

Beszámoló a 2006. évi tudományos tevékenységről



TARTALOM

KÉMIAI KUTATÓKÖZPONT	3
I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben	3
VI. A kutatóhely 2006. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói	5
Biomolekuláris Kémiai Intézet	7
I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben	7
II. Az év folyamán elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények, azok gazdasági-társadalmi haszna	7
III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása	11
IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése	13
V. Az év folyamán megjelent jelentősebb publikációk, szabadalmak és más bemutatatható eredmények	15
VI. A kutatóhely 2006. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói	16
Az intézet kiemelten sikeres kutatási területei 2006-ban	17
Felületkémiai és Katalízis Intézet	21
I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben	21
II. Az év folyamán elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények, azok gazdasági-társadalmi haszna	21
III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása	25
IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése	27
V. Az év folyamán megjelent jelentősebb publikációk, szabadalmak és más bemutatatható eredmények	27
VI. A kutatóhely 2006. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói	29
VI/A. A kutatóhely 2006. évi tudományos teljesítményének egyéb bemutatatható eredményei ..	30
Az intézet kiemelten sikeres kutatási területe 2006-ban	31
Szerkezeti Kémiai Intézet	33
I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben	33
II. Az év folyamán elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények, azok gazdasági-társadalmi haszna	33
III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása	37
IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése	40
V. Az év folyamán megjelent jelentősebb publikációk, szabadalmak és más bemutatatható eredmények	40
VI. A kutatóhely 2006. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói	42
Az intézet kiemelten sikeres kutatási területe 2006-ban	43
Anyag- és Környezetkémiai Intézet	47
I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben	47
II. Az év folyamán elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények, azok gazdasági-társadalmi haszna	47
III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása	53
IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése	54
V. Az év folyamán megjelent jelentősebb publikációk, szabadalmak és más bemutatatható eredmények	56
VI. A kutatóhely 2006. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói	57
Az intézet kiemelten sikeres kutatási területei 2006-ban	59

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	Felületkémiai és Katalízis Intézet	Szerkezeti Kémiai Intézet
1025 Budapest Pusztaszeri út 59/67. (1525 Budapest, Pf. 17.) Tel.:438-1110, Fax: 438-1145 e-mail: ghajos@chemres.hu	1025 Budapest Pusztaszeri út 59/67. (1525 Budapest, Pf. 17.) Tel.: 438-1111, Fax: 438-1143 e-mail: palg@chemres.hu	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		

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

A kutatóközpont fő feladata a kémia és a vele rokon tudományágak (elsősorban az élettudományok, az anyagtudomány, a környezettudományok és a nanotudományok) 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 hazai, ill. az európai iparvállalatokat segítő, a versenyképesség fokozását, korszerű termékek és eljárások kidolgozását szolgáló kutatási programoknak. Ebből a szempontból kiemelkedő jelentősége van a 2004-ben elnyert, „Kémia az életminőség javításáért” c. (GVOP) koordinációs kutatóközponti pályázat feladatai 2006. évi teljesítésének. A kitűzött célok elérését jelentős mértékben segítette az európai programokban való részvétel, illetve az a tény, hogy a központ két intézete európai kiválósági központként működött a biomolekuláris kémiai kutatások és a nanotudományi kutatások területén.

Az MTA Kémiai Kutatóközpont 2006. évi tudományos kutatásait a *funkcionális anyagok kémiai kutatása*, előállításuknak, szerkezetüknek és tulajdonságaiknak vizsgálata foglalta egységes keretbe.

A kutatási tevékenység fő irányai a következők voltak:

- Biomolekuláris és szerves kémiai kutatások, különös tekintettel a biomakromolekulák élettani szerepére, új gyógyszer-hatóanyagok, diagnosztikumok kidolgozására,
- Felületkémiai és katalíziskutatások, különös tekintettel a nanotudományi és nanotechnológiai kutatásokra, illetve alkalmazásokra,
- Szerkezeti kémiai és reakciókinetikai kutatások, különös tekintettel a szupramolekuláris anyagok tanulmányozására és új szerkezetkutatási módszerek bevezetésére,
- Anyagtudományi és környezeti kémiai kutatások, különös tekintettel új, funkcionális anyagok előállítására, környezetbarát eljárások kidolgozására és a hulladékok hasznosítására.

VI. A kutatóhely 2006. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA Kémiai Kutatóközpont

Átlaglétszám ¹ :	360	Ebből kutató ² :	208
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			84
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma:			302
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ³ :			301
<i>Ebből</i> idegen nyelvű külföldi folyóiratban:	208	idegen nyelvű hazai folyóiratban:	5
nemzetközi együttműködés keretében:	109	SCI által regisztrált folyóiratban:	207
összesített impakt faktor:	462,754	összes hivatkozás száma ⁴ :	4310
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			3748
Megjelent könyv <i>magyarul</i> :	0	könyvfejezet:	10
<i>idegen</i> nyelven könyv:	1	könyvfejezet:	40
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Megvédett PhD értekezés:	8	Megvédett MTA doktori értekezés ⁵ :	3
Bejelentett találmányok száma:	4	Megadott szabadalmak száma:	1
<i>ebből</i> külföldön:	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma ⁶ :	151	posztterek száma:	138
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ⁷ :			52
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	30	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	41
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ⁸ :			1631 MFt
Beruházási támogatás:	0 MFt	Fiatal kutatói álláshelyek száma ⁹ :	21
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			42
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			85,7 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			31
NKFP:	10	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	146,3 MFt
Egyéb:	21	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	11,2 MFt
Az év folyamán művelt NFT témák száma ¹⁰ :			15
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			375,7 MFt
Külföldi vagy nemzetközi forrásból művelt témák száma ¹¹ :			16
EU forrásból:	10	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	87,0 MFt
Egyéb:	6	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	12,5 MFt
Egyéb pályázatok keretében művelt témák száma ¹² :			7
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			32,2 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			99
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			293,3 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány ¹³ :			0 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: www.chemres.hu

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

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, szakmai tanácsadás, valamint gyakorlati célú kutatási-fejlesztési feladatok elvégzése.

Az intézet fontos kötelezettségei közé tartozott 2006. évben mind a hazai, mind az európai kutatási pályázatok időszerű feladatainak teljesítése.

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

Nukleotidkémiai és peptidkémiai kutatások

A GVOP által támogatott, hazai konzorciumi együttműködés keretében, módosított uracil-tartalmú oligonukleotidokat szintetizáltak az uracil-DNS endonukleáz (UDE) enzim kötődési tulajdonságainak tanulmányozása céljából. Az említett enzim szubsztrát-specifitásának vizsgálatához egy kettősen jelzett U-tartalmú oligomert (egy hajtú formában stabilis molekuláris jelzőt) is szintetizáltak.

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, majd ezek felhasználásával modell PNS-oligomerek előállítását célzó munkájuk során Pd-katalizált keresztkapcsolások alkalmazásával három új 5-alkinil- és hat új 5-aril-uracil-PNS monomert állítottak elő. Megállapították, hogy az 5-aril-uracil-PNS monomerek előállításánál a normál Stille-kapcsolások hozama magasabb, mint az alternatív inverz Stille- vagy Suzuki-kapcsolásoké.

Az 5-aril-, ill. 5-alkinil-uracil bázisokat tartalmazó peptidnukleinsavak, várhatólag erős és szelektív hibridizációs tulajdonságaik folytán, elsősorban analitikai célra, géndiagnosztikai szerekként (pl. PNS-mikrochipekben) alkalmazhatók különféle kórokozók kimutatására. Ezen kívül, antiszensz vagy antigén oligonukleotidokba beépítve elvileg terápiás célra is alkalmasak lehetnek.

A glikopeptidek kulcsszerepet töltenek be a sejtfelismerési folyamatokban. Kisebb molekulatömegű glikopeptidek szintézisére és gyógyszerként történő felhasználásukra számos sikeres próbálkozás történt. Az O-glikozidos kötést tartalmazó glikopeptidek terápiás célú alkalmazását viszont kémiai és enzimatis instabilitásuk korlátozza. Az anomer pozícióban

formilcsoportot tartalmazó C-glikozidok ezért fontos intermedierjei lehetnek számos biológiai hatékony peptidszarmazék szintézisének. A formilcsoport bevitele azonban, a cukormolekula anomer szén atomjára, meglehetősen problematikus. Az irodalomban leírt eljárások hátrányai – drága alapanyagok, a formilcsoport regenerálásával járó többlépéses reakciók, valamint a ózonolízis erős oxidatív körülményei – korlátozzák ezen módszerek használatát. β -Tetrabenzil- és tetraallil-galaktozil- és glükózil-cianidokból komplex alumínium-hidridekkel (DIBAL, Red-Al) végzett redukív hidrolízissel, telített és telítetlen 1-formil C-glikozidokat állítottak elő. A telítetlen formil C-glikálok redukciójával 2-deoxi-cukor aldehidek állíthatók elő, amelyek értékes intermedierek deoxi-cukrokat tartalmazó gyógyszerek szintézisében. A formil-C-galaktopiranozidból Strecker-reakcióval β -aminonitrilet állítottak elő, amelyekből szilárdfázisú peptidszintézissel peptidlánca építhető C-glikoaminosavak nyerhetők. Víztelen körülmények között aceton-cianhidrin cianid-donor és királis amin reagenssel (S-1-metil-benzilamin) aszimmetrikus Strecker-reakcióban a királis induktor a várt S-konfigurációjú β -aminonitril termék képződését eredményezte tetrahydrofuranban. Fordított diasztereoselektivitást tapasztaltak diklórometánban. *Kutatói kapacitás: 5,5 fő, ebből intézeti állományban: 5,5 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 37 M Ft, ebből pályázati forrás: 8,7 M Ft*

Szintetikus szerves kémiai kutatások

Palládium-katalizált keresztkapcsolásos reakciók vizsgálata során új, piridazinnal kondenzált származékok szintézisét oldották meg. Kimutatták az új származékok antiplazmodiális hatását. Triazinszármazékok körében neurokémiai értékű vegyületeket szintetizáltak, azonosították és meghatározták a szerkezetüket.

Piridingyűrűs ikerionos vegyületek körében új tandem-típusú gyűrűtranszformációt mutattak ki, aminek segítségével korábban nem ismert gyűrűvázak szintézisét oldották meg.

A bifunkcionális, kinin alapú organokatalizátorok alkalmazási körét további Michael-típusú addíciókra is kiterjesztették. Vizsgálták a reakciók mechanizmusát. A reakciók lefutásának leírására új mechanizmust javasoltak.

Fázisjelölési technikát alkalmaztak Lawesson-reagensek feleslegének, illetve maradékának eltávolítása céljából. Így egy régóta fennálló szintetikus problémát sikerült megoldaniuk. A technikát az elmúlt évben továbbfejlesztették, s így a fluoros kémiának egy új változatát sikerült kidolgozniuk.

Kutatói kapacitás: 13 fő, ebből intézeti állományban: 12 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 85 M Ft, ebből pályázati forrás: 12 M Ft

Természetes szerves anyagok kutatása

Vinkaminból kiindulva félszintézissel négy lépésben magvalósították a (-)-vinkapusszin előállítását.

A 8-oxo-ergolén sikeres szintézise alapján olyan, a D-gyűrűben öttagú ergolin-származékot készítettek, mely az eddig nem szintetizált egyetlen klavinalkaloid, a cikloklavin előállításának utolsó intermedierje. Az utolsó lépésként megvalósítandó ciklopropán-gyűrű kialakítását modellvegyületeken tanulmányozva, sikeres módszert dolgoztak ki, melynek alapján a cikloklavint kis mennyiségben kimutatták, izolálták, és szerkezetét igazolták.

A lizergsav-származékok epimerizációjának vizsgálata során eddig nem tapasztalt dimerizáció révén keletkező sztereoizomerek szerkezetének és térszerkezetének tisztázását

követően (NMR- és krisztallográfiai-módszerek révén) a reakció mechanizmusát is felderítették, részben kémiai úton, részben kvantumkémiai számítások segítségével.

Új, glükozidáz-inhibitor hatású polihidroxi-piperidinek és -pirrolidinek enantioszelektív szintézisét továbbfejlesztve, egy francia kutatóhellyel kooperálva, további 12 származékot állítottak elő enantioszelektív úton.

Az alkaloidok enantioszelektív szintézisében az optikailag aktív pipekolsav és származékai fontos intermedierként szerepelnek. Mind magának a pipekolsavnak, észterének, Weinreb-amidjának, mind pedig 4-acetoxi- és 4-hidroxi-származékainak gazdaságos és enantioszelektív előállítását megvalósították. Az epiquinamide nevű, békabőről izolált kinolizidin-vázás alkaloid totálszintézisét racém formában befejezték, s megkezdték a pipekolsav enantiomer származékainak felhasználásával az optikailag aktív alkaloid szintézisét.

Kutatói kapacitás: 5,5 fő, ebből intézeti állományban: 5,5 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 37 M Ft, ebből pályázati forrás: 6 M Ft

Molekulárfarmakológiai kutatások

Meghatározták egy korszerű, leukémia elleni gyógyszer, az Imatinib (Novartis Pharma) szelektív kötődését humán α_1 -savas glikoprotein (AGP) genetikai variánsain. Megállapították, hogy az F1S-variánsnak domináns szerepe van a gyógyszer specifikus kötődésében. Tanulmányozták a lehetséges kötődési gyógyszer-interakciókat.

CD/UV-Vis spektroszkópiás vizsgálatokkal részletesen feltárták a tojásfehérjében található, az emberi szérum AGP-vel homológ fehérje ligandumkötő sajátságait. Megállapították, hogy a két fehérje specifikus kötőhelye nagyfokú szerkezeti hasonlóságot mutat. Igazolták, hogy anti-prion és anti-amiloid hatású gyógyszerek jellegzetes képviselői savanyú poliszacharidokkal (heparin, kondroitin-szulfát) ionos kölcsönhatások által stabilizált nem-kovalens komplexeket hoznak létre.

Karotin-ciklodextrin vízdoldható komplexeket vizsgáltak kiroptikai módszerekkel. Meghatározták a komplexek aggregációs hajlamát, in vitro tesztben jellemezték a komplexek antioxidáns tulajdonságát. HPLC-s analitikai módszert állítottak be a komplex vizsgálatára.

Kutatói kapacitás: 5,6 fő, ebből intézeti állományban: 5,1 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 30 M Ft, ebből pályázati forrás: 1,2 M Ft

Neurokémiai kutatások

Azonosítottak egy glutaminsav által közvetlenül kiváltott, GABA-felszabadulással járó folyamatot, és modellt dolgoztak ki a mechanizmus magyarázatára. A modell az alapkutatást tekintve jelentős előrelépést ér el: közvetlen kapcsolatot teremt a serkentő és gátló agyi folyamatok között. Ugyanakkor az alkalmazott kutatásban is új stratégiát nyújt a fokozott glutaminsav-aktivitással járó agyi rendellenességek (pl. epilepszia, ischemia) gyógyszeres kezelésében.

A gamma-hidroxi vajsav (GHB) hatásmechanizmusát vizsgálták a függőség kialakulásáért felelős agyterületből, a nucleus accumbensből készített szövetszeleteken. Kimutatták, hogy GHB hatására az asztroglia sejtekben kalciumionok szabadulnak fel az intracelluláris kalciumion raktárakból, és az asztroglia sejtek nem vezikuláris transzporttal glutaminsavat adnak le. Kísérleteik rámutatnak a gliasejtek szerepére a függőség kialakulásában, és ezzel új terápiás lehetőségek kidolgozásához szolgáltatnak fontos háttérinformációt.

Célfehérje szerkezeten alapuló protokollt dolgoztak ki vegyületek kötődési kölcsönhatásának *in silico* szkrínelésére. Molekulamechanikai és molekuladinamikai számítási módszerek kombinált alkalmazásával modellezték két célfehérje-bakteriális Glu-transzporter és metabotróp glutaminsav-receptor kötődő farmakofóráját. Kezdeményezésük nagyhatékonyságú, neuroprotektív hatású molekulák tervezésében nyújt segítséget.

Kutatói kapacitás: 8 fő, ebből intézeti állományban: 8 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 58 M Ft, ebből pályázati forrás: 6 M Ft

Farmakobiokémiai kutatások

Szendvics konfigurációban tartott humán és patkány primer májsejtekben vizsgálták endogén vegyületek és xenobiotikumok metabolizmusát és transzportját. Eredményeik igazolják, hogy az *in vitro* körülmények között is a képződő metabolitok a kanalikuláris Mrp2 és a szinuszoidális Mrp3 transzportereken keresztül eliminálódnak, hasonlóan, mint *in vivo* körülmények között. Ez az eredmény igazolja, hogy a transzporterek *in vitro* körülmények között is specifikusan transzlokálódnak a májsejtek membránfelszíneire, és ez a modell alkalmas a transzporterek szabályozásának - gátlásának, aktiválásának - *in vitro* modellezésére. A csoport kutatói által kidolgozott módszer alkalmas arra, hogy a gyógyszerfejlesztések során vizsgálandó potenciális interakciókat előre jelezze. Hozzájárul a transzport folyamatokat érintő toxikus interakciók mechanizmusának felderítéséhez is.

Kutatói kapacitás: 4 fő, ebből intézeti állományban: 4 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 32 M Ft, ebből pályázati forrás: 4,5 M Ft

A Semmelweis Egyetem Transzplantációs és Sebészeti Klinikájával kialakított együttműködés keretében vizsgálják a transzplantációra kerülő (donor) máj gyógyszerlebontó (méregtelenítő) képességét. A diagnosztikai rendszer a gyógyszer-metabolizmusban résztvevő CYP-enzimek aktivitásának és gén-expressziójának meghatározásán (fenotipizálás) alapul. Ezzel lehetőség van arra, hogy vérből történő mérésekkel következtessenek a máj aktuális gyógyszermetabolizáló képességére, valamint arra, hogy előre jelezzék a donor máj esetleges csökkent gyógyszermetabolizáló képességét, ami befolyásolhatja a beteg gyógyszeres kezelését, csökkentve a felesleges gyógyszeres terhelést.

Érzékeny, kvalitatív és kvantitatív LC-MS/MS módszert dolgoztak ki a transzplantált betegeknél immunszuppresszánsként alkalmazott cyclosporin-A(CSA)-nak és metabolitjainak vérből történő meghatározására, ami a klinikai gyakorlatban rutinszerűen alkalmazott mérési technikákat kiegészítve, segít különbséget tenni az alacsony CSA-szint okozta szervkilökődés, valamint a magas CSA- és CSA-metabolit szint okozta toxicitás között.

Megállapították, hogy emberben a dehidroepiandroszteron a PXR (pregnán X receptor) és CAR (konstitutív androsztán receptor) nukleáris receptorok aktiválásán keresztül indukálja a CYP2B6, CYP2C9, CYP2C19 és CYP3A4 enzimeket.

Kutatói kapacitás: 8 fő, ebből intézeti állományban: 4 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 38 M Ft, ebből pályázati forrás: 15 M Ft

Szenzibilizátorok fotodinamikai kutatása

Újonnan szintetizált szenzibilizátorok fotodinamikus hatását vizsgálták sejttenyészetben a daganatos betegségek terápiájában használható gyógyszer(ek) kifejlesztése céljából.

Az edzésnek és a sportolóknál használatos étrend-kiegészítőknek a hatását meghatározták egyes redox paraméterekre és idegrendszeri funkciókra állatmodellekben, hogy megállapítsák azok kihatását a szervezet általános állapotára, különös tekintettel az emlékezőképességre.

Vizsgálták az ellés körülményeinek hatását borjúk és az anyaállatok redox és antioxidáns paramétereire szarvasmarhánál. Megállapították, hogy ezeknek a paramétereknek az újszülöttek egészségi állapota és életbenmaradása szempontjából meghatározó jelentőségük van.

Kutatói kapacitás: 2 fő, ebből intézeti állományban: 2 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 15 M Ft, ebből pályázati forrás: 2 M Ft

Szénhidrátkémiai kutatások

Eljárást dolgoztak ki a klinikai kipróbálás alatt álló Dermavir, terápiás AIDS-vakcina szénhidrát-egységének szintézisére. Ugyancsak eljárást dolgoztak ki a Dermavir-vakcina szénhidráttal módosított polimer komponensének gyártására. Az említettek révén megteremtették a Dermavir-vakcina hazai gyártásának előfeltételeit. Az előzőkön túlmenően másodgenerációs vakcinák kifejlesztéséhez új szénhidrát-egységeket szintetizáltak.

A glikózaminoglikán oligoszacharidok kutatásának területén, szintetizálták a heparán-szulfátnak a prionok kötődésért felelős tetraszacharid egységét. Glikózaminoglikán oligoszacharidok több aza-cukortartalmú analógját is előállították biológiai vizsgálatok céljára.

Kutatói kapacitás: 5 fő, ebből intézeti állományban: 5 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 32 M Ft, ebből pályázati forrás: 15 M Ft

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Hazai kapcsolatok

A hazai MTA-kutatóhelyekkel és a felsőoktatási intézményekkel igen gyümölcsöző együttműködések folynak, ezek mind az oktatás, mind a kutatás területére kiterjednek.

Az oktatómunkában való intenzív részvételüket mutatja, hogy az Intézet 8 kutatója rendszeresen végez oktatási tevékenységet az ELTE-n, ill. a Semmelweis Egyetemen.

Az MTA SZBK Enzimológiai Intézettel, az MTA-ELTE Peptidkémiai Kutatócsoporttal és a MolCat Tudományos Kutató és Fejlesztő Bt-vel együttműködve, kimutatták és jellemezték az uracil-DNS-endonukleáz enzimet. Meghatározták a stabilitását *Drosophila* sejtextraktumokban a fejlődés különböző stádiumaiban.

A „Növényvédőszeres kölcsönhatása humán efflux transzporterfehérjékkel” c. témában a szegedi Solvo Biotechnology partnerintézménnyel együttműködve, megállapították, hogy a klóracetanilid herbicidek szerkezetüktől függően aktiválják az MDR1 ATPase aktivitást. Az MRP1 csak glutation jelenlétében mutatott kölcsönhatást klóracetanilid herbicid metabolitokkal.

Igen eredményes kutatási együttműködések alakítottak ki a Szegedi Tudományegyetem, Mikrobiológiai Tanszékével multidrog-rezisztencia gátlásának vizsgálatára, valamint a Semmelweis Egyetem Orvosi-vegytani Tanszékével kondenzált piridazin-származékok előállítása céljából. Az eredményeket közös publikációkban foglalták össze.

A Semmelweis Egyetemen igen gyümölcsöző kapcsolatokat hoztak létre több területen is. Így pl. a közös kutatások során megállapították, hogy a gamma-hidroxi-vajsav specifikusan

kötődik a *nucleus accumbens*, valamint a *globus pallidus* agymintákból izolált szinaptikus membránfrakcióban. Meghatározták, hogy az edzés, valamint a sportolóknál használatos étrendkiegészítők mely redox paraméterekre és idegrendszeri funkciókra (főleg az emlékezőképességre) vannak hatással állatmodellekben. Ezekről az eredményekről 2006-ban két közös publikációt jelentettek meg.

A Pécsi Orvostudományi Egyetem karotinoidkémiai munkacsoportjával folytatott együttműködés két közös publikációt eredményezett az év folyamán a szemisztetikus karotinoidok szerkezetvizsgálatáról. A Richter NyRt-vel végzett közös munkáról is közös publikációkban számoltak be.

A Szent István Egyetem kutatóival idegi szubcelluláris frakciók elektronmikroszkópiáját tanulmányozták. Az együttműködés eredményeként azonosították a patkányagykéregből izolált mitokondrium frakciót.

Ugyancsak ennek az egyetemnek az Állatorvosi Karával együttműködve, meghatározták a születés folyamán és a röviddel utána változó redox és antioxidáns paramétereket szarvasmarhánál, ami az újszülöttek egészségi állapota és életbenmaradása szempontjából meghatározó jelentőségű.

Az intézet kutatói szervezték meg a budapesti 16. International Symposium on Microsomes and Drug Oxidations (MDO 2006) konferenciát. A rendezvényen 22 országból 391 tudományos kutató vett részt. Részt vettek a 13th FEChem Konferencia, 2006. Sopron megszervezésében is.

A hazai egyetemekkel folytatott kutatások eredményességét a 9, 2006-ban közösen megjelentetett publikáció fémjelzi.

Nemzetközi kapcsolatok

Az intézet nemzetközi együttműködései igen jelentősek mind a tudományos, mind az ipari kapcsolatokat illetően.

A „Várhatóan multidrog rezisztenciát gátló benzotiazolok” c. témában (együttműködő partner: University of Ankara, Törökország) új tiazollal kondenzált gyűrűvázakat szintetizáltak.

Új palládium-katalizált kapcsolással egybekötött gyűrűzárást dolgoztak ki a University of Antwerpen (Belgium) kutatóival.

Az Oakland University, USA kutatóival közösen fluoros Lawesson-reagenseket fejlesztettek ki.

Enzimes reakciók alkalmazását kezdték meg nitrogén-heterociklusok átalakítására a University of Vienna (Austria) biokémiai kutatócsoportjával.

Az „Új glükozidáz inhibitor hatású polihidroxi heterociklusok szintézise és biológiai vizsgálata” c. témában (együttműködő partnerek: École Polytech. Fed. Lausanne, Lab. Glycochim. et Asymm., BCH, Lausanne, Svájc; Université de Paris V. Lab. De Pharmacognoise, Franciaország) új szintézismódszert dolgoztak ki, s 22 új mintát állítottak elő. A minták biológiai vizsgálatát a svájci intézetben végzik.

Japán kutatókkal folytatott tudományos együttműködés keretében (Faculty of Pharmaceutical Sciences, Mukogawa Women's University, Nishinomiya) egy állati eredetű lipokalin, a tojásfehérje α -savanyú glikoproteinje ligandumkötő sajátosságait vizsgálták CD/UV-Vis spektroszkópiával. A munka eredményeit közösen publikálták.

Az 5-HT_{3A} receptormodell tanulmányozását az University of Alaska, Fairbanks (USA) kutatóival közösen folytatják. 2006-ban egy közös publikáció született az eredményekről.

Az University of Turku (Finnország) biokémiai kutatócsoportjával folytatott kutatások, amelynek témája [³H]EBOB kötődésének alloszterikus modulálása GABA_A receptorokon egy közös publikációt eredményezett 2006-ban.

Az Institut für Physiologie, Universitätsklinikum Charité (Humboldt-Universität, Berlin) kutatóival igen eredményes kapcsolatokat sikerült kialakítaniuk az epileptikus folyamatok mechanizmusának feltárásában. Az eredményeket közös publikációban közölték.

Együttműködve a Lengyel Tudományos Akadémia Institute of Pharmacology, Kraków kutatócsoportjával, egy közös publikációt jelentettek meg.

Kínai-Magyar Tét-egyezmény keretében 35 új PDT-vegyületet állítottak elő, meghatározták a szerkezetüket, és elvégezték az in vitro teszteléseket.

Magyar-Szlovén Tét-együttműködésük (együttműködő partner: Ljubljana Egyetem) fő célja a koleszterin homeosztázis és a gyógyszermetabolizmus közti kölcsönhatásra vonatkozó ismeretanyag bővítése. Ezen belül: a gyógyszerhatások következtében a koleszterin homeosztázisában fellépő változások meghatározása transzkriptom és szterol-metabolom szinten. Az ugyanazon sejtekből származó, proteomanalízisre szánt minták további vizsgálata az EU PF-6 Steroltalk program keretében történik.

Megbízásos szerződéses együttműködést folytatnak a Hawaii Biotech amerikai gyógyszerkutató céggel egy lutein származék szérumfehérjekötődésének CD/UV-Vis spektroszkópiás vizsgálatára, valamint egy astaxanthin származék és az emberi 5-lipoxigenáz enzim kölcsönhatásának tanulmányozására (CD/UV-Vis spektroszkópiás és molekulamodellelési módszerekkel). Az együttműködés eddigi eredményeit közös publikációban foglalták össze.

Jelentős volumenű szintetikus szerves kémiai szerződéses kutatásokat végeztek az ALTANA Pharma (Konstanz, Németország) és a Sigma-Aldrich (Steinheim, Németország) cégek részére.

Wellcome Grant támogatásával folyó projekt keretében γ -hidroxivajsav agyi szerepét tanulmányozták. A közös munka eredményeként egy publikációt jelentettek meg.

Az Intézet nemzetközi együttműködéseinek sikerét jól mutatja, hogy 2006-ban összesen 18 publikációjuk jelent meg ezek eredményeiről.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

A hazai K+F együttműködések közül kiemelendők a közös konzorciumi pályázatok (NKTH, Jedlik Ányos pályázat), amelyeket vállalatokkal és egyetemi kutatóhelyekkel (pl. Cyclolab Kft, Pécsi Orvostudományi Egyetem, ELTE Biokémia Tanszék) együtt folytatnak.

A tárgyévben az intézet projekt-tevékenységének legmeghatározóbb eleme a 2005-ben elnyert, „Hatóanyag-tervezés népegészségügyileg kiemelten fontos megbetegedésekben szerepet játszó validált célmolekulák alapján” elnevezésű (MEDICHEM II) NKFP-pályázat témájában végzett kutatás volt. A kilenctagú, ipari partnereket is magába foglaló konzorcium keretében szerves kémiai, biokémiai és orvostudományi kutatások összehangoltan folynak. E hároméves projekt során már eddig is lényeges eredmények születtek érrendszeri, daganatos és idegrendszeri megbetegedések felismerését segítő diagnosztikai eljárások kifejlesztésében. Az új, gyógyhatású molekulák szintézisének tanulmányozása eredményeképpen egy szabadalmi bejelentés is történt.

A „Kémia az életminőség javításáért” c. Koordinációs Kutatóközpont pályázat keretében a kutatási eredmények ipari hasznosításában történtek jelentős lépések, újabb ipari partnereknek a projektbe való bevonása valósult meg.

A „Transporter Explorer” GVOP-projekt keretében bakteriális homológ röntgenszerkezet alapján modellezték a humán gamma-aminovajsav transzporter 1 altípusának háromdimenziós szerkezetét, majd a vegyületet a www.translib.chemres.hu vegyületkönyvtár adatai alapján validálták. Azonosítottak egy L-Glu által közvetlenül kiváltott, GABA-felszabadulással járó folyamatot, és modellt dolgoztak ki a mechanizmus magyarázatára. A modell jelentős tudományos előrelépést jelent: közvetlen kapcsolatot teremt a serkentő és gátló agyi folyamatok között. Ugyanakkor az alkalmazott kutatásban is új stratégiát nyújt a fokozott L-Glu aktivitással járó agyi rendellenességek (pl. epilepszia, ischemia) hatékony gyógyszeres kezelésének megvalósítására.

A „Kardioprotektív nano-formulációk karotinoidok in silico módszerekkel segített molekuláris kapszulázása útján” c. Jedlik Ányos projekt célja, hogy a lipofil karotinoid hatóanyagokat ciklodextrines komplexálás révén vízoldhatóvá tegyék, stabilizálják, aggregációs hajlamukat visszaszorítsák, fokozzák biológiai hozzáférhetőségüket. Ily módon lehetségessé válik egy stabilis, betegbarát, kardioprotektív gyógyszeripari termék előállítása. 2006. év során az intézet kutatói több új módszert dolgoztak ki, melyek közül kiemelkedő jelentőségű a ciklodextrin-karotinoid komplexek antioxidáns aktivitásának mérése vizes közegben, ami lehetővé teszi az összehasonlítást a szabad karotinoid etanolban mérhető antioxidáns hatásával.

Az „Uracil-DNS endonukleáz molekuláris biológiai alkalmazásai” c. GVOP-szerződés keretében jelentős, nukleotidkémiai eredmények születtek. Így az uracil-DNS-endonukleáz (UDE) enzim affinitás-kromatográfiás tisztítására alkalmas ligand kiválasztása céljából a kötődési próbákhoz három olyan, középen uracil-bázist tartalmazó, 13-mer oligonukleotidot szintetizáltak, amelyben az uracil-nukleozid környezetében a cukorrészt, a foszfátrészt, valamint egyidejűleg mindkettőt módosították. Szintetizálták az előbbi oligomerek közös komplementerét is azért, hogy a kötődési próbákat a megfelelő duplexekkel is el lehessen végezni.

A „Steroltalk” EU-program célja olyan új alternatív módszerek kifejlesztése, amelyeknek a segítségével a koleszterinszint-csökkentő gyógyszerjelöltek farmakológiai hatása megbízhatóbban becsülhető, másrészt az esetleges gyógyszerkölsönhatások időben jelezhetők. 2006-ban humán májsejteken beállították és validálták a gyógyszerinterakciók mérésére alkalmas módszereket, valamint két kísérletsorozatot végeztek el egy ismert és egy fejlesztés alatt álló koleszterinszint-csökkentővel. Donorokból származó májsejteken a vegyületek hatását transzkripció, fehérje expresszió és metabolizmus szinteken vizsgálták együttműködésben a konzorciumi partnerekkel.

Az intézet két COST-programban is aktívan részt vesz. Mind a B16 „Reversal of Antibiotic Resistance”, mind a D31 „Organising Non-Covalent Chemical Systems with Selected Functions” projektek „management committee”-jének tagja az Intézet egy-egy vezető kutatója.

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

1. Palkó R, Riedl Zs, Egyed O, Fábián L, Hajós Gy: New facile tandem route to oxo- and thioxo[1,2,4]triazolo[1,5-a]pyridinium salts, *Journal of Organic Chemistry* 71(20): 7805-7812 (2006)
2. Hamza A, Schubert G, Soós T, Pápai I: Theoretical studies on the bifunctionality of chiral thiourea-based organocatalysts: Competing routes to C-C bond formation, *Journal of the American Chemical Society* 128(40): 13151-13160 (2006)
3. Kaleta Z, Tárkányi G, Gömörly Á, Kálmán F, Nagy T, Soós T: Synthesis and application of a fluorous Lawesson's reagent: Convenient chromatography-free product purification, *Organic Letters* 8(6): 1093-1095 (2006)
4. Lasztóczy B, Emri Zs, Szárícs É, Héja L, Simon Á, Nyikos L, Kardos J: Suppression of neuronal network excitability and seizure-like events by 2-methyl-4-oxo-3H-quinazoline-3-acetyl piperidine in juvenile rat hippocampus: Involvement of a metabotropic glutamate receptor, *Neurochemistry International* 49(1): 41-54 (2006)
5. Moldvai I, Gáti T, Szántay CsJr, Szántay Cs: Syntheses of vinca alkaloids and related compounds. 104. A concise synthesis of (-)-vincapusine, *Journal of Organic Chemistry* 71(10): 3768-3772 (2006)

VI. A kutatóhely 2006. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA Kémiai Kutatóközpont, Biomolekuláris Kémiai Intézet

Átlaglétszám ¹ :	72	Ebből kutató ² :	61
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			28
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma:			53
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ³ :			53
<i>Ebből</i> idegen nyelvű külföldi folyóiratban:	44	idegen nyelvű hazai folyóiratban:	0
nemzetközi együttműködés keretében:	18	SCI által regisztrált folyóiratban:	42
összesített impakt faktor:	108,089	összes hivatkozás száma ⁴ :	538
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			468
Megjelent könyv <i>magyarul</i> :	0	könyvfejezet:	0
<i>idegen</i> nyelven könyv:	0	könyvfejezet:	2
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Megvédett PhD értekezés:	3	Megvédett MTA doktori értekezés ⁵ :	1
Bejelentett találmányok száma:	1	Megadott szabadalmak száma:	0
<i>ebből</i> külföldön:	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma ⁶ :	19	posztterek száma:	38
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ⁷ :			8
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	5	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	7
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ⁸ :			384,4 MFt
Beruházási támogatás:	0 MFt	Fiatal kutatói álláshelyek száma ⁹ :	6
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			6
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			16,9 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			3
NKFP:	2	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	88,8 MFt
Egyéb:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	1,7 MFt
Az év folyamán művelt NFT témák száma ¹⁰ :			2
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			5,9 MFt
Külföldi vagy nemzetközi forrásból művelt témák száma ¹¹ :			4
EU forrásból:	2	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	20,8 MFt
Egyéb:	2	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	1,9 MFt
Egyéb pályázatok keretében művelt témák száma ¹² :			4
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			2,9 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			36
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			150,3 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány ¹³ :			0 MFt

Az intézet kiemelten sikeres kutatási területei 2006-ban

Fluoros Lawesson-reagensok kifejlesztése

A szerves szintetikus kémiai gyakorlatban - ipari és laboratóriumi méretekben egyaránt - a sikeres reakció végrehajtása a szintézis első részlépése csupán, amit azután a reakcióelegy feldolgozása követ. Ez a második folyamat gyakran komolyabb kihívást jelent, s ezért számos erőfeszítést történik annak érdekében, hogy a feldolgozási lépések egyszerűbbé váljanak. A probléma megoldásának kézenfekvő módja, ha a feldolgozás lehetőségét integráljuk a molekulába, vagyis ún. *fázisjelölő csoportokat* építünk be a célmolekulába (katalizátorba, reagensbe).

A heterogenitás problémájára adott válaszok közül a legjelentősebb a *fluoros kémia* alkalmazása, amely abban hozott jelentős áttörést, hogy lehetővé tette a reakciók homogén fázisban történő lefutását. E módszerben a célmolekulához "szuperhidrofób" perfluoroalkil-csoportokat (teflondarabok, amelyek kémiai szempontból inerte) csatolnak, s így a reakció homogén közegben mehet végbe. Az elválasztás alapja tulajdonképpen a „hasonló a hasonlóban oldódik” elve.



1. ábra

A fluoros Lawesson-reagens egyszerű eltávolítására szolgáló szűrőberendezés

Az MTA Kémiai Kutatóközpontjának Biomolekuláris Intézetében folyó kutatások egyik célkitűzése ennek a fluoros módszernek a kiaknázása volt. Elsőként egy, a szintetikus gyakorlatban régóta ismert vegyületnek, a Lawesson-reagensnek a fluoros változatát fejlesztették ki. A Lawesson-reagens széles körben elterjedt és népszerű tionálási reagens, azonban alkalmazása szinte minden esetben nehézkes kromatográfiás tisztítási lépést von maga után. A szakirodalomban számos próbálkozás található, amelyeknek célja az, hogy a reagens feleslegét, illetve maradékát valamilyen extraktív úton eltávolítsák, de gyakorlatilag ezek az utak nem jártak sikerrel.

Az MTA KK Biomolekuláris Intézet kutatóinak, egy nemzetközi vegyipari céggel összefogva, elsőként sikerült kifejleszteniük egy olyan fluoros Lawesson-reagenst, amelyet extraktív úton, fluoros szilikagélt használva, gyorsan és hatékonyan lehet eltávolítani a reakcióelegyből (1. ábra). Vizsgálataik során külön hangsúlyt fektettek arra, hogy a módszert mg-os méretű reakciókban is tudják alkalmazni. Ennek köszönhetően, illetve a mikrohullámú technikát felhasználva, lehetővé tették, hogy a reagenst kombinatorikus molekulakönyvtárak előállítására is felhasználják. Az előzőekben vázolt eredményekből eddig három, nemzetközi folyóiratban megjelent és máris igen gyakran idézett közlemény, továbbá egy szabadalom született.

Publikációk

Hamza A, Schubert G, Soós T, Pápai I: Theoretical studies on the bifunctionality of chiral thiourea-based organocatalysts: Competing routes to C-C bond formation, *Journal of the American Chemical Society* 128(40): 13151-13160 (2006)

Kaleta Z, Tárkányi G, Gömöry Á, Kálmán F, Nagy T, Soós T: Synthesis and application of a fluorous Lawesson's reagent: Convenient chromatography-free product purification, *Organic Letters* 8(6): 1093-1095 (2006)

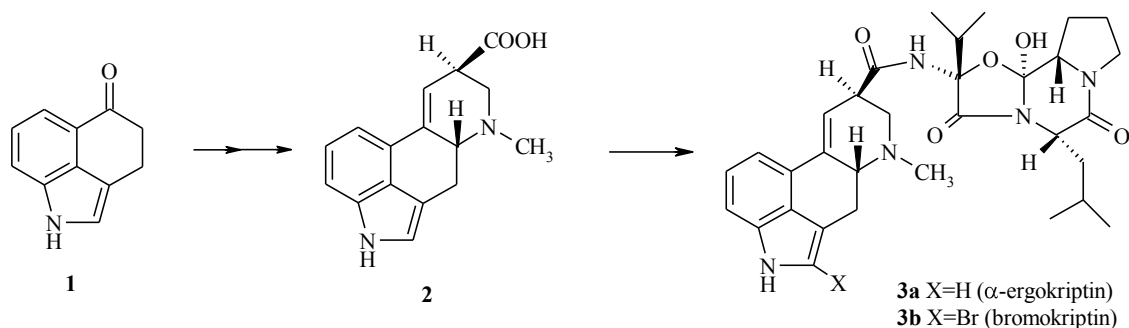
Kaleta Z, Makowski BT, Soós T, Sembinski R: Thionation using fluorous Lewesson's reagent, *Organic Letters* 8(8): 1625-1628 (2006)

A (+)-lizergsav és az α -ergokriptin sztereoszelektív totálszintézise

Lévén, hogy az anyarozs alkaloidoknak kiemelkedően jelentős biológiai aktivitásuk van, nem meglepő, hogy nagy erőfeszítések történtek és történnek, hogy megvalósítsák ezeknek az alkaloidoknak a totálszintézisét. Enantio-hatékony és ipari méretekre is nagyítható eljárást eddig azonban senkinek sem sikerült kidolgoznia. Ezért kiemelkedő eredménynek tekintendő a (+)-lizergsav-nak (**2**) és az α -ergokriptin-nek (**3a**) az intézet munkatársai által kidolgozott szintézise. Az eredményeknek különleges jelentőséget kölcsönöz az a tény, hogy az utóbbi vegyületből nyerhető az évi mintegy félmilliárd USD forgalmat képviselő bromokriptin (**3b**) származék.

Az intézetben végzett kutatások során az elmúlt években az ergolinváz szintézisére Uhleketonból (**1**) kiindulva három egymástól eltérő, független eljárást sikerült kidolgozniuk. Ezek egyike az optikailag aktív, a természetes anyaggal mindenben megegyező (+)-lizergsav (**2**) szabadalomképes előállításához vezetett. Bár a Sandoz Gyógyszergyár kutatói korábban

leírták az ergokriptin előállításához szükséges peptid-rész szintézisét, az intézetben ennek az eljárásnak a szelektivitását lényegesen megnövelték, és a (+)-lizergsavval történő kapcsolást jelentősen továbbfejlesztették. Az eljárást vázlatosan az alábbi képletsor mutatja be:



Publikációk:

Moldvai I, Temesvári-Major E, Gács-Baitz E, Incze M, Dörnyei G, Szántay Cs: New routes to clavine-type ergot alkaloids. Part 1. First total synthesis of three natural products: (+)-setoclavine, (+)-isocetoclavine, (-)-9,10-dihydroisocetoclavine, and structure correction of the latter, *Heterocycles* 67(1): 291-298 (2006)

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)

Moldvai I, Temesvári-Major E, Incze M, Szentirmay É, Gács-Baitz E, Szántay Cs: Enantioefficient synthesis of alpha-ergocryptine: First direct synthesis of (+)-lysergic acid, *The Journal of Organic Chemistry*, 69(18), 5993-6000 (2004)

Benyújtott szabadalom:

Szántay Cs, Moldvai I, Temesvári-Major E, Incze M, Gács-Baitz E: *Eljárás (+)-lizergsav szintetikus előállítására*, P00400481 (Richter Gedeon Vegyészeti Gyár Rt., 2004)

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: www.chemres.hu

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

Nemzetközi színvonalú tudományos kutatások folytatása a felületkémia és a heterogénkatalízis-kutatás területén, különös tekintettel a határfelületekre, az aszimmetrikus katalízisre, a nanodimenziójú 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.

Az intézet kiemelkedően fontos tevékenységi területe volt 2006. évben a hazai, illetve az európai kutatási pályázatok aktuális feladatainak teljesítése.

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

Korróziógátló rétegek kutatása

Korrózióvédő és tapadásjavító, kromáthelyettesítő vékonyrétegeket fejlesztettek ki tiszta alumínium felülethez, és megvizsgálták ezen rétegek alkalmazhatóságát az AA 2024 T3 ötvözetben. A munka az INTAS-AIRBUS 04-80-7219 projekt keretében zajlott. Langmuir-Blodgett és önszerveződő molekuláris nanorétegeket alkalmaztak a korrózió és a mikrobák megtapadásának csökkentésére.

A korábban kifejlesztett, nagy hatékonyságú korróziós inhibitorkeverékek hatásmechanizmusát tanulmányozták nagy kloridion koncentrációjú hűtővizekben, a Petroleum Research Center (Tripoli, Líbia) megbízásából. A projekt részeként líbiai kutatók a magyar kutatóhelyen továbbképzésben vettek részt.

Passzívált vasfelületen kialakított foszfonát-védőrétegek Mössbauer-spektroszkópiai vizsgálata alapján megállapították, hogy a vas-foszfonát réteg vastagsága nem kimutatható; aktívabb, párologtatott és ionimplantált Fe⁵⁷-réteget használva viszont a vas(II)-foszfonát és a vas(III)-foszfonát réteg is kimutatható. Az ELTE Magkémia Tanszékkal együttműködve kimutatták, hogy az ionimplantálás során amorf vas is képződik, aminek az aktivitása lényegesen nagyobb, mint az α -vasé.

Kutatói kapacitás: 10 fő, ebből intézeti állományban: 8 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 48 M Ft, ebből pályázati forrás: 18 M Ft

Szenzorok és nanokompozitok kutatása

Gyors hűtéssel előállított fém-kerámia nanokompozitokról és porkohászati úton feldolgozott Al-kompozitokról kimutatták, hogy mechanikai tulajdonságaik jobbak, mint a hagyományos Al-termékeké, és előállításuk a javasolt technológiával megoldható. Az eredmények konzorciumi együttműködések (GVOP/ALUNANO, Jedlik/ALUTITAN) keretében hasznosulnak.

Egy, az egészségre veszélyes gázok kimutatására szolgáló, széles spektrumú, vegyi jelző, laboratóriumi szenzorcsoportot impedanciaspektroszkópiai mérésekkel minősítettek. Meghatározták a szenzorok érzékenységét, az optimális frekvenciákat, vizsgálták a reverzibilitást és a válaszidőt.

Kutatói kapacitás: 4,5 fő, ebből intézeti állományban: 4,5 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 28 M Ft, ebből pályázati forrás: 13 M Ft

Szén-nanocsövek kutatása

Elméleti kémiai módszerekkel kimutatták, hogy a (2,2), (3,3) és a (4,4) „karosszék” típusú szén nanocsövek jóval aromásabbak, és ezért addíciós reakciókkal kevésbé módosíthatók, mint a nekik megfelelő, azonos számú szenet tartalmazó derékszögű, grafit síkrácsok. E számítások a szokásos kvantumkémiai módszerekkel nem lettek volna elvégezhetőek a vizsgált rendszerek nagy méretei miatt. A számítások alapján érthető, hogy miért állítható elő a szén nanocső, míg kisméretű grafit síkrácsot eddig még nem sikerült izolálni. Az eredmények a nanocsövek funkcionálizálása szempontjából fontosak, mert segítségükkel ki lehet szűrni azokat a típusokat, amelyek várhatóan nehezebben, ill. könny(ebb)en módosíthatók, mint a „karosszék” szén nanocső.

A szén-nanocső/polimer nanokompozit kombinációkat nanoindentációval és AFM-mel vizsgálták. Megállapították, hogy a keménységet növeli a nanocső hozzáadása, de a kopásállóságot rontja. A szén-nanocső kémiai módosításait ugyancsak nemzetközi projekt (PolyCond) keretében végezték, ami a polimerek elektromos vezetőképességének javítására irányul.

Kutatói kapacitás: 2 fő, ebből intézeti állományban: 2 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 8 M Ft, ebből pályázati forrás: 7 M Ft

Oxidáz enzimek funkcionális modellezése

A kobaloxim(II) és ferroxim(II) komplexek esetében megfigyelt pirokatechin-oxidáz és fenoxazinon-szintetáz típusú aktivitás vizsgálatát kiterjesztették vas(II)- és mangán(II)-dioximátokomplexekre. Megállapították, hogy a dioximáto-vas(II) komplexek metanolos oldatban katalizálják a 3,5-di-*terc*-butil-pirokatechin oxidációját a megfelelő benzokinon származékká. A dioximáto-mangán(II) komplex önmagában nem reagál dioxigénnel, és nem is katalizálja a 3,5-di-*terc*-butil-pirokatechin és a 2-amino-fenol oxidációját *o*-benzokinonná, ill. amino-fenoxazinonná. Ha a mangán(II)komplexet a szubsztrátumok és a trietil-amin dioxigénnel reagáló elegyeihez adjuk, akkor mindkét esetben az oxidáció sebessége jelentős mértékben megnő. Ennek oka egy új reakcióút megjelenése a bázis és a Mn-komplex kölcsönhatásának következtében, ez az ún. "mangán-aktivált báziskatalízis", amit a kutatócsoportnak elsőként sikerült megfigyelnie.

Kutatói kapacitás: 2 fő, ebből intézeti állományban: 2 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 11 M Ft, ebből pályázati forrás: 2 M Ft

Vékonyrétegek kutatása

Fotoplasztikus vékonyrétegeket, As–S kalkogenid üvegeket vizsgáltak nemzetközi együttműködés keretében és az összetétel függvényében különleges viselkedést találtak.

Kopásálló vékonyrétegek nanoindentációval és AFM-mel történő vizsgálata során megállapították, hogy a többkomponensű nanokompozit-rétegek kemények, de nem lyukmentesek, és tulajdonságaik inhomogének. A munka EU-együttműködés keretében (EXCELL) tovább folytatódik.

Komplex szerkezetű vékonyrétegek vizsgálatára alkalmas spektrális ellipszométert helyeztek üzembe. Az *in situ* elektrokémiai mérőegyüttes felépítése jelenleg folyik.

Kutatói kapacitás: 4 fő, ebből intézeti állományban: 3 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 23 M Ft, ebből pályázati forrás: 19 M Ft

Heterogénkatalitikus kutatások

2006. évben további vizsgálatokat végeztek a CO alacsony hőmérsékletű oxidációjában mind hidrogén jelenlétében (PROX reakció), mind hidrogén jelenléte nélkül. A PROX reakcióra hét komponensből (A, Pb, V, Y, La, Ce, Sm) álló katalizátor-könyvtárat terveztek. Összesen hat generációt vizsgálva jelentősen növelték a katalizátor aktivitását és szelektivitását. Kimutatták, hogy az eltérő előkezelési módszerek jelentős mértékben megváltoztatják az optimális katalizátorösszetételt. A héliumos előkezelés jelentős mértékben csökkentette az arany-, de növelte a vanádiumtartalmat. A katalizátorok fő komponensei az alábbiak: Au, Pb, Sm és V.

Kimutatták, hogy az Au/MgO, Au/Al₂O₃ és Au/SiO₂ katalizátorok redox jellegű fémoxidokkal való módosítása során a katalitikus aktivitás tovább növelhető, kimutatták a Mn, Fe, Co és Sn aktivitásnövelő hatását. A katalizátorok előkezelése során végbemenő változásokat *in situ* FTIR- és TEM-mérésekkel követték.

Folytatták a piroszőlősav-etilészter heterogénkatalitikus aszimmetrikus hidrogénezésének tanulmányozását. Új, platinatartalmú heterogén katalizátorokat vizsgáltak. A vizsgálatokban a fő hangsúlyt a reakciókinetikai összefüggések feltárására helyezték. Ezen túlmenően kinetikai és spektroszkópiai vizsgálatokat, valamint kvantumkémiai számításokat végeztek a cinkonidin-dimer képződésére vonatkozóan.

Nemzetközi együttműködés keretében folytatták a metán alacsony hőmérsékletű oxidációjában kombinatorikus úton tervezett, többkomponensű Au-Pt-Pd/CeO₂ katalizátorok XPS-módszerrel történő jellemzését. Ezen méréseket kiegészítették a PROX reakcióra kifejlesztett többfémű Au-Pb-V-Sm/MgO katalizátorok vizsgálatával.

Vizsgálatokat végeztek folyadékfázisban krotonaldehid krotilalkohollá történő szelektív hidrogénezésére. Különböző katalizátormérgek szelektivitást növelő hatását vizsgálták.

Nemzetközi együttműködésben vizsgálták a Pt/C katalizátorok germánium tetra-alkilekkel történő módosítását. A módosított katalizátorokat szénhidrogének átalakulásaiban, illetve szelektív hidrogénezési reakcióban tesztelték.

Kutatói kapacitás: 9 fő, ebből intézeti állományban: 9 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 80 M Ft, ebből pályázati forrás: 5 M Ft

Mikro és mezopórusos anyagok kutatása

Kidolgozták a 2005-ben kifejlesztett új, szelektív alkánizomerizációs zeolitkatalizátorok (Ni-MCM-22, Ni-beta) ipari reaktorokban alkalmazható szilárdságú katalizátortestekké formázásának technológiáját. Az aktív katalizátort kötőanyaggal homogenizálták, extrudálták, majd hőkezelték. Meghatározták azokat az összetételeket és formázási műveleteket, melyek alkalmazása mellett a leginkább megőrizhető volt az aktív komponens aktivitása és hidroizomerizációs szelektivitása. A formázott katalizátorokkal a kutatás–fejlesztésben együttműködő partner, a SZIKKTI Kft., a Mol Rt. paraffinmentesítő GOKIII üzeme katalizátortöltetének cseréjére kiírt versenytárgyaláson kíván indulni 2007-ben.

Katalizátort fejlesztettek ki illékony szerves vegyületek és/vagy ammónia emissziójának oxidatív katalitikus ártalmatlanítására. A fejlesztés eredményeire alapozva megépítették egy, a munka és környezetvédelmi követelményeket kielégítő fogtechnikai laboratóriumi kemence prototípusát. A kutatás–fejlesztésben partner Kalória Kft. a kemence piaci bevezetésén dolgozik.

Kutatói kapacitás: 4 fő, ebből intézeti állományban: 3 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 23 M Ft, ebből pályázati forrás: 23 M Ft

Nanoszerkezetű fémkatalizátorok kutatása

Metanol, etanol és pentanol adszorpcióját tanulmányozták $\text{TiO}_2(110)$ egykristályfelületen összegfrekvencia-keltési spektroszkópiával (SFS). Megállapították, hogy az alkalmazott kísérleti körülmények között a vizsgált alkoholok molekuláris fiziszorpcióval kapcsolódnak az oxidfelülethez.

Titán-dioxidon, kvarcüvegen és kalcium-fluoridon lejátszódó aminosav-adszorpciók összehasonlítása során megállapították, hogy míg a TiO_2 -on a savas oldalláncú aminosavak jól kötődő monoréteg formájában adszorbeálódnak, SiO_2 -on gyakorlatilag nincs adszorpció, CaF_2 -on pedig az adszorbeátumok kisméretű kristályokat képeznek. A megfigyelés feltehetően kapcsolatba hozható a TiO_2 biokompatibilis viselkedésével. Megállapították, hogy a TiO_2 -on kialakult adszorbeált réteg megváltoztatja a felület elektromos tulajdonságait, amennyiben az izoelektromos pontot eltolja.

Amorf SiO_2 hordozóra és kvarcprizmára párologtatott arany vékonyrétegen kéntartalmú szerves molekulák (oktadekántiol, dodekántiol, cisztein, tiofén, 2-tiofén-acetonitril, glutation) adszorpcióját vizsgálták SFS- és röntgenfotoelektron-spektroszkópia (XPS) segítségével. Hosszú szénláncú tiolok esetében az SFS-mérések alapján rendezett, homogén réteg kialakulása állapítható meg, míg a többi molekula esetében csak az XPS-spektrumok adtak információt az adszorpcióról.

SiO_2 -hordozón kialakított Au- TiO_2 -határfelületen történő PDDA (polidialildimetilammóniumklorid)-adszorpció modellezésére kvarcprizma/víz és kvarcprizma/vizes PDDA-oldat határfelületeken végeztek SFS-méréseket teljes belső visszaverődési geometriában. Megállapították, hogy a negatív felületi töltéssel rendelkező kvarc a különböző pH-jú oldatokban a vízmolekulákat eltérő módon orientálja. További kísérleteikkel a PDDA-adszorpciójának további részleteit (kvarcfelület áttöltődése, adszorpciós réteg kialakulása) fogják vizsgálni.

Koleszterinmolekulák elhelyezkedését, rendezettségét és orientációját vizsgálták különböző összetételű lipid (zsírsav és foszfolipid) monorétegekben SFS-módszerrel. Az eredményekből arra következtettek, hogy a réteg összenyomásával először a lipidmolekulák alkilláncjai rendeződnek, majd ezt követi a koleszterinmolekulák rendeződése. Nagy valószínűséggel

tehát a lipidmolekulák alkiláncai közötti hidrofób kölcsönhatások erősebbek az ezen alkilánkok és a koleszterinmolekulák közötti kölcsönhatásoknál.

Kutatói kapacitás: 4 fő, ebből intézeti állományban: 4 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 25 M Ft, ebből pályázati forrás: 6,8 M Ft

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Hazai kapcsolatok

Az intézetnek széles körű hazai együttműködései vannak. Ezekben egyetemi, valamint MTA-kutatóhelyi csoportok, továbbá vállalati partnerek vesznek részt.

Igen intenzív oktatómunkát folytatnak, elsősorban a BME-n, de részt vesznek az ELTE és a Pannon Egyetem Ph.D. iskolája oktatási feladatainak teljesítésében is. Összesen: 8 kutató vesz részt az oktatómunkában.

Kutatási együttműködések jelentősek, pl. a BME Fizikai Kémia Tanszékével, amellyel „Speciális tulajdonságokkal rendelkező nanostrukturált vékonyrétegek előállítása nedves kolloidkémiai eljárásokkal” c. közös OTKA-kutatási témában dolgoznak együtt.

Az ELTE Magkémiai Tanszékével a „Foszfónát védőrétegek vizsgálata Mössbauer-spektroszkópiával” c. témában született eredményeiket két folyóiratcikkben foglalták össze.

Eredményesen működnek együtt az ELTE Nukleáris Módszerek és Szerkezeti Kémiai MTA Kutatócsoportjával a "Hordozós Sn-Pt katalizátorok Mössbauer spektroszkópiai vizsgálata" c. témában, valamint a Pannon Egyetemmel a szilárd NMR-vizsgálatok területén.

Az ELTE Kolloidkémiai Tanszékkel együttműködve, polimerek és tenzidek határfelületi szerkezetének vizsgálatáról egy közös publikációban számoltak be.

Az egyetemi kutatókkal közösen 2006-ban 6 közleményt publikáltak.

Nemzetközi kapcsolatok

Az intézetnek hagyományosan széles körű és eredményes nemzetközi tudományos kapcsolatai vannak. A kapcsolatoknak TÉT-együttműködési, ill. kétoldalú, akadémiák közötti szerződések adnak keretet.

MTA-szlovén akadémiai, kétoldalú együttműködésben (partnerintézmény: National Institute of Chemistry, Ljubljana, Szlovénia) geometriai adatokat szerkesztettek királis szén nanocsövek elektronszerkezetének kvantumkémiai számításához.

Nanocsövek kémiai tulajdonságait modellezték az MTA-Horvát Tudományos Akadémia közötti együttműködés keretében (együttműködő partner: Institute Rudjer Bošković, Zágráb, Horvátország). Az eredményeket két közös publikációban jelentették meg.

„A nanocsövek kémiai tulajdonságainak modellezése” c. témában, az MTA-Román Tudományos Akadémia közötti együttműködés keretében közös előadásokat tartottak nemzetközi konferenciákon.

„A korrózió mikroelektrokémiai vizsgálata” c. témában potenciális inhibitorokat vizsgáltak a University La Laguna, Tenerife kutatóhellyel magyar-spanyol TÉT-egyezmény keretében.

„A réz új korróziós inhibitorai– Csökkenthető a környezeti kockázat?” c. témában, magyar-horvát TÉT-egyezmény alapján új korróziós inhibitorokat fejlesztettek ki. Az eredményekről négy közös publikációt jelentettek meg.

„A különböző fémek mikrobiológiai korróziója – a folyamat gátlása és gazdasági szempontok” c. magyar-portugál Tét-szerződés keretében a University of Lisbon kutatóival a mikrobiológiai korrózió gátlására alkalmas új, gazdaságilag is versenyképes inhibitorokat fejlesztettek ki. Az eredményeket két közös publikáció foglalja össze.

Az „Új, heterogén katalizátorok kifejlesztése finomkémiai reakciókhoz” c. témában argentin-magyar Tét-egyezmény keretében (együttműködő partner: CINDECA, La Plata) nagy áteresztőképességű reaktorrendszerben vizsgálták az acetofenon hidrogénezését folyadékfázisban mind Pt/SiO₂, mind önnal módosított katalizátorokon.

Az MTA-CSIC együttműködésben (együttműködő partner: Instituto de Catalysis y Petroleoquímica, SCIC, Madrid) "Hordozós aranykatalizátorok előállítása és vizsgálata oxidációs reakciókban" c. témában elvégzett XPS-vizsgálatok lehetőséget adtak az Intézetben előállított katalizátorok szerkezetének felderítésére. A magyar fél kiterjedt vizsgálatokat végzett a spanyol fél által előállított hordozós aranykatalizátorokon szénmonoxid oxidációjában. Az eredményekről közös publikációban számoltak be.

Az Instituto de Investigaciones en Catálisis y Petroquímica (INCAPE), Santa Fe kutatóival folytatott, "Nanostrukturált kétfémes hordozós katalizátorok előállítása és vizsgálata" c. téma legújabb eredményeit közös publikációban foglalták össze.

A líbiai Petroleum Research Center, Tripoli kutatóival a "Kombinatorikus módszerek alkalmazása katalizátorok tervezésére" és a "Szénhidrogén frakciók oxidatív kénmentesítése" c. témákban dolgoznak együtt. 2006-ban egy közös publikációt jelentettek meg.

Az „Új zeolit és zeolit-szerű anyagok előállítása és szilárd-fázisú módosítása” c. témában, MTA-kétoldalú egyezményes keretben az együttműködő partnerintézménnyel (Institute of Organic Chemistry, Bulgarian Academy of Sciences, Szófia) a kutatások eredményeiről közös publikációban számoltak be.

A „Membránreaktorokban alkalmazható, módosított zeolitmembránok előállítása és jellemzése” c. magyar-görög Tét-egyezményes témában (együttműködő partnerintézmény: Foundation for Research and Technology Hellas, Institute of Chemical Engineering and High Temperature Chemical Processes, Patra) több kölcsönös tanulmányutat tettek, előadásokat tartottak. A közös eredményekről egy publikációt állítottak össze.

Argentin-magyar Tét-egyezmény (együttműködő partnerintézmény: INCAPE, FIQ, UNL-CONICET, Santa Fe) keretében az „Indium szerkezetek jellemzése indium és indium-palládium zeolitokban” c. témában több szemináriumi előadás tartottak, és egyeztették a közös munkatervet.

A University of Michigan, Ann Arbor (USA) kutatóival közösen részletes modellszámításokkal elemezték az SFS-módszer révén nyerhető orientációs információ jellegét, és megmutatták, milyen lineáris és nemlineáris optikai módszerek kombinált használatával válik lehetővé a határfelületi adszorbeátumok orientációeloszlásának eddiginél pontosabb megadása. Az erről szóló publikációt közlésre benyújtották. Megállapították, hogy a töltött felületen adszorbeálódott Faktor XII elnevezésű fehérje molekulái speciális rendeződést mutatnak, ami egyben aktiválja is őket.

A széles körű nemzetközi kutatási együttműködések eredményeként 2006-ban 10 közös publikációt jelentettek meg.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

GVOP-projekt keretében „A katalitikus technológiák környezetterhelésének csökkentése új, hordozós nikkelkatalizátorok kifejlesztésével” c. témában új, szelektív alkán-hidroizomerizációs katalizátorokat dolgoztak ki az együttműködő partnerintézményekkel (SZIKKTI Szilikát és Kerámia Anyagkutató és Fejlesztő Kft., Budapest; Kalória Hőtechnikai Kft.). Az eredményekről közös publikációt is megjelentettek.

Ugyancsak GVOP-projektben „Új, szennyvíz- és iszapkezelésre alkalmas adalékanyag előállítása a rudabányai vasérc-dúsító meddőjének kémiai feldolgozásával” c. témában eljárást fejlesztettek ki flokkulálószerként alkalmazható vas(III)-klorid oldat gyártására az együttműködő partnerekkel (Multiprojekt Fejlesztő, Vállalkozó, Kivitelező Kft., Budaörs; Jelen és Jövő Kft, Szeged).

Az intézet a HUNN Sixth Framework Programme-Hungarian Network of Excellent Centers on Nanosciences c. projekt koordinátora. A projektben 13 intézmény vesz részt, ebből 7 magyar (MTA KK, BME, ELTE, Miskolci Egyetem, Debreceni Egyetem, Szegedi Tudományegyetem, BAYATI) és 6 külföldi intézmény (SciTech Link Svédország; Tel Aviv University, Izrael; NMRC, Cork, Írország; Lund University, Svédország; Atomic Energy Commission Grenoble, Franciaország, és University of Newcastle, Nagy-Britannia). A projekt célja egy virtuális magyar nanotudományi központ létrehozása, amelynek a feladata a Magyarországon nanokutatással foglalkozó intézmények hálózatának, kölcsönös információcseréjének kialakítása, adatbázisok létrehozása, kutatócserék elősegítése, közös oktatási anyagok kialakítása és a magyar részvétel elősegítése a keretprogramban. Fontos feladatuk volt a kutatóintézetek és a nanotechnológiával foglalkozó vállalati szakemberek munkájának összehangolása, ami pl. az ún. „Technological Transfer Day” keretében történt. Nagy hangsúlyt helyeztek a hazai kis- és középvállalatok bevonására. Az oktatási program keretében a svéd projektmenedzser mind az FP6-os, mind az FP7-es programírásról egy-egy napos iskolát tartott.

A CHEXTAN - Chiral expression and transfer at the nanoscale (Marie Curie-program) és az EXCELL - Network of excellence - to overcome the fragmentation of European research in multifunctional thin films (Network of Excellence) programok lehetőséget adtak, elsősorban fiatal kutatók részére, hosszabb ideig tartó tanulmányutak megvalósítására.

A POLYCOND-Creating competitive edge for European polymer processing industry driving new added value products with polymer (Integral Project) c. projektben 20 intézmény vesz részt.

Az intézet fő feladata a nanocsövek felületmódosítása volt. Sok szintetikus munkát végeztek, aminek során a kísérletek nagyításának megoldása jelentette a legnagyobb nehézséget.

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

1. Pilbáth A, Felhösi I, Tolnai Gy, Kálmán E: Application of self-assembly for replacing chromate in corrosion protection of zinc, Journal of Solid State Electrochemistry 10(9): 721-729 (2006)
2. Lónyi F, Kovács A, Valyon J: Hexane isomerization and cracking activity and intrinsic acidity of H-zeolites and sulfated zirconia-titania, Journal of Physical Chemistry B 110(4): 1711-1721 (2006)

3. Keszthelyi T, Pászti Z, Rigó T, Hakkel O, Telegdi J, Guczi L: Investigation of solid surfaces modified by Langmuir-Blodgett monolayers using sum-frequency vibrational spectroscopy and X-ray photoelectron spectroscopy, *Journal of Physical Chemistry B* 110: 8701-8714 (2006)
4. Margitfalvi JL, Tálas E, Tfirst E: Enantioselective hydrogenation of ethyl pyruvate over cinchonidine-Pt/Al₂O₃ catalyst. A reaction kinetic approach, *Topics in Catalysis* 39(1-2): 77-87 (2006)

VI. A kutatóhely 2006. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA Kémiai Kutatóközpont, Felületkémiai és Katalízis Intézet

Átlaglétszám ¹ :	51	Ebből kutató ² :	38
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			12
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma:			38
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ³ :			38
<i>Ebből</i> idegen nyelvű külföldi folyóiratban:	27	idegen nyelvű hazai folyóiratban:	0
nemzetközi együttműködés keretében:	10	SCI által regisztrált folyóiratban:	24
összesített impakt faktor:	47,695	összes hivatkozás száma ⁴ :	454
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			395
Megjelent könyv <i>magyarul</i> :	0	könyvfejezet:	2
<i>idegen</i> nyelven könyv:	0	könyvfejezet:	6
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Megvédett PhD értekezés:	0	Megvédett MTA doktori értekezés ⁵ :	0
Bejelentett találmányok száma:	2	Megadott szabadalmak száma:	0
<i>ebből</i> külföldön:	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma ⁶ :	41	posztterek száma:	20
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ⁷ :			8
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	10	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	12
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ⁸ :			261,8 MFt
Beruházási támogatás:	0 MFt	Fiatal kutatói álláshelyek száma ⁹ :	6
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			11
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			15,8 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			12
NKFP:	5	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	18,4 MFt
Egyéb:	7	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	2,7 MFt
Az év folyamán művelt NFT témák száma ¹⁰ :			4
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			78,9 MFt
Külföldi vagy nemzetközi forrásból művelt témák száma ¹¹ :			6
EU forrásból:	5	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	45,6 MFt
Egyéb:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	1,8 MFt
Egyéb pályázatok keretében művelt témák száma ¹² :			2
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			9,9 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			8
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			42,1 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány ¹³ :			0 MFt

VI/A. A kutatóhely 2006. évi tudományos teljesítményének egyéb bemutatható eredményei¹³

Az intézet neve: Kémiai Kutatóközpont, Felületkémiai és Katalízis Intézet

2006. évben néhány iparilag jelentős K+F-eredményből találmányi bejelentés, ill. know-how született:

Szabadalmak

Pető G, Kováchné Csorbai H, Karacs A, Kovách G, Kálmán E, Deák P, Molnár Gy, Hárs Gy: Korrozív közegben ellenálló gyémánt-gyémántszerű szén védőrétegrendszer és előállítása
Bejelentés ügyszáma: P0401509 (2006)

Gergely A, Kálmán E, Telegdi J: Eljárás szén nanocsövek hidrofil módosítására
Bejelentés ügyszáma: P 06 00418 (2006)

Know-how

Tolnai Gy, Kálmán E: Kopás és korrózióálló SiO₂-bevonat Ni-acél felületének védelmére, (2006)

Hazánkban elsőként alkalmaztak információbányászati módszereket a *katalizátorok* összetétele és a *katalitikus aktivitás* (szelektivitás) közötti összefüggések feltárására.

Az intézet kiemelten sikeres kutatási területe 2006-ban

Nanocsövek felületmódosítása

Az MTA KK Felületkémiai és Katalízis Intézetében 2006-ban végzett kutatási-fejlesztési munka eredményeként a nanocsövek felületének módosítására számos hidrophil és hidrophob módosítási eljárást dolgoztak ki. A felületmódosítás jelentősége abban mutatkozik meg, hogy ennek révén válhat lehetővé a nanocsövek sokoldalú alkalmazása. Kutatási eredményeik iránt máris élénk érdeklődés mutatkozik mind az érdekelt kutatók-fejlesztők, mind a potenciális alkalmazók részéről.

A *nanocsövek polimer-kompozitokban* történő alkalmazása elektromosan vezető polimer nanokompozitok előállítását eredményezheti, amelyeknek kitüntetett szerepe van az elektromágneses árnyékolási problémák megoldásában. A nanocsövek felületmódosítását TG/MS, NMR és XPS módszerrel vizsgálták. A polimerekben történő alkalmazhatóságát diszperziós kísérletekkel ellenőrizték. Megállapították hogy a módosított nanocsövekkel előállított polimer-nanokompozitok vezetőképessége jelentősen megnőtt.

A téma kapcsolódik a PolyCond elnevezésű EU FP6-os projekthez (POLYCOND-Creating competitive edge for European polymer processing industry driving new added value products with polymer). A témában 20 európai intézménnyel működnek együtt.

A *nanocsövek toxikusságának csökkentésére* irányuló kutatásoknak nagy jelentősége van a nanoméretű anyagok orvosi alkalmazásainak vizsgálatában. A megfelelő felületmódosítások alkalmazása áttörést hozhat ezen a területen.

Felületmódosítással kapott eredményeik felhasználhatók pl. a tüzelőanyagok, üzemanyagcellák kidolgozásában is. Ennek a jövő alternatív energiaforrásainak hasznosításában van jelentős szerepe.

2006-ban sikerült egy kiváló tulajdonságú *szénnanocső-tartalmú vegyeskompozit festék* adalékanyagot előállítaniuk. Ezt a munkát 2007-ben egy Jedlik Ányos projekt keretében folytatják.

Eredményeikről 2006-ban négy tudományos cikkben számoltak be. A konkrét gyakorlati felhasználási lehetőségeket egy know-how és egy szabadalmi bejelentés foglalja össze.

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: www.chemres.hu

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

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 feladatai közé tartoztak még a következők: részvétel az egyetemi oktatásban és a posztgraduális képzésben, szakmai tanácsadás, valamint gyakorlati célú kutatási-fejlesztési feladatok elvégzése. Jelentős hányadot képviselt továbbá a hazai, valamint a különböző európai projektekhez kapcsolódó, kémiai szerkezetkutatási feladatokban való részvétel is.

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

Molekulaspektroszkópiai kutatások

Az új, multidetektoros, infravörös mikroszkóp üzembehelyezését követően, folytatták az FTIR- és Raman-spektroszkópia, valamint -mikroszkópia orvos-biológiai alkalmazásainak kutatását, különös tekintettel a prevencióban nagy érdeklődésre számító, saját kezdeményezésű orvosi diagnosztikai alkalmazásokra. Az Országos Onkológiai Intézettel együttműködve emlőrákos betegek vizsgálatára sikeresen adaptálták a módszerüket. Az eljárás és a berendezés szabadalmaztatása most van folyamatban.

A rezgési átmenetmomentum-irányok kísérleti spektroszkópiai és elméleti számításokkal történő meghatározására a korábban (bolgár és finn együttműködéssel) kifejlesztett módszert sikeresen alkalmazták orientált molekulák polarizált IR-spektrumainak értelmezésében.

Elkezdtek az SBA-15 és KIT-6 mezoporózus anyag hordozós nikkelfoszfid-katalizátorok katalitikus aktivitásának vizsgálatát a hidrogénező finomítási eljárásban. A katalizátort a szénmonoxid próbamolekula ad- és deszorpciójának *in situ* FTIR-spektroszkópiai vizsgálatával és az ammónia hőmérséklet-programozott deszorpciójával (TPD-vel) jellemezték.

Kutatói kapacitás: 7 fő, ebből intézeti állományban: 5 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 42 M Ft, ebből pályázati forrás: 1,7 M Ft

Fotokémiai kutatások

Folytatták az Országos Gyógyintézeti Központ Fül-orr-gége Osztályán az 5-amino-levulénsav alapú fotodinamiás terápia bevezetésének klinikai próbáit, amihez az Intézet munkatársai fejlesztették ki, és az intézeti műhely állította elő a szükséges műszeres háttérrel (fényforrás, száloptikai eszközök és fényintenzitás-mérő eszközök). A fotodinamiás terápiát sikeresen alkalmazták 10-12 új páciens esetében.

A MEDICHEM II. program keretében meghatározták polifluor-porfirinek fotofizikai paramétereit, a fotodinamiás terápiában történő használhatóság megítélése érdekében. Az indolinszármazékok fotofizikai paramétereinek vizsgálatával megállapították, hogy a cianid-szubsztituens keresztül képződő hidrogénhidas komplexek a felelősek az észlelt gyors dezaktiválódásért.

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

ESR-spektroszkópiai vizsgálatok

Nanocsövekbe ágyazott mágneses fullerének dinamikai tulajdonságait vizsgálták ESR-spektroszkópiával. Az ESR-spektrumok szimulációjával a nanocsövek által korlátozott mozgások anizotrópiájára következtettek.

Citotoxikus szabad gyökök cigarettafüstben való kimutatására dolgoztak ki új spincsapdázási eljárást. A ciklodextrénes asszociáció és a spincsapdázás kombinálásával megnövelt hatékonyságú módszert hoztak létre reaktív oxigén specieszek vizsgálatára.

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

NMR-spektroszkópiai vizsgálatok

Az új, nagyterű (600 MHz) NMR-mérőműszer beüzemelését követően, megkezdődtek a szilárd- és folyadékfázisú hármaszonancia NMR-mérések. Meghatározták néhány, proteolitikus enzimeknek ellenálló D-aminosav szubsztituált *mucin-2* fehérje epitóp (TPTPTGTQTPT) szerkezetét NMR-módszerekkel. A konformációanalízis eredménye összhangban áll a peptidszármazékok *mucin-2* fehérje specifikus ellenanyagköti sajátságaival, és megerősíti a hármaszonancia pozícióban levő treonin kulcsfontosságát az epitóp-ellenanyag kölcsönhatásban. Patkányagyból izolált cerebrokortikális membránszuspenzió végzett NMR-vizsgálatok segítségével sikerült direkt szerkezeti bizonyítékot szerezni arra vonatkozólag, hogy a ^{13}C , ^{15}N -jelzett Glu intracelluláris folyamatok révén GABA-vá alakul, ami ezt követően kijut a sejtből.

Szilárd- és oldatfázisú ^{31}P -NMR mérések segítségével kétfémes komplexekben vizsgálták az Au-Au aurofil kölcsönhatás dinamikáját és energetikáját. Diffúziós NMR-módszereket alkalmaztak királis dialkil-ón(IV) komplexek hidrolízisének vizsgálatában.

Kutatói kapacitás: 8 fő, ebből intézeti állományban: 8 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 57 M Ft, ebből pályázati forrás: - M Ft.

Reakciókinetikai kutatások

Gázfázisú vizsgálatok során az ún. "brómozási egyensúlyi reakciók" kinetikai vizsgálatával meghatározták két fontos szabadgyök, a CHClBr -gyök és a $\text{CH}_3\text{C}(\text{O})\text{CH}_2$ -gyök (acetonilgyök) képződési entalpiáját. A CHClBr -gyökre meghatározott képződési entalpia az első kísérleti adat a szakirodalomban. A kutatók a $\text{Br} + \text{CH}_2\text{ClBr}$ elemi reakció kísérleti vizsgálata során az Arrhenius-törvény érvényességét állapították meg igen széles hőmérséklettartományban. A kapcsolódó elméleti, "direkt dinamikai" számítások eredményei csak kvalitatív módon egyeznek a kísérletekkel, jelölve az elméleti módszer valószínű hiányosságainak. Mindkét vizsgált szabadgyök fontos szerepet játszik a légkör kémiai

folyamataiban: a sztratoszférikus ózonréteget károsító Cl- és Br-atomok egyik forrásaként szerepel, ill. az acetone troposzférikus lebomlásának közterméke.

Oldatfázisú vizsgálatok során a hidrogénhid-képződés oldószerfüggésének tanulmányozását a 4-(dimetilamino)piridin és aromás szénhidrogén modellvegyületek alkoholokkal képzett komplexeinek vizsgálatával végezték. Karakterisztikus változásokat állapítottak meg az abszorpciós és a fluoreszcenciás színeképekben, amelyek alapján a komplexképződés termodinamikájára és kinetikájára vonatkozóan tettek általánosítható megállapításokat. Jelentős eredményekre jutottak annak felderítésében, hogy a komplexképződés hogyan befolyásolja az alapállapotú molekulák fényelnyelését és termodinamikai sajátságait, valamint az elektrongerjesztett állapotok reakcióit.

Kutatói kapacitás: 4 fő, ebből intézeti állományban: 4 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 32 M Ft, Ebből pályázati forrás: 7 M Ft

Kristály-, por- és folyadékdiffrakciós kutatások

Új Sn-, Pd- és Au-komplexeket szintetizáltak. Többfunkciós ligandumokat terveztek és állítottak elő fémkomplexek önszerveződési reakciójának tanulmányozásához. Pontosították a kapcsolódó irodalmi adatokat. Ón-komplexeket vizsgálva újabb, szilárd fázisú diszmutációs reakciókat írtak le.

Nagy, négyszögletes csatornákkal bíró Pd-komplex kristályokat fedeztek föl.

Új, cukorszármazékok és szervesetlen sók között létrejött komplexeket fedeztek fel, amelyeknek szilárd fázisú reakciókban való felhasználhatóságát is bizonyították.

A szerves kémiai szintézisekben növekvő szerepet játszó N-klór-arénszulfonamidátok körében végzett krisztallográfiai vizsgálataikkal kimutatták, hogy a nátrium- és a káliumsók szerkezeti és kémiai sajátságai között mutatkozó összefüggések jól értelmezhetők.

A krisztallográfiai fázisprobléma megoldására a korábban általuk kifejlesztett új módszert sikeresen alkalmazták egy igen nagy, pszeudoszimmetriát mutató kristályszerkezet meghatározására.

Vizsgálatokat végeztek önszerveződő szupramolekuláris rendszerek (makrociklusos platinakomplexek) szerkezetének meghatározására, a kialakuló szupramolekuláris formák geometriai jellemzésére.

Lítium- és berilliumionot tartalmazó oldatokra (acetonitril és dimetilszulfoxid oldószerekben) vonatkozó *ab initio* számításokat és molekuláris dinamikai szimulációkat, valamint röntgendiffrakciós és neutrondiffrakciós méréseket végeztek.

Módszert dolgoztak ki vaskomplexek szerkezetének meghatározására röntgendiffrakcióval. A módszer alkalmazásának komoly szerepe lehet a katalitikus folyamatok tanulmányozásában.

Kutatói kapacitás: 12 fő, ebből intézeti állományban 12 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 72 M Ft, ebből pályázati forrás: 8 M Ft

Tömegspektrometriai kutatások

Az évek óta folytatott analitikai-diagnosztikai kutatások során szterolok vérből történő kimutatására új HPLC-MS módszert fejlesztettek ki, majd az eredmények kemometria kiértékelésével ezt a gyakorlatban alkalmazták. A módszer igen érzékeny, és az orvosi gyakorlatban előforduló nagy mintaszámra is sikerrel alkalmazható.

A tömegspektrométerben lejátszódó folyamatok modellezésére kifejlesztett Windows-alapú számítógépes programot (MassKinetics) sikerrel alkalmazták kvantumkémiai számításokkal kombináltan szerves kémiai reakciók modellezésére.

A BME kutatócsoportjaival a meglévő együttműködéseket folytatva különböző szintetikus vinka-alkaloidák szerkezetazonosítását végezték el. Az MTA KK Biomolekuláris Kémiai Intézettel együttműködve, többek között, fluorkémiai kutatásokban alkalmazták a tömegspektrometriai szerkezetvizsgáló módszereket. Az MTA KK Felületkémiai és Katalízis Intézet kutatóival együttműködésben szerkezet-tulajdonság összefüggések kutatásában alkalmaztak újszerű megközelítéseket. A Babes-Bolyai Egyetem kutatói részére átmenetifém-oximin komplexek szerkezetazonosítását végezték el, ezzel is támogatva a partner csoport kutatási tevékenységét.

Kutatói kapacitás: 5,8 fő, ebből intézeti állományban: 5,8 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 37,4 M Ft, ebből pályázati forrás: 11,4 M Ft

Elméleti kémiai kutatások

Periodikus modellen elvégzett kvantumkémiai számítások segítségével jellemezték a Pt(111) és Rh(111) felületeken adszorbeált széndioxid-, metanol- és hangyasavmolekulák tulajdonságait. Kísérleti adatok (RAIRS) segítségével azonosították a Rh(111) felületen kialakult különböző rendezett CO-szerkezeteket.

Molekuláris dinamikai és folyadékdiffrakciós-módszerek segítségével megmutatták, hogy a kalciumionnak a szolvátburkában 8 metanol, a hidrátszférájában 6-8 vízmolekula található.

Diffrakciós módszerek alkalmazásával kimutatták a mikroheterogenitások létét víz-acetonitril elegyekben. Ezeket a mikroheterogenitásokat molekuláris dinamikai szimulációk segítségével is jellemezték.

Car-Parrinello molekuláris dinamikai, szimulációs számítások alapján megállapították, hogy a folyékony hangyasav szerkezetét alapvetően hidrogénkötésekkel összetartott rövid elágazó láncok határozzák meg.

Molekuláris dinamikai számításokkal megállapították, hogy a Glu transzporter-fehérjében a 2-es hajtú és a 7-es hélix régiókban tapasztalt elmozdulások valószínűleg a fehérjetranszport működésével vannak kapcsolatban.

Az amorf szerkezetű poliizobutiléneken végzett ¹³C-NMR-mérések eredményeinek értelmezése céljából, kvantumkémiai módszerekkel tanulmányozták különböző oligomerek konformációs tulajdonságait és az egyes konformerekre jellemző kémiai eltolódásokat.

Kváziklasszikus trajektóriaszámításokkal megállapították, hogy az oxigénatom és az oxigénmolekula reakciójában nem keletkezik statisztikus komplex, szemben az általánosan elfogadott feltételezéssel.

Kvantumkémiai módszerrel kiszámították a vas-porfirin és néhány gyakran előforduló ligandum komplexének szerkezetét és kötési energiáját. Megállapították, hogy a víz erősebben kötődik a komplex fématomjához, mint az oxigénmolekula.

Molekulák kvantumkémiai energiafelbontásának vizsgálata során megállapították, hogy a DFT-elméletben szereplő kicserélődési funkcionál lokális jellege elvi nehézségeket okoz, és ennek megoldására egy elvileg új megközelítést dolgoztak ki. Megállapították továbbá, hogy az egyensúlytól eltérő magkonfigurációk esetén az energiafelbontás egy – ezideig feloldatlan – dilemmát vet fel: vagy a komponensek számértéke, vagy a távolságfüggése felel meg a kémiai intuíciónak.

Hidrogénkarbonát vízdoldható ruténium-hidriddel történő hidrogénezését vizsgálták kvantumkémiai számítások segítségével. A vizsgálatok megmutatták, hogy az oldószerként jelenlévő vízmolekulák egy része a reakcióban aktív szerepet játszik, ugyanis hatékonyan katalizálja a protontranszfer folyamatokat.

Kvantumkémiai számítások alapján új reakciómechanizmust javasoltak acetyl-aceton és nitroolefin aszimmetrikus tiokarbamid-származékkal katalizált, enantioszelektív Michael-addíciójára. Megmutatták, hogy a C-C kapcsolás olyan ternér komplexeken keresztül történhet meg, melyekben mindkét szubsztrátum H-hidas kötésekkel kapcsolódik a katalizátor aktív centrumaihoz. A feltárt mechanizmus összhangban van a kísérleti eredményekkel, és magyarázatot ad az organokatalitikus reakció enantioszelektivitására is.

Kvantumkémiai számítások segítségével részletesen feltárták egy olyan katalitikus folyamat mechanizmusát, melyben a széndioxid nióbiumkatalizátor jelenlétében, metanollal reagálva dimetil-karbonátot eredményez. A számítások eredményeivel értelmezni tudták a Nb(V) és Sn(IV) katalizátorok eltérő viselkedését.

Kvantumkémiai számításokkal segítették az újonnan szintetizált, katekoláz-enzim modellként szolgáló vas-komplexek szerkezetének meghatározását.

Átmenetifém foszfinok hidridicitását tanulmányozták elméleti úton, és megállapították, hogy az egyszerű kontinuum oldószermodellek megbízhatóan alkalmazhatók töltésszétválással járó reakciók energetikai viszonyainak leírására.

Pirit (100) felszín és tömbfázis XPS-spektrumát számították DFT-pszepudopotenciál módszerrel és azonosították a különböző oxidációs állapotú felszíni és tömbi kén specieszeket a core-level shift értékek alapján.

Aceton vizes oldatban végbemenő tautomerizációs folyamatait tanulmányozták ab initio molekuladinamikai számításokkal. Megmutatták, hogy a vízmolekulák jelenléte csökkenti a tautomerizációs gátat, és kimutatták, hogy a protontranszfer vízmolekulákból álló láncon keresztül, intermolekulárisan zajlik le.

Kvantumkémiai (MS-CASPT2) számításokkal meghatározták a (CH₂BrCl)-molekula UV-fotodisszociációjához tartozó potenciálfelületek közti konikus kereszteződést, továbbá kvantumdinamikai szimulációk segítségével jellemezték a fotodisszociáció folyamatát, eljárást dolgoztak ki a disszociáció koherens szabályzására.

Kutatói kapacitás: 8 fő, ebből intézeti állományban: 8 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 47 M Ft, ebből pályázati forrás: 4 M Ft

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Hazai kapcsolatok

Hazai tudományos kapcsolataik közül kiemelendők az egyetemekkel és az MTA-támogatású kutatócsoportokkal folytatott kutatási együttműködések.

A „Légköri szennyezők, ill. különböző gázok FTIR vizsgálata” és a „Fémorganikus vegyületek szerkezetkutatása” c. témákban eredményes közös kutatásokat folytattak a Pannon Egyetemmel és az MTA Analitikai Kémiai Tanszéki Kutatócsoportjával. Az eredményeket három közös publikációban foglalták össze.

A „Biológiailag fontos vaskomplexek Mössbauer- és rezgési spektroszkópiai tanulmányozása” c. témában az ELTE Nukleáris Szerkezetvizsgáló Akadémiai Kutatócsoporttal dolgoznak közösen, aminek eredményeként két cikket közöltek.

A Szegedi Tudományegyetem Biokémiai Tanszékevel az „Édesvízi halak szervezetére ható toxikus elemek (ólom, kadmium stb.) hatásának vizsgálata biokémiai és rezgési spektroszkópiai módszerekkel” c. témából született közös közlemény.

A Szegedi Tudományegyetem Fizikai Kémia Tanszékének kutatóival együttműködésben, különféle naftálimidszármazékok gerjesztett állapotainak energiáját és az alapállapotú molekulák szerkezetét határozták meg. Erről közös közleményt jelentettek meg.

Új, vízdoldható, kationos naftálimideket állítottak elő, feltárták a molekulaszervezet, a közegpolaritás és a kationváltoztatás hatását a szingulett és triplett gerjesztett állapotok energiavesztési folyamatainak a sebességére a BME Szerves Kémia Tanszékével együttműködésben. Az eredményeket közösen publikálták.

ESR-spektroszkópiai módszereket alkalmaztak reakciókinetikai problémák megoldására, valamint átmenetifém komplexek szerkezetvizsgálatában a Szegedi Tudományegyetem Radiokémia Tanszék és a Pannon Egyetem (Veszprém) Szerves Kémiai Tanszék kutatóival folytatott együttműködés során. Az eredményekről két közös cikkben számoltak be.

A „Hordozós nemesfém katalizátorokon adszorbeált molekulák FTIR-spektroszkópiai vizsgálata” c. témakörben szénmonoxid kemisorpcióját vizsgálták alumínium hordozón levő Rh-, Ir- és Pt-katalizátorokon transzmissziós és emissziós infravörös spektroszkópiával. Lineáris, híd és dikarbonil típusú felületi specieszeket azonosítottak a Pannon Egyetem (Veszprém) Környezetmérnöki és Kémiai Technológiai Tanszékével együttműködésben. Az eredményekről közös dolgozatban adtak számot.

A Richter Gedeon Nyrt.-vel jelentős kutatási kapcsolatokat alakítottak ki, pl. a „Neurosteroidok meghatározása tömegspektrometriás módszerek segítségével” c. témában.

Az elméleti kémiai kutatások területén a Debreceni Egyetem Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszékével együttműködésben vízdoldható fémkomplexek belső szerkezeti átrendeződéseinek mechanizmusát vizsgálták. A Pannon Egyetem Általános és Szervetlen Kémia Tanszékével „Ruténiumkomplexek gerjesztett elektronállapotai szerkezetének és átmenetifém-porfirin komplexek alap- és gerjesztett állapotainak meghatározása kvantumkémiai módszerekkel” c. témában dolgoztak együtt. Az MTA Enzimológiai Intézettel közösen enzimatis reakciókat modelleztek molekuladinamikai QM/MM módszerekkel.

Az egyetemekkel közös kutatások eredményeiből 2006-ban 21 publikációt jelentettek meg.

Nemzetközi kapcsolatok

Az intézetnek kiterjedt nemzetközi kapcsolatai vannak. Számos európai és amerikai egyetemmel alakítottak ki eredményes kutatási együttműködéseket.

Az „Orientált molekulák tanulmányozása infravörös lineáris dikroizmus alapján, elméleti számítások segítségével” c. témában (MTA-BTA kétoldalú egyezmény, partnerintézmény: Institute of Organic Chemistry, BAS, Szófia, Bulgária) elért eredményeikről közös cikkben számoltak be.

Az MTA-Horvát TA kétoldalú egyezmény keretében a Department of Analytical Chemistry, Zagreb University kutatóival részletesen értelmezték a közepes méretű szerves vegyületek IR- és Raman-spektrumait kvantumkémiai számításokon alapuló erőterekkel.

TÉT-egyezmény keretében a Department of Inorganic Chemistry, University of München kutatóival meghatározták a hatodik mellékcsoport dioxo-fém(VI) komplexeinek, mint katalizátoroknak a szerepét az olefinek epoxidálási reakcióiban.

OTA-MTA együttműködés keretében a University of Innsbruck, Institute for Ion Physics kutatóival ab initio- és molekuladinamikai számításokat, továbbá röntgendiffrakciós méréseket végeztek formamid és DMSO-oldatokon. Az eredményekről közös folyóiratcikket jelentettek meg.

MTA-CNRS együttműködés keretében (Université Henri Poincaré, Nancy) megállapították a hosszú távú korrekció hatását a DFT-módszerekkel számított potenciálgát-magasságokra.

Osztrák-magyar Tét-egyezmény támogatásával a Max Perutz Laboratories, University of Vienna kutatóival együttműködésben N-metil-5-cianoindolin és rokon vegyületek fotofizikai paramétereit határozták meg több hőmérsékleten, különböző oldószerekben.

A „Lézerrel keltett szénplazmák emissziós spektroszkópiai analízise, különös tekintettel a C3 gyök kimutatására” c. témában eredményes együttműködést folytatnak három amerikai kutatóhellyel (The University of Tennessee, Space Institute, Tullahoma, Tennessee; Combustion Research Facility, Sandia National Laboratories, Livermore, California; Laser Spectroscopy Facility, Department of Chemistry, The Ohio State University, Columbus). A kutatások eddigi eredményeiről közös publikációban számoltak be.

Az ESR-spektroszkópia különféle alkalmazásai témakörben különösen sikeres együttműködést alakítottak ki az Université de Provence Marseille, az University Rosario, Argentína és a The Ohio State University, USA kutatóival. Az eredményekről 10 közös publikáció tájékoztat.

A “Photophysics of intramolecular charge transfer molecules” c. témában a Volkswagen Foundation támogatásával meghatározták a triplétt DMABN dipólusmomentumát a Max-Planck-Institut for Biophysical-Chemistry, Göttingen kutatóival közösen. Az eredményekről közös publikációban számoltak be.

A Dél-Afrikai Köztársasággal kötött Tét-egyezmény keretében 2006-ban több tanulmányút valósult meg, amelyek alkalmat adtak a közös kutatások eddigi eredményeinek kiértékelésére és a további munka előkészítésére.

A University of Utah, Department of Chemistry, USA kutatóival igen sikeres közös kutatást folytatnak, aminek eredményeként a Journal of the American Society-ban jelentettek meg egy közös cikket. További publikációk vannak előkészületben. Az együttműködés támogatására pályázatot nyújtottak be az NSF-hez.

Olasz-magyar Tét-egységműködés keretében fehérjék tömegspektrometriás fragmentációját vizsgálták. (Közös publikáció van előkészületben.)

Román-magyar Tét-egységműködés során biológiai és orvosi minták tömegspektrometriai eredményeinek összehasonlító elemzését végezték el.

Spanyol-magyar Tét-egységműködésben eredményesen dolgoznak a „Humán szérum AGP mikroheterogenitása és diagnosztikai értéke” c. témában. Közös publikációt készítenek elő.

Argentín-magyar Tét-egységműködésben a „Természetes gombaölő anyagok és származékaik jellemzése tandem tömegspektrometriás módszerekkel” c. témában a kutatás konkrét feladatait készítették elő 2006-ban.

Magyar-spanyol Tét-egységműködés keretében az University of Girona kutatóival közösen (téma: energiadekompozíciós és kötésrendszámítási módszerek) kidolgozták a "fuzzy atomos" energiafelbontás DFT általánosítását, és elvégezték az energiakomponensek analízisét különös tekintettel a kicserélődés és kicserélődési potenciál térbeli eloszlására.

Az „Ab initio molekulamechanikai módszer” c. téma kutatásainak során (Magyar-orosz Tét) előtanulmányokat végeztek egy "ab initio molekulamechanikai módszer" létrehozásának lehetőségéről a Karpov Institute of Physical Chemistry, Moszkva kutatóival.

A fentiekén kívül eredményes kutatásokat folytattak a következő intézményekkel:

University of New Mexico, USA; University of Bari; University of Innsbruck; University of Canterbury; Freie Universität, Berlin; Graz University of Technology; University of Milano; ETHZ, Lugano; University of Modena; Washington University, USA.

Az intézet nemzetközi együttműködéseinek kiemelkedő eredményességét jelzi, hogy 2006-ban 57 publikációt jelentettek meg külföldi kutatóintézetekkel közösen.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

Az intézet kémiai szerkezetkutatással foglalkozó csoportjai részt vállalnak mind a Koordinációs Kutatóközpont, ill. a Medichem II pályázat, mind egyéb NKTH-pályázatok feladatainak megoldásában. Ezek a feladatok a Központ Biomolekuláris, ill. Felületkémiai és Katalízis Intézetének programjaihoz kapcsolódnak. A szerkezetkutatások elsősorban a tömegspektrometria, a mágneses magrezonancia-spektroszkópia, valamint az infravörös-spektroszkópia területére terjednek ki. Igen fontos alkalmazást nyernek az említett spektroszkópiai módszerek az új, orvosi diagnosztikai eljárások, továbbá a népegészségügyi jelentőségű betegségek okainak felderítésében. A felsorolt és további szerkezetvizsgálati módszerek (pl. röntgendiffrakció, ill. összeg-frekvenciakeltési spektroszkópia) jelentős szerepet játszanak a felületeken végbemenő reakciók felderítésében, továbbá mind a kristályos, mind az amorf anyagok, a szupramolekulák, valamint a folyadékok szerkezetének vizsgálatában.

Az ARCUS / PhyCAFoR, projekt keretében (téma: Physical Chemistry of the Atmosphere) a francia partnerrel (University of Lille) közösen, PhD-hallgatók továbbképzésében és témavezetésében vettek részt.

MTA-NSF-OTKA keretében folytatott kutatási együttműködésben (együttműködő partner: Department of Chemistry, Northwestern University, Evanston, USA) számítógépes programot dolgoztak ki sokatomos molekulák reakciódinamikai vizsgálatára.

A University of Perugia, Olaszország kutatóival közös M. Curie Training Network pályázatot nyújtottak be, valamint a COST Action D37 keretében, a QDYN munkacsoport tagjaként, reakciódinamikai programok grid változatának kidolgozását végezték el.

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

1. Bacsik Z, Gyivicsán A, Horváth K, Mink J: Determination of carbon monoxide concentration and total pressure in gas cavities in the silica glass body of light bulbs by FT-IR spectrometry, *Analytical Chemistry* 78(7): 2382-2387 (2006)
2. Simon F, Kuzmany H, Náfrádi B, Fehér T, Forró L, Fülöp F, Jánossy A, Korecz L, Rockenbauer A, Hauke F, Hirsch A: Magnetic fullerenes inside single-wall carbon nanotubes, *Physical Review Letters* 97(13): 136801-1-136801-4 (2006)
3. Imrik K, Kovács Gg, Fejes I, Szilágyi I, Sarzynski D, Dóbe S, Bérces T, Márta F, Espinosa-Garcia J: Absolute and relative-rate kinetics experiments and direct dynamics computations for the reaction of Br atoms with CH₂ClBr, *Journal of Physical Chemistry A* 110(21): 6821-6832 (2006)
4. Deák A, Megyes T, Tárkányi G, Király P, Biczók L, Pálinkás G, Stang PJ: Synthesis and solution- and solid-state characterization of gold(I) rings with short Au-Au interactions. Spontaneous resolution of a gold(I) complex, *Journal of the American Chemical Society* 128(39): 12668-12670 (2006)
5. Oszlányi G, Sütő A, Czugler M, Párkányi L: Charge flipping at work: A case of pseudosymmetry, *Journal of the American Chemical Society* 128(26): 8392-8393 (2006)

6. Megyes T, Bakó I, Radnai T, Grósz T, Kosztolányi T, Mroz B, Probst M: Structural investigation of lithium iodide in liquid dimethyl sulfoxide: Comparison between experiment and computation, *Chemical Physics* 321(1-2): 100-110 (2006)
7. de Bruin TJM, Michel C, Vékey K, Greene AE, Gimbert Y, Milet A: First C-C bond formation in the Pauson-Khand reaction: Influence of carbon-carbon triple bond polarization on regiochemistry - A density functional theory study, *Journal of Organometallic Chemistry* 691(20): 4281-4288 (2006)
8. Tóth F, Kalaus Gy, Greiner M, Kajtár-Peredy M, Gömöry Á, Hazai L, Szántay Cs: Synthesis of vinca alkaloids and related compounds. Part 106. An efficient convergent synthetic pathway to build up the ibophyllidine skeleton II. Total synthesis of (+/-)-deethylibophyllidine and (+/-)-14-epi-deethylibophyllidine, *Heterocycles* 68(11): 2301-2317 (2006)
9. Hamza A, Schubert G, Soós T, Pápai I: Theoretical studies on the bifunctionality of chiral thiourea-based organocatalysts: Competing routes to C-C bond formation, *Journal of the American Chemical Society* 128(40): 13151-13160 (2006)
10. Mayer I: Energy partitioning schemes, *Physical Chemistry Chemical Physics* 8(40): 4630-4646 (2006)
11. Horváth O, Huszánk R, Valicsek Zs, Lendvay Gy: Photophysics and photochemistry of kinetically labile, water-soluble porphyrin complexes, *Coordination Chemistry Reviews* 250(13-14): 1792-1803 (2006)

VI. A kutatóhely 2006. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA Kémiai Kutatóközpont, Szerkezeti Kémiai Intézet

Átlaglétszám ¹ :	69	Ebből kutató ² :	57
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			22
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma:			102
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ³ :			102
<i>Ebből</i> idegen nyelvű külföldi folyóiratban:	93	idegen nyelvű hazai folyóiratban:	0
nemzetközi együttműködés keretében:	57	SCI által regisztrált folyóiratban:	90
összesített impakt faktor:	213,582	összes hivatkozás száma ⁴ :	2143
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			1948
Megjelent könyv <i>magyarul</i> :	0	könyvfejezet:	1
<i>idegen</i> nyelven könyv:	1	könyvfejezet:	2
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Megvédett PhD értekezés:	3	Megvédett MTA doktori értekezés ⁵ :	2
Bejelentett találmányok száma:	0	Megadott szabadalmak száma:	0
<i>ebből</i> külföldön:	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma ⁶ :	40	poszterek száma:	35
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ⁷ :			18
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	12	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	11
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ⁸ :			375,2 MFt
Beruházási támogatás:	0 MFt	Fiatal kutatói álláshelyek száma ⁹ :	4
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			12
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			23,1 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			10
NKFP:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	39,1 MFt
Egyéb:	9	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	1,3 MFt
Az év folyamán művelt NFT témák száma ¹⁰ :			5
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			161,6 MFt
Külföldi vagy nemzetközi forrásból művelt témák száma ¹¹ :			2
EU forrásból:	2	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	14,8 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb pályázatok keretében művelt témák száma ¹² :			0
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			12
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			13,8 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány ¹³ :			0 MFt

Az intézet kiemelten sikeres kutatási területe 2006-ban

Egy új orvosi diagnosztikai módszer: a glikoziláció mintázat meghatározása

A proteinek szerkezetének vizsgálata világszerte kiemelt kutatási terület. A kutatások legfontosabb módszerei közé tartoznak a *tömegspektrometriai módszerek*. Az utóbbi években megvalósult fejlesztések eredményeképp a hazai műszerezettség eléri a fejlettebb országokban lévő színvonalat, ami lehetővé tette a proteomikai kutatások hazai elindítását. Ezt a fejlődést jelzi a Magyar Proteomikai Társaság megalakulása is 2006-ban. Ugyanebben az évben állították üzembe az MTA KK Szerkezeti Kémiai Intézetben a nagy teljesítőképességű, proteomikai vizsgálatokra alkalmas, Q-TOF típusú tömegspektrométert. Ez a beszerzés lehetővé tette, hogy a korábban kizárólag külföldön lehetséges méréseket itthon is folytathassák.

A proteomika területén számos kutatási irányzat létezik. Ezek közül az orvosbiológiai alkalmazások az életminőség javításával közvetlen kapcsolatban vannak, ennek megfelelően dinamikusan fejlődnek. A proteinek szerkezetének és biológiai funkciójának meghatározásában egyre nagyobb jelentőségre tesz szert a poszttranszlációs módosulások jellemzése, ezen belül a glikoziláció vizsgálata. Ez utóbbi jellegzetessége az oligoszacharid szerkezetek nagy száma (az úgynevezett mikroheterogenitás) és ezek változékonysága. Ennek megfelelően, a glikoziláció vizsgálata ezen szerkezetek és az egyes szerkezeti variánsok mennyiségének (eloszlásának, mintázatának) meghatározását jelenti. A legújabb vizsgálatok szerint ezek a mintázatok a szervezet állapotát, így pl. esetleges rákos megbetegedés kialakulását jól jelzik (biomarker). A legtöbb proteomikai technikával szemben, a glikozilációs mintázat vizsgálata jelentős módszertani fejlesztést igényel, a gyakorlatban jól használható, nagy áteresztőképességű technikák egyelőre nem léteznek.

Az intézetben folyó kutatások a glikozilációs mintázat meghatározására irányulnak. A meghatározott mintázatokat új, orvosi diagnosztikai módszerek kifejlesztésére használják fel. A kutatásokat az Országos Onkológiai Intézettel, a Semmelweis Egyetemen és a Richter Gyógyszergyárral együttműködésben végzik. A vizsgálatokhoz vérszérumot, valamint szérumból izolált glikoproteineket (elsősorban α 1-savas glikoproteint, AGP) is felhasználtak. A kutatások részben módszertani jellegűek, s így új, potenciálisan nagy áteresztőképességű módszerek kidolgozására, glikoproteinek, glikopeptidek azonosítására, a glikozilációs mintázat meghatározására vonatkoznak.

Izolált glikoproteinek esetén a kutatás első fázisa az intakt glikoprotein molekulatömegének meghatározása, mely MALDI-TOF, ill. ESI-módszerekkel történik. Ez kedvező esetben (pl. transzferin) a molekulatömeg mellett a glikozilációs mintázat közelítő meghatározását is lehetővé teszi. A legtöbb esetben azonban (mint pl. AGP) a glikoprotein szerkezete olyan mértékben heterogén, hogy a közvetlen tömegspektrometriai vizsgálat ennek meghatározására nem elegendő.

Részletesebb vizsgálatokhoz a glikoproteint enzimatikusan emésztik, amihez tripszint, ill. PNGase F enzimet használnak. Az előbbi a glikozilációs pozíciók azonosítását és az ún. „site specific glycosylation” mintázat meghatározását teszi lehetővé. Az enzimátikus emésztés eredményét HPLC-ESI-MS-MS vizsgálatok segítségével analizálják. A proteomikában

általánosan használatos, kereskedelemben kapható szoftverek glikopeptidek azonosítására és szerkezetmeghatározására nem (vagy csak nagyon kis hatékonysággal) használhatók. Kutatásaik során olyan szerkezetkutató algoritmust és ennek gyakorlati meghatározását lehetővé tevő szoftvert dolgoztak ki, amely alkalmas glikopeptidek azonosítására, és a szerkezetmeghatározást is jelentősen megkönnyíti. A szoftver értékesítése és publikálása folyamatban van. Az AGP-vizsgálata során ennek mind az öt glikozilációs pozícióját azonosították, továbbá mind az öt esetben meghatározták a glikozileződési mintázatot. Megállapították, hogy ez a mintázat az öt glikozilációs hely esetén egymástól jelentősen eltér. A feladat bonyolultságát jelzi, hogy a vizsgálatok során egyetlen AGP-mintából mintegy 90 különböző glikopeptid szerkezeti egységet azonosítottak. Ezek döntő többsége az irodalomban korábban ismeretlen volt.

Szintén az AGP-vizsgálata során, ennek PNGase F enzimmel történő hasítását is elvégezték. Az így előállított oligoszacharidokat, szeparálás és izolálás után, MALDI-TOF tömegspektrometriás módszerrel vizsgálták. Mintegy 40 különböző cukorszekvenciát azonosították, és elvégezték ezek (az adott AGP-mintára jellemző) intenzitáseloszlásának meghatározását.

A kutatás következő fázisában az oligoszacharid mintázatot egyedi (egy adott önkéntes vérszérumából izolált) AGP-mintából is elvégezték. Három csoportot, egészséges önkénteseket, ill. két különböző rákos megbetegedésben szenvedő beteget vizsgáltak. A cukormintázat meghatározását követően elvégezték ezek matematikai-statisztikai (kemometriás) elemzését. Megállapították, hogy a három csoport LDA-módszerrel jól jellemezhető, mind az egészséges-beteg, mind pedig a limphoma-ovarium tumoros elváltozás egymástól elkülöníthető. Az általuk kidolgozott módszerrel meghatározott cukoreloszlás kiváló biomarkernek bizonyult. További fejlesztést követően várható, hogy új, a rákos megbetegedések korai kimutatását lehetővé tevő, klinikailag jól alkalmazható módszert lehet majd kidolgozni.

Kutatásaikat két irányban folytatják. Egyrészt a jelenleg használt, igen időigényes módszereket szeretnék felgyorsítani és automatizálni. Másrészt, az AGP-n túlmenően, más glikoproteinek cukormintázatát, ill. további, klinikailag fontos betegcsoportok jellemzését tervezik. Céljuk továbbá a cukormintázat és az ezt meghatározó enzimátikus (glikozilációs) folyamatok közötti kapcsolat felderítése.



Az új tömegspektrometriai laboratórium az MTA Kémiai Kutatóközpont Szerkezeti Kémiai Intézetében

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

Az intézet 2006. évi tevékenységét, a korábbi évekhez hasonlóan, az anyagtudományi és a környezeti kémiai kutatások szoros kapcsolata jellemezte.

Modern kísérleti és elméleti módszerekkel tanulmányozták célszerűen kiválasztott anyagi rendszerek kémiai és fizikai-kémiai tulajdonságait. Ezen ismeretek alapul szolgálnak újszerű szerkezeti és funkcionális anyagok előállításához, valamint környezetbarát ipari eljárások kidolgozásához.

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

Anyagkémiai kutatások

Plazmával és ionsugarakkal előállított nanorétegek kutatása és komplex jellemzése

Humán csípőízületi protézisek alapanyagául szolgáló ultranagy molekulatömegű polietilén (UHMWPE) felületét kezelték plazmaimmerziós ionimplantációs (PIII) módszerrel. Kísérlettervezés segítségével feltárták az előállítási körülmények, nevezetesen a gyorsító feszültség, a dózis és a dózisteljesítmény hatását a felület kémiai, továbbá nanomechanikai tulajdonságaira. A kutatási eredményeket a hőmezővásárhelyi PROTETIM Kft. alkalmazza a korábbiaknál hosszabb élettartamú csípőízületi protézisek gyártásánál.

C-Si-N rétegeket állítottak elő hidegplazmával aktivált szerves szilíciumvegyületekből, így tetrametil-szilánból, hexametil-disziloxánból és hexametil-diszilazánból. Megállapították, hogy a plazmafeszültség növelésével nő a rétegek C/Si aránya, valamint nanokeménysége és modulusza.

Elméleti fejlesztésként megoldották, hogy a különféle nanorétegek felületkémiai vizsgálata során kapott röntgenfotoelektron-spektrumokból származtatott, ún. redukált adatok átvihetők legyenek a különféle programrendszerek között egy új fájl-formátum (XPS Reduced Data Exchange File) segítségével.

Kutatói ráfordítás: 4 fő, ebből intézeti állományban van: 4 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 30 M Ft, ebből pályázati forrás: 4 M Ft

Korszerű mikro- és nanoszemcsés anyagok előállítása termikus plazmában

Rádiófrekvenciás (RF) termikus plazmareaktorban tanulmányozták szűk méreteloszlású, gömb alakú, üreges SiO₂ szemcsék kialakításának lehetőségét. Megállapították, hogy a plazmaparaméterek megfelelő beállításakor a kiindulási, porózus és szabálytalan alakú SiO₂ részecskék - kismértékű méretnövekedés mellett - üreges, gömbszerű szemcsékké alakulnak át. Egy másik eljárással szilíciumtartalmú kolloid oldatokat (kovasav szólt, vízüveget, SiO₂ szuszpenziót) plazmalángba porlasztva alakítottak ki gömb alakú, üreges SiO₂ szemcséket.

Vizsgálták cink- és nikkelt-cink ferritek előállítását szilárd és folyékony kiindulási anyagokból. Tanulmányozták a különböző plazmaparaméterek hatását a képződő ferritek tulajdonságaira (kémiai és fázisösszetétel, morfológia, szemcseméret eloszlás, mágneses tulajdonságok). Megállapították, hogy a megfelelő fémek nitrát-sóinak alkoholos oldatából egy lépésben lehet előállítani adott összetételű, nanoszemcsés, nagy telítési mágnességgel rendelkező ferriteket. A nagy telítési mágnességet inverz-spinel szerkezetek kialakulására utal.

Fullerének termikus plazmában történő szintézisekor vizsgálták a szennyező- és adalékanyagok hatását a termék fullerén tartalmára és a fullerén összetételére. Megállapították, hogy a kiindulási grafitporhoz 20% vasport adagolva a korom fulleréntartalma megnő. Ugyanakkor a fulleréntartalom 5% szilícium- vagy bóradalék hatására csökken. Utóbbi esetben viszont megnőtt a fullerénben a C82 és C84 klaszterek aránya.

Kutatói ráfordítás: 6 fő, ebből intézeti állományban van: 3 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 4 M Ft, ebből pályázati forrás: 1,4 M Ft

Funkcionális mikro- és nanoszerkezetű társított rendszerek fejlesztése

Fehérjetartalmú terápiás szerek hatékonyabb adagolását biztosító új gyógyszerformák kifejlesztését tűzték ki célul, modell és aktív fehérjék alkalmazásával. Kidolgoztak több olyan, újszerű, társított polimeralapú és nanoszerkezetű hordozórendszert, amelyek lehetővé teszik a fehérje hatóanyag szabályozott leadását. Fehérjeadszorpcióra alkalmas szerves hordozókat is kifejlesztettek, RF-plazmában végzett szintézisekre alapozva.

Enzim immobilizálására alkalmas, nanoszerkezetű biokatalizátor hordozókat állítottak elő. Kitozán alapú hordozókat három különböző módszerrel készítettek: kicsapatásos eljárással makrogömböket, emulziós térhálósítással mikrogömböket és ionotrop gél módszerrel nanoszemcséket állítottak elő. A mikrogömbök kívánt szemcseméretét számítógépes kísérlettervezés alapján állították be.

Kutatói ráfordítás: 5 fő, ebből intézeti állományban van: 3 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 11 M Ft, ebből pályázati forrás: 6,2 M Ft

Polimerek szintézise gyökös polimerizációval és kationos polimerizációval

Új szintézismódszert dolgoztak ki hiperelágazásos polimerek előállítására. A kvázielő polimerizáció mechanizmusának és kinetikájának törvényszerűségei alapján arra a következtetésre jutottak, hogy nemcsak a laboratóriumban előállított speciális szerkezetű, hanem a kereskedelmi forgalomban kapható monomerekből (sztirolból és akrilátokból) is egy lépésben állíthatók elő nagyszámú funkciós csoporttal rendelkező, hiperelágazásos polimerek.

Kvázielő gyökös és metallocén katalizátoros, polimerizációs technikák alkalmazásával új szerkezetű poli(propilén-g-sztirol) ojtásos kopolimereket fejlesztettek ki, amelyek polimer

elegyek kompatibilizátoraként alkalmazhatók. A képződő polimerek szerkezete és a szintézis paraméterei (oldallánc hossza, hőmérséklet, reagensek koncentrációja) közötti összefüggéseket derítették fel.

Karbokationos polimerizációs kutatásaik kiterjedtek az izobutilén, a sztírol és ezek származékainak karbokationos, valamint a heterociklusos vegyületek gyűrűfelynyílásos kationos polimerizációjának, a kapott polimerek módosítási reakcióinak, szerkezetének és tulajdonságainak vizsgálatára. Részt vettek egy új, többcélú vakcina polimer összetevőjének kifejlesztésében. A vakcina fő alkotója egy jól definiált szerkezetű, DNS-hordozó makromolekula, a mannozilált poli(etilén-imin).

Láncvégi funkciós csoportokat hordozó poliizobutilének környezetkímélő előállítási módszereinek kutatása során elsősorban a reakcióközeg hatását vizsgálták. Megállapították, hogy az ózonnal végzett, oxidatív láncvég-módosítás hatékonysága jelentősen javul a közeg polaritásának csökkenésével. Az izobutilén polimerizációjának mechanizmusát kutatva megállapították, hogy a protoncsapda jelenlétében, karbokationos körülmények között, a poliizobutilén láncok összekapcsolódnak. Ez az összekapcsolódás nagyobb mértékűvé válik a protoncsapda koncentrációjának és a reakcióközeg polaritásának növekedésével. Vizsgálták a sztírol karbokationos polimerizációját is. Sikerült jól definiált szerkezetű, kis polidiszperzitású polisztirolt előállítani viszonylag magas hőmérsékleten, az eddig alkalmazottaknál jóval környezetkímélőbb reakcióközegben.

Kutatói ráfordítás: 8 fő, ebből intézeti állományban van: 5 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 25 M Ft, ebből pályázati forrás: 6 M Ft

Nanoszerkezetű amfifil polimer kotérhálók

Az amfifil polimer kotérhálókval kapcsolatos kutatásaik egyik fontos részterülete a kotérhálók nanoreaktorként történő alkalmazása. Kétféle amfifil kotérhálóval végeztek „nanoreaktor” kísérleteket, melyek során vas-vegyületekből próbálták nanoméretű vas-oxidot előállítani. A poli(dimetil-amino-etil-metakrilát)-l-poliizobutilén illetve poli(dimetil-amino-etil-metakrilát)-l-poli(dimetil-sziloxán) amfifil kotérhálók megfelelő fázisaiba juttatott oldható vasvegyületekből megfelelő kezeléssel sikerült a vas-oxidot előállítani.

Tanulmányozták hidrofil szegmensekkel rendelkező, metakrilsav alapú amfifil kotérhálók duzzadási viselkedését szerves oldószerekben és vízben, a pH és sókoncentráció függvényében.

N-vinil-imidazol alapú amfifil kotérhálók előállítását dolgozták ki hidrofób polimerekkel; így poli(propilén-oxid)-dal illetve politetrahidrofuránnal. Tanulmányozták ezen új anyagok fémion-megkötő tulajdonságait és új összefüggéseket állapítottak meg a kotérhálók szerkezete és fémion megkötő képessége között.

Kutatói ráfordítás: 5 fő, ebből intézeti állományban van: 5 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 20 M Ft, ebből pályázati forrás: 12 M Ft

Polimerek degradációja és stabilizálása

Vizsgálták Phillips és Ziegler-Natta technológiával előállított polietilénhez adott különböző foszfortartalmú antioxidánsok hatásmechanizmusát. Megállapították, hogy a stabilizátorok hatékonyságát és a hatásmechanizmusát nagymértékben befolyásolja szerkezetük és a foszforhoz kapcsolódó szerves ligandumok jellege. Egyes stabilizátorok a feldolgozási stabilitást javítják, míg mások a termék színét befolyásolják kedvezően. A korábban

kidolgozott reológiai módszerrel megállapították, hogy a különböző stabilizátorok eltérő hatást gyakorolnak az első feldolgozási lépésben végbemenő folyamatokra. Megállapították, hogy a HDPE-hez adagolt egyes fenolos antioxidánsok hidrolitikus stabilitása kicsi, és erősen függ a stabilizátor kémiai szerkezetétől.

Kutatói ráfordítás: 3 fő, ebből intézeti állományban van: 3 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 10 M Ft, ebből pályázati forrás: 0 M Ft

Természetes és szintetikus polimerek és társított rendszereik

Intenzíven tanulmányozzák különböző polimerek és társított rendszereik szerkezet-tulajdonság összefüggéseit, és az azokban külső terheléskor végbemenő deformációs folyamatokat. Külső feszültség hatására a kompozitokban mikromechanikai deformációs folyamatok indulnak meg. Akusztikus emisszióval és a térfogati deformáció módszerével vizsgálták e folyamatokat, és megállapították, hogy a töltőanyagot tartalmazó kompozitokban a határfelületek elválása az uralkodó folyamat. Több társított rendszerben (nanokompozit, faliszt erősítésű anyagok) ugyanakkor egyéb mechanizmusok, pl. az erősítő anyag törése is előfordulhat. Jelentős haladást értek el a delaminációval előállított rétegszilikát nanokompozitok tanulmányozásában. Különböző mátrixú nanokompozitokról megállapították, hogy a rétegszilikát delaminációja gyakorlatilag mindig részleges. A feldolgozás során bonyolult szerkezet alakul ki, ami eredeti szemcséket, a polimer által duzzasztott szilikát egységeket és delaminált egyedi lemezeket tartalmaz. Nagy szilikáttartalomnál pedig egy kártyavárszerű szerkezet is kialakulhat. A delamináció mértékét a komponensek kölcsönhatása és kinetikai tényezők határozzák meg, de a szerkezetét és mennyiségét még nem lehet jellemezni.

Kutatói ráfordítás: 7 fő, ebből intézeti állományban van: 4 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 10 M Ft, ebből pályázati forrás: 5 M Ft

Elektrokémiai, elektroszorpciós és korróziós kutatások

Felületi feszültségmérésekkel kimutatták, hogy a perklorátionok redukciója során képződő kloridionok a vascsoport elemeinek passziválódását számottevően befolyásolják: a kloridionok hatására a felületi réteg szerkezete rendezettebbé válik.

Ir(100) és más egykristályokon végeztek elektrokémiai vizsgálatokat, a vizes elektrolitoldatokkal érintkező fémfelületeken végbemenő adszorpciós folyamatok és a határfelületen kialakuló elektromos kettősréteg szerkezetének jellemzésére. Impedancia mérésekkel kimutatták, hogy a kettősréteg töltése még az ún. kettősréteg-tartományban is elsősorban az adszorbeált anionok töltéséből adódik. A mérhető impedancia-spektrumok felvilágosítást adnak arról, hogy az anionok milyen kinetikával mozognak a külső- és a belső Helmholtz sík között.

Továbbfejlesztették az előző években nanorések kialakítására és az azokban történő molekuláris vezetőképesség mérésekre alkalmas kb. 0,1 pA felbontású elektrokémiai mérőberendezést. A pásztázó, elektrokémiai alagútmikroszkópia ún. távolság-spektroszkópiái üzemmódjához különösen előnyösen alkalmazható, nagy dinamikájú előerősítőt fejlesztettek ki.

Korróziós vizsgálataik során környezetbarát, vízzel hígított festékgyantákból kialakított filmek vízfelvételi kinetikáját követték impedancia-spektroszkópiával és gravimetriával. A mért elektromos paramétereket jól leíró modellt fejlesztettek ki polimer filmek duzzadására. Az Al-Cu kétfémes rendszer korróziós tulajdonságainak vizsgálatakor kimutatták, hogy

oxigén jelenlétében az alumínium lyukkorróziójának sebessége megnő. Ugyanakkor az alumínium felületén forró vízben is olyan passzív réteg alakulhat ki, amely képes meggátolni a lyukkorrózió megindulását. E felismerések lehetővé teszik a fűtési rendszerekben lejátszódó korróziós folyamatok értelmezését és a károsodások csökkentését. Hatékonyabb katódos védelmi eljárások kidolgozását elősegítendő, tisztázták a galvánanódos, katódos védelem elméleti alapjait és annak gyakorlati kérdéseit. Összefoglaló közleményt jelentettek meg a fémkorrózió körülményei közötti katalitikus oxigénredukcióról.

Kutatói ráfordítás: 8 fő, ebből intézeti állományban van: 7 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 31,2 M Ft, ebből pályázati forrás: 5,2 M Ft

Fémkomplexek szintézise és vizsgálata és analitikai vizsgálatok sokkomponensű biológiai rendszerekben

Előállították és vizsgálták az ezüst-permanganát piridinnel alkotott komplexeit. Bár az $[Agpy_2]MnO_4$ régóta ismert és a szerves kémiában oxidálószerként használt vegyület, összetétele és szerkezete a mai napig nem tisztázódott. Kimutatták, hogy az előállítás során három egymással egyensúlyban álló vegyület képződik. Ezek közül kettő szerkezetét is meghatározták. Spektroszkópiás és röntgenográfias vizsgálatokkal első ízben mutatták ki az aromás C-H...O-Mn hidrogénkötés jelenlétét és ennek következményét, a piridingyűrű kvázi-intramolekuláris alacsony hőmérsékleten végbemenő redoxireakcióját.

A vashiányos anémia kezelésére használható vas-poligalakturonát komplexek szintézise során megállapították, hogy a legkedvezőbb szintéziskörülmények között is legfeljebb 11,0% vasat tartalmazó komplex képződik. A komplexben a vas 93,5%-a vas(II) állapotú. Mivel felhasználás szempontjából a komplex vasleadó képessége döntő jelentőségű, ezért a vas kioldódását folyamatosan változó pH-jú rendszerben, az élő szervezetben lejátszódó folyamatokat modellezve vizsgálták. Megállapították, hogy a vas folyamatosan oldódik: öt óra alatt 77%-a kioldódik a komplexből.

Katódos stripping voltammetriás módszert dolgoztak ki a szelén koncentrációjának és módosulatainak meghatározására biológia rendszerekben. A kimutatási határ 0,1 $\mu g/l$, a lineáris tartomány szűk, és a minta-előkészítéstől, ill. a mátrix minőségétől függően változik. A kidolgozott módszer olcsóbb és érzékenyebb más műszeres technikáknál, és lehetővé tesz speciációs elemzést is.

Kutatói ráfordítás: 4 fő, ebből intézeti állományban van: 4 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 20 M Ft, ebből pályázati forrás: 1 M Ft

Környezetkémiai kutatások

Veszélyes szerves anyagok ártalmatlanítása RF termikus plazmában

Tanulmányozták különböző veszélyes szerves anyagok plazmakörülmények közötti termikus bontását és értékes termékekké történő átalakítását. A várható termékösszetételt termodinamikai számítások alapján becsülték. Különböző klórozott alifás és aromás szénhidrogéneknél vizsgálták a termikus bontás körülményei és a keletkező termékek fizikai és kémiai tulajdonságai közötti összefüggéseket. Bizonyították, hogy az RF termikus plazmákban ezek a fokozottan veszélyes szerves vegyületek is jó hatékonysággal bonthatók le, és belőlük értékesíthető termék (nanoszemcsés korom) állítható elő.

Kutatói ráfordítás: 4 fő, ebből intézeti állományban van: 2 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 3 M Ft, ebből pályázati forrás: 2 M Ft

A PVC környezetileg előnyös lebontása és átalakítása; műanyag hulladékok pirolitikus újrahasznosítását elősegítő kémiai reakciók kutatása

Tanulmányozták egyes stabilizátorok és egy antioxidáns hatását a poli(vinil-klorid) (PVC) enyhén oxidáló körülmények között végzett, láncszakadással kísért termikus bomlására. Megállapították, hogy az iparban alkalmazott hőstabilizátorok nem képesek megakadályozni a láncszakadási folyamatot. Azt találták, hogy az egyik elterjedten alkalmazott antioxidáns nemhogy gátolná a PVC termooxidatív láncszakadását, hanem jelentős mértékben gyorsítja azt. Vizsgálataikat kiterjesztették a legelterjedtebben alkalmazott lágyítószer, a dioktil-ftalátot oldószerként tartalmazó PVC-re is. A kapott eredmények arra utalnak, hogy dioktil-ftalát jelenlétében a PVC termooxidatív láncszakadása jelentősen gyorsabb, mint inert oldószerben.

Vizsgálták, miként lehet eltávolítani elektronikai hulladékok pirolízisolvajából a brómtartalmú égésgátlókból képződött bomlástermékeket. Nátrium-zeolitok és mezopórusos alumínium-szilikát katalizátorok hatását tanulmányozták a tetrabrom-biszfénol-A égésgátló hőbomlástermékeire. A brómozott aromás vegyületeket jelentős mértékben ki lehetett szűrni a többi szerves pirolízis termék közül a tetrabrom-biszfénol-A molekula méreténél nagyobb pórusméretű nátrium-zeolitokkal. Felderítették, hogy az antimon-oxid javítja a brómozott aromás vegyületek égésgátló hatékonyságát, egyúttal jelentősen gátolja az ütésálló polisztirol hőbomlási reakcióit is. Ezen túlmenően, az antimon-oxid fontos szerepet játszhat a szerves brómtartalom szervetlenné alakításában is.

Kutatói ráfordítás: 4 fő, ebből intézeti állományban van: 3 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 15 M Ft, ebből pályázati forrás: 2,7 M Ft

Biomassza anyagok hasznosításának kutatása termikus módszerekkel

Az Európai Unió LIFE programjának egyik projektjében a faszén erőműi felhasználásának lehetőségét és gazdaságosságát vizsgálják. A projekt alap gondolata: a biomassza anyagok energiataralmának zömét célszerű hatékonyan gyártható faszénbe koncentrálni, lehetővé téve a biomassza alapú energiahordozók gazdaságos szállítását. Megállapították, hogy a szállítás és raktározás során különös gondot kell fordítani a faszén porlásának elkerülésére, mivel bizonyos gyártási paraméterek és nyersanyag típusok esetén igen reaktív, öngyulladásra hajlamos faszén por képződik. Amerikai együttműködés keretében ugyanakkor azt állapították meg, hogy a faszénporok nagy reaktivitása előnyös is lehet elgázosítás vagy közvetlen motorhajtóanyagként való hasznosítás esetén. Részt vettek az első olyan tüzelőanyag cella kifejlesztésére irányuló kutatásokban, amely a faszén oxidációjával közvetlenül termel elektromos energiát.

Részt vesznek a 2006-ban alakult nemzetközi Center of Competence in Thermo-Chemical Treatment of Biomass (CTCB) nevű virtuális kutatóhálózatban. A CTCB kutatási tervében szereplő egyik kulcstémához (energiafűvek és nagy szilikáttartamú biomasszák optimális feldolgozása) csatlakozva tanulmányozták a Magyarországon termelt energiafű hőbomlási folyamatait, valamint a szalmából nyerhető pirolízisolvaj összetételét és minőségét befolyásoló katalizátorok alkalmazási lehetőségeit. Megállapították, hogy bizonyos zeolit katalizátorok hatékonyan csökkentik a pirolízisolvaj levoglukozán tartalmát és a nagyobb molekulatömegű fenolok mennyiségét, ezáltal a pirolízisolvaj stabilitása növelhető.

Kutatói ráfordítás: 3 fő, ebből intézeti állományban van: 3 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 10 M Ft, ebből pályázati forrás: 2,3 M Ft

Anyag- és energiatakarékos technológiák fejlesztése talaj, víz és levegő tisztítására

Korábbi kutatásaikra alapozva, ipari partnerekkel együttműködve technológiai terveket és a gazdasági elemzést készítették, a Garé és Hidas térségében található mintegy 100 000 tonna tömegű klórbenzolos talaj ipari méretű tisztítására. A talajvíz tisztítására Hidason felépített 50 m³/nap kapacitású, napenergiás fotokatalitikus és sztrippelő referenciaüzem jelenleg vizes szuszpenzióban használja a TiO₂ katalizátort. Mivel a katalizátor szuszpendáltatása és a tisztított vízből mikroszűréssel történő visszanyerése eszköz- és energiaigényes, a gazdaságosság javítása céljából megkezdték fix ágyas TiO₂ katalizátorok kifejlesztését.

Korábbi hazai cianmentesítési tapasztalataikra alapozva elkészítették egy külföldi, nagy tömegáramú kohógáz-mosó rendszert működtető vaskohászati üzem cianidos mosóvizének tisztítására szolgáló mérő és beavatkozó rendszer terveit.

Megtervezték és elkészítették az előző évben kifejlesztett, a festőüzemekben levegőtisztításra használt aktív szén adszorbensek helyszíni regenerálására szolgáló technológia mérő és folyamatszabályozó rendszerét.

Olaszországi kültéri vizsgálatok eredményei alapján elvégezték a sekélyvizű tavak napenergiás sótalánítására kifejlesztett ipari modul CFD analízisét.

Kutatói ráfordítás: 2 fő, ebből intézeti állományban van: 2 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 25 M Ft, ebből pályázati forrás: 12,3 M Ft

Korróziógátló inhibitor-kompozíció kidolgozása, analitikai módszerfejlesztés

Többkomponensű fémes rendszerekre, még az egyes fém-párok galvanikus kapcsolata esetén is hatékony korrózióvédelmet biztosító adalékkompozíciót fejlesztettek ki. Az eredmények alapján reális lehetőség van az etilénlikolt kiváltó, propilénlikol alapú, a gépjárművek hűtőrendszere mellett ipari rendszerekben is használható, alacsony dermedéspontú hűtőközeg kifejlesztésére. A kidolgozott korrózióvédő kompozíció kísérleti gyártása és üzemi vizsgálata ipari partnerüknél megkezdődött.

Különböző környezetvédelmi analitikai megbízásokhoz kapcsolódóan szennyvizek, hulladékok, valamint szennyvíziszapok vizsgálatára alkalmas analitikai módszereket optimalizáltak. Vizsgálták poliaromás szénhidrogének visszanyerésének lehetőségeit, extrakcióját és kromatográfias meghatározását fenéküledékekből. Összehasonlították a különböző extrahálószeres és extrakciós technikák hatását az egyes komponensek visszanyerésének hatásfokára. Vizsgálták szennyvíziszapok savas feltárásának hatásfokát eltérő savkeverékek és feltárási körülmények között, és optimalták a feltárások körülményeit.

Kutatói ráfordítás: 2 fő, ebből intézeti állományban van: 2 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 9,5 M Ft, ebből pályázati forrás: 0 M Ft

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Az AKI kutatói 2006-ban is számos hazai kutatóhellyel dolgoztak együtt sokféle kutatási témában. Különösen intenzívek voltak kutatási kapcsolataik az MTA intézeteivel, így a Kémiai Kutatóközpont másik három intézetével, a Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Kutatóintézetrel és az Izotóp Kutató Intézettel. A hazai egyetemek közül az Eötvös Loránd Tudományegyetemmel, a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetemmel, a Semmelweis Egyetemmel, a Szegedi Egyetemmel, a Pannon Egyetemmel, a Debreceni

Egyetemmel, a Corvinus Egyetemmel és a Közép-Európai Egyetemmel működtek együtt különböző témákban.

Az intézet a Pannon Egyetem Műszaki Kémiai Intézetével közös professzori laboratóriumot működtet. Az Alkalmazott Polimer Fizikai Kémiai Osztály egy szakmai egységet alkot a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszékével.

Az intézet munkatársai több egyetemen (Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Közép-Európai Egyetem, Debreceni Egyetem, Eötvös Loránd Tudományegyetem, Miskolci Egyetem, Pannon Egyetem, Semmelweis Egyetem, Szegedi Egyetem) tartottak graduális és posztgraduális előadásokat, vezettek szemináriumokat és laborgyakorlatokat.

Témáik többségét nemcsak hazai, hanem nemzetközi kutatási együttműködésben is művelték. Formális kétoldalú kutatási együttműködések keretében az alábbi témákban és partnerekkel dolgoztak együtt.

Polipropilén plazmás felületkezelését a pozsonyi Comenius Egyetemmel, az új szilícium-organikus polimereket a romániai Petru Poni Intézettel, fafelületek felületi spektroszkópiáját pedig a svéd Luleå University of Technology kutatóival közösen tanulmányozták.

Elektrokémiai kettősréteg-vizsgálatokat a német Ulmi Egyetemmel közösen végeztek. A Jülichi Kutató Központtal együttműködve elektrokémiai úton állítottak elő nanoréseket és közösen jellemezték azokat.

Az intézet munkatársai a belgrádi Vinca Magfizikai Kutatóintézet munkatársaival együtt fullerének RF termikus plazmában történő előállítását tanulmányozták. Az indiai Jodhpur Egyetemmel pedig permanganátok szintézisét és reakcióit vizsgálták.

Nanokompozitok szerkezet/tulajdonság összefüggéseinek megállapításában eredményesen működtek együtt a Brüsszeli Szabad Egyetemmel, a holland Twente Egyetemmel és a koreai Inha Egyetemmel. A vezetőképes nanokompozitokkal kapcsolatos kutatásokat pedig a szlovák Polimer Intézettel közösen folytatták.

Különböző biomassza anyagok és a faszenek reaktivitásának felderítésében a trondheimi Norvég Tudomány és Technológiai Egyetem és az USA-beli Hawaii Egyetem kutatóival dolgoztak együtt. Kapilláris kromatográfiás kutatásaikban a Cseh Tudományos Akadémia Fiziológiai Intézete volt az együttműködő partnerük.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

Hazai pályázatok

Az intézet kutatói által 2006-ban művelt OTKA pályázatok közül az alábbiakban értek el figyelemre méltó eredményeket:

- PVD módszerrel, magnetronos porlasztással nagy keménységű W- és Si-tartalmú, szénalapú nanokompozit rétegeket állítottak elő (T 043359). Hidegplazmás kezelést alkalmazva jelentős mennyiségű C-NH_x típusú funkciós csoportot alakítottak ki többfalú szén nanocsövek felületén (T 043685). Kidolgozták tervezett tulajdonságú ferritek előállítási módszerét termikus plazmában (T 047360).

- Az elektrokémiai adszorpcióval kapcsolatos vizsgálatok (T 42452), (T 045888), valamint a rénium, irídium és ródium idegen fémfelületeken végbemenő adszorpciójának és a rénium korróziógyorsító hatásának vizsgálata (T 31846) lehetőséget nyújtanak a korróziós folyamatok első elemi lépésének pontosabb megismeréséhez, ami alapul szolgál hatékonyabb korrózióvédelmi eljárások és technológiák kidolgozásához. Ez utóbbira irányul a réz-alumínium fém pár korróziós sajátosságait tanulmányozó pályázat is (T 37693).
- Módszereket dolgoztak ki nanoszerkezetű polimer kotérhálók, szabályosan váltakozó szerkezetű amfil polimer kotérhálók, valamint hiperelágazásos polimerek szintézisére (IN64295), (F61299), (T046759), (T048409).
- Megállapították, hogy az elektronikai hulladékok pirolízisekor kapott olajokból a bromozott aromás égésgátlók pirolízis termékei megfelelő pórusméretű nátrium-zeolitokkal eltávolíthatók (T 047377). Megállapították, hogy a légköri aeroszol mintákból kioldható szerves anyag fő tömegében zsírsavakból, illetve zsírsav észterekből áll (T 043578).
- Meghatározták energiaültetvényekről származó lágyszárú növények és faminták összetételét, termikus tulajdonságait és extrahálható komponenseit (K061504).

Az intézet kutatói egyéb hazai kutatási pályázatokban a következő eredményeket érték el 2006-ban:

- Fehérjék szabályozott hatóanyag leadását biztosító új típusú, biokompatibilis polimert, valamint szerves hordozóanyagokat állítottak elő (GVOP-3.1.1.-2004-05-0031/3.0).
- *In vitro* fémfelszívódási vizsgálatok alapján megállapították, hogy a Mg és a Zn a fém minőségétől, kémiai formájától, koncentrációjától és az alkalmazott körülményektől függően különböző mértékben, de hatásosan átjutnak egyes biológiai membránokon (NKFP 1A005/2004).
- Előre meghatározott tulajdonságú poli(etilén-imin) előállítását dolgozták ki (DermaVir HIKC05 Asbóth program).
- Környezetbarát, gazdaságos adalékanyag rendszert és technológiát dolgoztak ki (GVOP-3.1.1-2004-05-0027/3.0).
- Eljárást és berendezést hoztak létre a szerves szennyezőket tartalmazó levegő tisztítására alkalmazott aktív szén adszorbensek regenerálására (GVOP-3.1.1./2004).
- Megállapították különböző adalékrendszerek hatását poliolefinekben, és faliszt tartalmú kompozitokat fejlesztettek ki (Eureka)

Nemzetközi pályázatok

Az intézet kutatói az alábbi eredménnyel vettek részt 2006-ban EU pályázatok kidolgozásában:

- Módszereket dolgoztak ki enzimek rögzítésére alkalmas, kitozán alapú, makro-, mikro- és nanoszemcsés hordozók előállítására (MRTN-CT-2004-512247).
- Megállapították, hogy a szállítás és raktározás során különös gondot kell fordítani a faszén porladásának elkerülésére, mivel bizonyos gyártási paraméterek és nyersanyag típusok esetén igen reaktív, öngyulladásra hajlamos faszén por képződik (LIFE05 ENV/IT/000801).

Egyéb nemzetközi vagy külföldi forrásból művelt témák:

- A Cyprus Research Promotion Foundation támogatásával polimer kotérhálók kutatását végezték, együttműködésben a Ciprusi Egyetemmel.
- A DuPont Research Award jóvoltából új típusú multifunkciós polimereket kutattak.
- A Clariant Huningue S.A., France megbízásából polimerek stabilizálása témában foszfor tartalmú stabilizátorok hatásmechanizmusát határozták meg.
- Nanoszemcsés katalizátorokat állítottak elő RF termikus plazmában. Együttműködő intézmény: BASF, Németország.
- A Max Planck Institute for Colloids and Interfaces (Potsdam-Golm, Németország) és az AKI kutatói közösen tanulmányozták új, amfifil tulajdonságú, nanotemplátként alkalmazható poliizobutilén-b-poli(etilénoxid) blokk-kopolimerek előállítását.

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

1. Tóth A, Mohai M, Ujvári T, Bertóti I: Composition, structure and nanomechanical properties of C-Si-N thin films deposited by ion implantation assisted plasma beam CVD, Surf. Coat. Technol. 200, 6420-6424 (2006)
2. Li Z, Han B, Mészáros G, Pobelov I, Wandlowski Th, Błaszczyk A, et al. (7): Two-dimensional assembly and local redox-activity of molecular hybrid structures in an electrochemical environment, Faraday Discussions, 131, 121-143 (2006)
3. Horányi G, Láng G: Double-layer phenomena in electrochemistry: Controversial views on some fundamental notions related to electrified interfaces, Journal of Colloid and Interface Science, 296, 1-8 (2006)
4. Szépölgvi J, Markovic Z, Todorovic-Markovic B, Nikolic Z, Mohai I, Farkas Zs, et al. (10): Effects of precursors and plasma parameters on fullerene synthesis in RF thermal plasma reactor, Plasma Chem. Plasma Process., 26, 597-608 (2006)
5. Kótai L, Fodor J, Jakab E, Sajó I, Szabó P, Lónyi F, et al. (10): A thermally induced low-temperature intramolecular redox reaction of bis(pyridine)silver(I) permanganate and its hemipyridine solvate, Transition Metal Chemistry, 31, 30-34 (2006)
6. Haraszi M, Tóth E, Iván B: Poly(methacrylic acid)-1-polyisobutylene: a novel polyelectrolyte amphiphilic conetwork, Chem. Mater., 18, 4952-4958 (2006)
7. Kádár F, Százdi L, Fekete E, Pukánszky B: Surface characteristics of layered silicates: influence on the properties of clay/polymer nanocomposites, Langmuir 22, 7848-7854 (2006)
8. Mink G: Development of low cost and highly efficient solar desalination systems. Environmental Science and Technology in Hungary, Editor: Láng I, Műszaki Kiadó, pp. 362-368 (2006)
9. Blaszó M, Czégény Zs: Catalytic destruction of brominated aromatic compounds studied in a catalyst microbed coupled to gas chromatography/mass spectrometry, Journal of Chromatography A, 1130, 91-96 (2006)
10. Mikšík I, Sedláková P, Mikulíková K, Eckhardt A, Cserhádi T, Horváth T: Matrices for capillary gel electrophoresis – a brief overview of uncommon gels, Biomedical Chromatography, 20, 458-465 (2006)

VI. A kutatóhely 2006. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

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

Átlaglétszám ¹ :	66	Ebből kutató ² :	52
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			22
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma:			127
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ³ :			126
<i>Ebből</i> idegen nyelvű külföldi folyóiratban:	63	idegen nyelvű hazai folyóiratban:	5
nemzetközi együttműködés keretében:	24	SCI által regisztrált folyóiratban:	63
összesített impakt faktor:	120,664	összes hivatkozás száma ⁴ :	1267
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			1037
Megjelent könyv <i>magyarul</i> :	0	könyvfejezet:	7
<i>idegen</i> nyelven könyv:	0	könyvfejezet:	30
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Megvédett PhD értekezés:	2	Megvédett MTA doktori értekezés ⁵ :	0
Bejelentett találmányok száma:	1	Megadott szabadalmak száma:	1
<i>ebből</i> külföldön:	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma ⁶ :	51	poszterek száma:	45
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ⁷ :			18
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	3	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	11
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ⁸ :			343,8 MFt
Beruházási támogatás:	0 MFt	Fiatal kutatói álláshelyek száma ⁹ :	5
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			13
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			29,9 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			4
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	4	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	5,5 MFt
Az év folyamán művelt NFT témák száma ¹⁰ :			3
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			23,6 MFt
Külföldi vagy nemzetközi forrásból művelt témák száma ¹¹ :			4
EU forrásból:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	5,8 MFt
Egyéb:	3	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	8,8 MFt
Egyéb pályázatok keretében művelt témák száma ¹² :			1
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			19,4 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			42
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			84,6 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány ¹³ :			0 MFt

Az intézet kiemelten sikeres kutatási területei 2006-ban

Megújuló energiaforrások hatékony felhasználására irányuló kutatások és fejlesztések

A megújuló energiaforrások felhasználásának növelése hazánkban is, és az Európai Unióban is igen fontos. Ezzel mind a globális klímaváltozásért döntően felelős CO₂ kibocsátása, mind pedig a régió energiaimporttól való függése csökkenthető. A tárgykörben az Intézet a megújuló energiaforrások hatékonyabb felhasználási módjait és újszerű alkalmazási lehetőségeit vizsgálja.

A faszén felhasználásának újszerű lehetőségei

Az elmúlt években kidolgozták a faszén nagy hatékonyságú ipari előállítási technológiáját. Segítségével a biomasz anyagainak energiataralmának zöme a képződő termékben koncentrálódik, lehetővé téve a biomassza, mint energiahordozó gazdaságos szállítását. Az Intézet részt vesz az Európai Unió LIFE programjának egyik, a Duferco Italia Holding által vezetett projektjében, amely a faszén erőművi felhasználásának lehetőségét és gazdaságosságát vizsgálja. Az Intézet kutatói megállapították, hogy a szállítás és raktározás során különös gondot kell fordítani a faszén porladásának elkerülésére, mivel bizonyos gyártási eljárások és nyersanyag típusok esetén a faszén por igen reaktív, öngyulladásra hajlamos. Ugyanakkor azt is megállapították, hogy a faszén porok reaktivitása előnyös is lehet elgázosítás vagy közvetlen motorhajtóanyagként való hasznosítás esetén. Utóbbi eshetőséggel kapcsolatban megjegyezhető, hogy Rudolf Diesel az első dízel motort a szénbányászat során képződő szénpor motorhajtóanyagként való felhasználására hozta létre. A faszén az ásványi szeneknél jóval kedvezőbb tulajdonságokkal rendelkezik: kevesebb hamut ad, elhanyagolható a kéntartalma, és jóval reaktívabb.

A faszén energetikai hasznosításának az a legígéretesebb módja, ha a $C + O_2 = CO_2$ reakció energiataralmát közvetlenül, nagy hatásfokkal alakítják át elektromos energiává tüzelőanyag cellákban. 2006-ban az Intézet amerikai együttműködő partnere, a Hawaii Egyetem elkészítette az első faszén hasznosító tüzelőanyag cellát. A fejlesztésben az Intézet is részt vett, az egyik munkatárs társszerzője a felfedezésről beszámoló, jelenleg nyomdában lévő közleménynek.

Motorhajtóanyagok előállítása biomasz pirolízisével

Az Intézet részt vesz a 2006-ban alakult nemzetközi *Center of Competence in Thermo-Chemical Treatment of Biomass* (CTCB) nevű virtuális kutatóhálózatban. A kutatóhálózat vezetője a Karlsruhei Kutatóközpont Technológiai Intézete. A CTCB kutatási tervében szereplő egyik kulcstémához (energiafűvek és nagy szilikáttartamú biomasszák optimális feldolgozása) csatlakozva az Intézet tanulmányozta a Magyarországon termelt energiafű hőbomlási folyamatait, valamint a szalmából nyerhető pirolízisolaj összetételét és minőségét befolyásoló katalizátorok alkalmazási lehetőségeit. Megállapították, hogy bizonyos zeolit katalizátorok hatékonyan csökkentik a pirolízisolaj levoglukozán tartalmát és a nagyobb molekulatömegű fenolok mennyiségét, ezáltal a pirolízisolaj stabilitása növelhető.

A napenergia hasznosítása édesvíz előállítására

Az elmúlt évtizedben különböző típusú, a hagyományosnál gazdaságosabb és a kondenzációs hő visszajáratása révén jóval termelékenyebb eljárásokat fejlesztettek ki édesvíz előállítására tengervízből, illetve sós tavakból. Az egyik legolcsóbb, sorozatgyártásra alkalmas modult magyar-olasz együttműködésben Cagliari szigetére telepítették bevizsgálás, továbbfejlesztés

és demonstráció céljából. Az új technológia célterülete a harmadik világ, ahol kétmilliárd ember él egészséges ivóvíz nélkül.



1. ábra: Felhagyott sólepárlók tavaira tervezett üzemi modul Szardínia szigetén

Napenergiás fotokatalitikus víztisztítás

Az NKTH által támogatott program keretében eljárást dolgoztak ki a talajba került, biológiailag nem bontható klórbenzol szennyezők eltávolítására. Az $50 \text{ m}^3/\text{nap}$ kapacitású, folyamatos működésű, mobil típusú víztisztító referencia-üzemet kisvállalkozókkal együttműködve építették és Hidas térségébe telepítették. Üveggel fedett tálcás reaktorok képezik a tetőszerkezetet, ez alatt helyezkednek el a kiegészítő berendezések. A fotokatalizátor anatóz-TiO₂. Borús időben, valamint éjszaka a reaktorban lecsorgó vékony vízrétegből ellenáramú levegővel hajtják ki a vízzel *nemideális* oldatot képező, ezért jelentős illékonyosságú klórbenzolokat, melyeket speciális katalitikus oxidációs reaktor alakít át vízgőzzé, szén-dioxidá és sósav gázzá. A reaktorból kijövő gázkeveréket a belépő tisztítandó vízbe vezetik, ahol nagy feleslegben lévő hidrokarbonátok közömbösítik a sósavat.



2. ábra: Napenergiát hasznosító víztisztító Hidas külterületén

