fejlesztése” alprogramja keretében az ELTE Általános Fizika Tanszék, az MTA MFA és a Kémiai Kutatóközpont az együttműködő partnerek. Ebbe a témakörbe tartoznak a CO szelektív oxidációja terén a berlini Fritz Haber Intézettel korszerű felületkémiai módszerekkel végzett vizsgálatok és a kétfémes katalizátorok kutatásában, MTA-CNRS keretben a Poitiers-i Egyetem megfelelő laboratóriuma a fő együttműködő partner. Ukrán-magyar TÉT együttműködésben metán átalakításra alkalmas nanoanyagok tulajdonságait vizsgálták. A katalízis és tömbi szerkezetkutatásokban rendszeres együttműködés alakult ki az ELTE, a SzTE, valamint a KFKI telephely több intézetével.

A PGAA kutatások és alkalmazások terén az együttműködés az EU FP6 keretében és NAÜ támogatással folyik. Főbb együttműködők az EC JRC-IRMM (referencia-anyagokkal foglalkozó EU társult kutatóközponti intézet, Belgium), CEA (Saclay), ILL (Grenoble) a Lawrence-Berkeley és a Lawrence-Livermore nemzeti laboratóriumok, a Kentucky E., német, francia, marokkói laboratóriumok, valamint a KFKI telephely több intézete, az ATOMKI, a Magyar Nemzeti Múzeum, a Litoszféra Kutató Laboratórium. Vizsgálatok folynak OAH megbízásból, továbbá a General Electric és a Mecsekérc Rt számára is.

A sugárbiztonsági kutató-fejlesztő tevékenység terén többek között sokoldalú együttműködés folyik neutron források ellenőrzésében NAÜ „support” program keretében, a nukleáris anyagok illegális forgalmát korlátozó módszerek fejlesztésében, az EC Transzurán Intézetével (Karlsruhe), a roncsolásmentes elemzés témakörében az ESARDA nemzetközi szervezet keretében, az ICP-MS technika terén a Jülich-i Nukleáris Kutatóintézetel. Akadémiai közti együttműködés keretében (MTA - Horvát Tudományos Akadémia) folynak sugárdozimetriai közös kutatások. A hazai együttműködés környezeti (főleg talaj és növény) mintákban hasadó és más radioaktív anyagok meghatározási módszereinek fejlesztését célozza. Fő partnerek: BME Nukleáris Technikai Intézet, ELTE Szervetlen és Analitikai Tanszék, Országos Élelmiszervizsgáló Intézet, ZM Nemzetvédelmi Egyetem. A sugárbiztonsági K+F terén fő hazai partnerek megbízóként: Országos Atomenergia Hivatal, Paksi Atomerőmű Rt, Radioaktív Hulladékokat Kezelő Kht.

A sugárzásos szennyvízkezelés terén közös vizsgálatok folytak magyar-olasz TÉT keretben. NAÜ által koordinált nemzetközi együttműködési projekt keretében színezékek sugárzásos degradációját vizsgálják. Polimerek sugárzásos előállítására és kezelése témában (magyar-török, illetve – magyar-argentin TÉT, MTA-CNR, illetve – Iráni Tudományos Akadémia együttműködések): Polivinil alkohol alapú polimerek készültek sugártechnológiai folyamatellenőrzési célra, polimerizáció kinetikai vizsgálatokat végeztek, cellulóz sugárzásos ojtását végezték, polietilén és polipropilén, valamint vezetőképes polianilin kompozitokat állítottak elő, akrilsav monomerekkel új hordozókat készítettek biotechnológiai alkalmazási céllal. A sugárhatáskémiai kutatás-fejlesztés terén hazai együttműködők: Veszprémi Egyetem Általános és Szervetlen Kémiai Tanszék, BMGE Műanyag- és Gumiipari, valamint Analitikai-kémiai és Kémiai-fizikai tanszékek, továbbá Budapesti Orvostudományi Egyetem Patológiai Intézete.

Az áttekintés azt mutatja, hogy az intézet tevékenységének egészét átfogó elemmé vált a nemzetközi együttműködés mind a kutatás, mind az ahhoz kapcsolódó fejlesztés és alkalmazás terén: A 2005-ben megjelent dolgozatok 60 %-ának szerzői között szerepel külföldi társszerző. A témák túlnyomó többségében folyik nemzetközi együttműködés. Az együttműködés korszerű módszerek alkalmazását teszi lehetővé, elősegíti az intézeti kutatók ismertségét, hozzájárul az intézet nemzetközi elismertségéhez és egyben annak bizonyítéka is.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

NKFP 3A/058-2004 sz. Funkcionalizált felületek fejlesztése és alkalmazása specifikus biokémiai és kémiai rendszerekben - c. projektben az Au-TiO₂, AuPt-TiO₂ és Au-MnO_x rendszerek kidolgozása, és szerkezetük, katalitikus viselkedésük vizsgálata terén elért eredmények a II. fejezetben találhatóak. A pályázatnak külön jelentőséget ad az Izotóp Intézet Kft gyártmányfejlesztési kutatásainak bevonása.

Részt vesznek az EU FP6 CA „CONCORDE” projektben, amely 16 ország 46 kutatóhelyének nanoszerkezetű oxidok katalitikus alkalmazására irányuló kutatásait koordinálja. Az intézeti katalizátor- és katalíziskutatást az OTKA – létrejötte óta elismeri és támogatja. 2005-ben hat OTKA pályázat biztosított további forrásokat az intézeti katalíziskutatáshoz, elnyerésük e kutatások színvonalát bizonyítja.

2005-ben az intézet a következő témákra kapott megbízást az OAH-tól:

- Element2 tömegspektrométer tesztelése és kalibrációja (OAH-ÁNI-ABA-03/05). A készülék analitikai teljesítőképességének felmérése során meghatározták egyes makro- és mikroelemek, továbbá hosszú felezési idejű radionuklidok kimutatási határát. Ez utóbbiak környezeti mintákból való mérésére módszert dolgoztak ki.
- A neutronforrások mérésére kifejlesztett módszer és berendezés tesztelése. A berendezés továbbfejlesztése a magyar NAŰ támogatási program követelményei szerint (OAH-ÁNI-ABA-04/05). Módszert fejlesztettek ki és hitelesítettek az iparban már nem használatos, kiemelten veszélyes PuBe neutron források Pu tartalmának meghatározására. A módszer továbbfejlesztett változatával ismeretlen neutron források is azonosíthatóak.
- Közepes dúsítású uránminták korának gammaspektroszkópiai meghatározása (OAH-ÁNI-ABA-05/05). A csempészett, illetve talált nukleáris anyagok eredetének meghatározása szempontjából kiemelten fontos a minták korának ismerete. A tetszőleges formájú és kémiai összetételű urán tartalmú minták korának meghatározására a világon egyedülálló gamma-spektroszkópiai módszert dolgoztak ki.
- Detektorok készítése, tesztelése, bemérése nagy aktivitású nukleáris anyagok neutron- és gamma-emissziójának vizsgálatához (OAH-ÁNI-ABA-06/05). A Paksi Atomerőmű Rt-ben megsérült üzemanyag kazetták nukleáris anyag tartalmának meghatározására roncsolásmentes, gamma-spektroszkópia és neutronsámlálás együttes alkalmazásán alapuló módszert dolgoztak ki és megkezdték a berendezés ellenőrzését.
- Áttekintés a nukleáris anyagok hazai felhasználásáról (OAH-ÁNI-ABA-07/05). Megkezdték a nukleáris anyagok magyarországi felhasználásáról készülő összefoglaló anyag összeállítását.

E pályázatok mutatják, hogy az intézet az OAH számára végzett folyamatos rutin „háttér” tevékenység mellett rendszeresen vállal és ellát a nukleáris biztonság és védelem garantálását

célzó fejlesztési feladatokat. Az eredmények alkalmazása hozzájárul az ország nukleáris biztonságának és védettségének növeléséhez.

Radioaktív Hulladékokat Kezelő Közhasznú Társaság: „Az ideiglenes nukleáris anyagtároló áttelepítése” c. projekt keretében megkezdték az ipari alkalmazásból kivont PuBe források plutónium tartalmának meghatározását az intézetben kifejlesztett módszer és mérőberendezés segítségével, ami elengedhetetlen e források végleges biztonságos tárolóba helyezéséhez.

Az intézet résztvevője az EU-EURATOM 6-os keretprogramjában szereplő FUNMIG (Fundamental Processes of Migration of Radioisotopes) programnak, melynek alapvető célja a nagyaktivitású radioaktív hulladékok (kiégett nukleáris fűtőelemek) végleges elhelyezését biztosító kutatások elvégzése. A program keretében anionos specieszek kőzetekben lejátszódó diffúzióját vizsgálják.

NAÜ: Poliizopropilakrilamid nanogélek sugárzásos előállítás. A pályázat elfogadása mutatja, hogy az Ügynökség az intelligens polimerek sugárzásos előállítását perspektivikus fejlesztési iránynak tekinti. NAÜ: Neutron Aktivációs Elemzés Referenciális Adatbázisának Fejlesztése. A megbízás ténye mutatja az intézet e téren végzett tevékenysége iránti bizalmat. NKTH NAP VENUS 05 program keretében a PGAA módszer, ezen belül neutron optikai fejlesztések indulnak, amelyek a pályázatban résztvevő vállalatoknak kerülnek átadásra.

V. Az év folyamán megjelent jelentősebb publikációk, szabadalmak és más bemutatható eredmények

1. Guczi L., Frey K., Beck A., Pető G., Daróczi CsS., Kruse N., Chenakin S.: Iron oxide overlayers on Au/SiO₂/Si(1 0 0) Promoting effect of Au on the catalytic activity of iron oxide in CO oxidation, Applied Catalysis A-General, 291, 116-125 (2005)
2. Sárány A., Sajó I., Hargittai P., Papp Z., Tombác E.: Styrene oxide transformation on SO₂-stabilised Ag nanoparticles prepared by gamma-radiolysis, Applied Catalysis A-General 293, 41-48 (2005)
3. Teschner D., Wild U., Schögl R., Paál Z.: Surface State and Composition of a Disperse Pd Catalyst after Its Exposure to Ethylene, Journal of Physical Chemistry B, 109. 20516-20521 (2005)
4. Paál Z., Wootsch A., Schögl R., Wild U.: Carbon accumulation, deactivation and reactivation of Pt catalysts upon exposure to hydrocarbons, Applied Catalysis A-General 282, 135-145 (2005)
5. Sárány Á., Beiler B., László K., Svec F.: Control of pore formation in macroporous polymers synthesized by single-step γ -radiation-initiated polymerization and cross-linking, Polimer 46, 2862-2871 (2005)
6. Lakosi L., Nguyen CT., Bagi J.: Quantitative NDA of isotopic neutron sources, Applied Radiation and Isotopes 63, 681-687 (2005)
7. Fuochi PG., Lavalle M., Marteli A., Corda U., Kovács A., Hargittai P., Mehta K.: Energy Device for monitoring 4-10 MeV industrial electron accelerators, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A, 546, 385-390 (2005)
8. Révay Zs.: Memorial Issue in tribute and to honor the memory of Prof. G. L. Molnár, Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry 265 (2005)

VI. A kutatóhely 2005. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: Kémiai Kutatóközpont, Izotópkutató Intézet

Átlagléttség ¹ :	83	Ebből kutató ² :	38
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			19
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma:			86
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ³ :			77
<i>Ebből</i> idegen nyelvű külföldi folyóiratban:	46	idegen nyelvű hazai folyóiratban:	19
nemzetközi együttműködés keretében:	45	SCI által regisztrált folyóiratban:	63
összesített impakt faktor:	86,73	összes hivatkozás száma ⁴ :	945
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			712
Megjelent könyv:	-	könyvfejezet:	2
<i>ebből</i> magyar nyelven könyv:	-	könyvfejezet:	-
		jegyzet:	-
		jegyzet:	-
Megvédett PhD értekezés:	1	Megvédett MTA doktori értekezés ⁵ :	-
Bejelentett találmányok száma:	-	Megadott szabadalmak száma:	-
<i>ebből</i> külföldön:	-	<i>ebből</i> külföldön:	-
Értékesített szabadalmak száma:			-
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma:	41	poszterek száma ⁶ :	30
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ⁷ :			4
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	6	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	5
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ⁸ :		338,4	MFt
Beruházási támogatás:	-	Fiatal kutatói álláshelyek száma ⁹ :	4
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			10
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	15,6 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			2
NKFP:	2	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	49,7 MFt
Egyéb:	-	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	- MFt
Az év folyamán művelt NFT témák száma ¹⁰ :			1
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	2,2 MFt
Külföldi vagy nemzetközi forrásból művelt témák száma ¹¹ :			4
EU forrásból:	2	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	2,7 MFt
Egyéb:	2	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	1,4 MFt
Egyéb pályázatok keretében művelt témák száma ¹² :			1
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	4,9 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			31
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	95,9 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány ¹³ :			- MFt