

amelyekből a gyógyszermolekula (jelen esetben az FdUMP) *in vivo* enzimatisz hidrolízis útján szabadul fel, a tumorgátló szerek egy új családját képviselik.

Öt új peptid nukleinsav (PNS) monomert szintetizáltak, amelyek PNS oligomerekbe történő beépítésével várhatólag növelhető a PNS-DNS, ill. PNS-RNS duplexek stabilitása, valamint a PNS szál bázishiba felismerő képessége. Mindennek a nukleinsav alapú diagnosztikumok (PNS mikrochipek) továbbfejlesztésében van gyakorlati jelentősége.

<i>Kutatói kapacitás:</i>	3,3 fő
<i>ebből intézeti állományban:</i>	3,3 fő
<i>Teljes ráfordítás:</i>	23 M Ft
<i>ebből pályázati forrás:</i>	2,15 M Ft

A potenciális antiepileptikum, Q5 ionotróp (AMPA) és metabotróp Glu-receptorok funkcióira gyakorolt hatását vizsgálták hippocampusz szeletben kontrol és epileptikus körülmények között elektrofiziológiai mérési technikák alkalmazásával.

GABA_A receptor alloszterikus benzodiazepin kötőhelyén ható triazin-származékokat terveztek és tesztelték a szintetizált vegyületeket.

Reaktív oxigéngyökök képződését vizsgálták epilepsziás körülmények között izolált mitokondriumokban fluoreszcencia-detektáláson alapuló gyorskinetikai technika alkalmazásával, valamint hippocampusz szeletben konfokális lézer-szenning mikroszkópiával.

Jellemezték egyes központi idegrendszeri szomatosztatin-receptor altípusok és a szomatosztatin analóg, TT-232 kölcsönhatását: receptorkötődési és funkcionális vizsgálatokat végeztek *in vitro* és *in silico*.

Egy függőséget kialakító drog, a GHB hatását vizsgálták a nucleus accumbensben kötődési és funkcionális mérésekkel, elektrofiziológiai és radioaktív nyomjelzési technikák alkalmazásával.

<i>Kutatói kapacitás:</i>	11 fő
<i>ebből intézeti állományban:</i>	11 fő
<i>Teljes ráfordítás:</i>	88 M Ft
<i>ebből pályázati forrás:</i>	52 M Ft

Összehasonlító vizsgálatokat végeztek patkány máj S9 frakció és májsejtek benz[a]pirén és 2-aminoantracén metabolikus aktiválására nézve. Megállapították, hogy a májsejtek alkalmazása igen hasznos modell lehet a testidegen vegyületek mutagén hatásának becslésében.

Részletesen vizsgálták a p-nitrofenol-hidroxiláz reakció gátolhatóságát és megállapították, hogy ezen reakciót a CYP2A6, a CYP2C19 és a CYP2E1 enzimek katalizálják. Megállapították továbbá, hogy a dexametazon humán májsejtekben gátolja a CYP1A enzim 3-metilkolantrénnel való indukcióját, valamint hogy a gátlás a mRNS átíródásának a gátlására vagy a mRNS fokozott bomlására vezethető vissza.

<i>Kutatói kapacitás:</i>	4 fő
<i>ebből intézeti állományban:</i>	4 fő

Teljes ráfordítás: 32 M Ft
ebből pályázati forrás: 3,51 M Ft

Megállapították, hogy cukorbetegséget modellező kísérleti állatokban a betegség korai szakaszában jelentkező szívnagyobbodás mechanizmusa milyen mértékben függ a nitrogén-monoxid és a peroxinitrit keletkezésétől, illetve a karbonilezési reakcióktól.

Tumorellenes fotoszenzibilizátorok felhalmozódásának egy saját összeállítású fluoreszcenciás berendezéssel történő *in vivo* mérési módszerét dolgozták ki.

A sejtletpadást elősegítő, EGF receptorfüggő jelátviteli rendszerben szerepet játszó egyes fehérjék és szintetikus vegyületek aktivitását mérték ki tumoros és idegrendszeri eredetű sejtvonalakban.

Elsőként a világon olyan kemometriai módszereket dolgoztak ki, amelyekkel lehetővé vált kén-, nitrogén- és oxigénatomot tartalmazó heterociklusos vegyületek retenciós indexeinek előrejelzése.

Sikerült a korábban változókiválasztásra szolgáló páronkénti korrelációs módszerüket továbbfejlesztelniük, osztályozásra alkalmassá tenniük és összehasonlítani a Prokrusztesz-forgatásos eljárással.

Kutatói kapacitás: 9 fő
ebből intézeti állományban: 8 fő
Teljes ráfordítás: 56 M Ft
ebből pályázati forrás: 19,4 M Ft

A heparin és a heparán-szulfát oligoszacharid egységeinek előállítására kidolgozott szintézisstratégiájukat kiterjesztették magasabb tagszámú oligoszacharidok szintézisére. Ily módon ortogonálisan védett tri- és tetra-szacharidokat szintetizáltak. A védett oligoszacharidokból a heparin és a heparin-szulfát alkotórészét képező szulfatált célvegyületeket állítottak elő biológiai vizsgálatok céljára. A kidolgozott szintézisstratégiát nemzetközi kooperációban kiterjesztették azacukor-tartalmú glikozidáz-inhibitorok előállítására is. Az együttműködés keretében a heparánáz enzim inhibitorait szintetizálták. Új reagenst vezettek be szénhidrátok ciklikus benzilidén acetálgjainak benzil-éterekké történő átalakítására. A kidolgozott reakció jobb hozamú és szélesebb körben alkalmazható, mint az eddig ismert módszerek.

Új, igen reaktív alkilszulfenilező reagenst fejlesztettek ki. A reagens alkalmazásával új, rendkívül hatékony glikozilezési módszert vezettek be.

Kutatói kapacitás : 5 fő
ebből intézeti állományban: 5 fő
Teljes ráfordítás: 25 M Ft
ebből pályázati forrás: 10 M Ft

A tumor kemoterápiában alkalmazható glutation peptidomimetikumokat állítottak elő, szintézisükre új módszert dolgoztak ki. Új izotiocianát rovarattraktánsokat azonosítottak és szintetizáltak.

<i>Kutatói kapacitás:</i>	3 fő
<i>ebből intézeti állományban:</i>	3 fő
<i>Teljes ráfordítás:</i>	18 M Ft
<i>ebből pályázati forrás:</i>	2,5 M Ft

Jelzéstechnikai eljárásokat dolgoztak ki több, gyógyszerre fejlesztendő vegyület ^{14}C - és/vagy ^3H -izotópokkal jelzett változatainak előállítására.

<i>Kutatói kapacitás:</i>	2 fő
<i>ebből intézeti állományban:</i>	2 fő
<i>Teljes ráfordítás:</i>	16 M Ft
<i>ebből pályázati forrás:</i>	3 M Ft

Beszámoló egy kiemelt kutatási eredményről

Mitokondriális károsodás in vitro epilepsziamodellben

A felnőttkori epilepszia egyik leggyakoribb formája, a halántéklebeny epilepszia, az esetek egy részében nem kezelhető gyógyszeres úton. Ennek az ún. gyógyszer-rezisztenciának a hátterében rejlő, sejtszintű folyamatokat eddig még nem sikerült azonosítani. A korábbi évek kutatása az epilepsziával járó receptorszintű és anatómiai elváltozások vizsgálatára irányult. Ugyanakkor a gyógyszer-rezisztens epileptikus szövetek tanulmányozása az idegsejtek anyagcseréjének hosszú távú változásaira terelte a figyelmet.

Epileptikus aktivitás alatt az idegsejtek ion- és energiaháztartásának fenntartása fokozott terhet ró az energiahordozó molekulák (ATP) szintéziséért felelős sejtservecskékre, a mitokondriumokra. Habár többféle olyan mechanizmus létezik, amely a mitokondriális ATP-szintézist a sejt igényeihez igazítja, jelenleg nem ismeretes, hogy ezek hogyan működnek patológiás körülmények között és fokozott aktiválódásuk milyen maradandó hatással van a mitokondriumokra. Mivel három olyan mitokondriális kulcsenzim is van, amelynek működését a kalciumion-szint növelése serkenti, a mitokondriális kalciumion-koncentráció vizsgálata az ATP-szintézis változásaira enged következtetni. Ugyanakkor a túlzott kalciumion-felvétel a mitokondriumok károsodását és így az energiaháztartás deficitjét okozhatja.

Az Intézet Neurokémiai osztályának kutatói az idegszelet tenyészeteken hipomagnéziás körülményekkel kiváltott epileptikus aktivitást választották a gyógyszer-rezisztens epilepszia modelljéül, és az epileptikus aktivitás következtében kialakuló metabolikus változásokat elektrofiziológiai és mikrofluorimetriás módszerekkel követték nyomon. Kezdeti kísérleteikben kimutatták, hogy a mitokondriális membránpotenciál és a mitokondriális kalciumion-koncentráció megváltozik epileptikus rohamok alatt és ezen változásoknak a szabad gyökök képződésének fokozása révén szerepük van az epileptikus állapotot követő idegsejtpusztulásban. Az Intézet új beruházásának, egy 'state-of-art' kombinált elektrofiziológiai és pásztázó-lézer konfokális mikroszkópos mérőállomásnak a segítségével a vizsgálatokat kiterjesztették egyedi idegsejtek, sőt, egyedi mitokondriumok szintjére is. Így

elsőként sikerült megmutatniuk, hogy az epileptikus aktivitás egy-egy specifikus formája miként befolyásolja a mitokondriumok működését. A rohamok közötti, ún. interiktális epileptikus aktivitás alatt a mitokondriális kalciumion-koncentráció és membránpotenciál fluktuálni kezdett az idegnyúlványok egyes régióiban. Az epileptikus rohamok alatt ez a fluktuáció kiterjedt az egész idegsejtre és a mitokondriumok egyszerre depolarizálódtak. A mitokondriumok kalciumion-felvételét és -leadását specifikusan blokkoló szerekekkel megállapították, hogy a mitokondriumok kalciumion-fluktuációja és a membránpotenciál változása között ok-okozati összefüggés van. Ugyanakkor a mitokondriális permeabilitási csatorna aktiválódásának nem volt szerepe a mitokondriumok depolarizálódásában, ami ellentétben áll a túlzott idegi serkentéssel kiváltott sejtkárosodásnál (excitotoxicitás) tapasztaltakkal. Mivel a mitokondriális membránpotenciál az ATP-szintézis fő hajtóereje, az epileptikus rohamok okozta depolarizáció károsan befolyásolja az idegsejtek energiaháztartását és hozzájárulhat a patológiás állapot súlyosbodásához.

Az epileptikus aktivitás közvetlenül, illetve a szuperoxid gyökkanion termelés fokozásán keresztül kifejtett hatása tartósan megváltoztathatja a mitokondriumok működését, és érzékenyebbé teheti az idegsejteket a visszatérő rohamokkal szemben. Ezen hosszú távú változások tanulmányozása egy berlini kutatóintézettel (Humboldt Egyetem) együttműködésben zajlott. Krónikusan epileptikus humán és állati szövetmintákból a mitokondriális károsodás jeleit sikerült kimutatni. Fiziológiás ingerlés hatására az egészséges idegszövet metabolikus aktivitása fokozódik, amelyet az ATP-szintéziséhez elengedhetetlen molekula, a NADH szintjének növekedése jelez. A krónikusan epileptikus idegszövetben a metabolizmus aktiválódása nem következett be, és ez hiányosság az epileptikus aktivitás által legjobban érintett anatómiai struktúrákban volt a legkifejezettebb. Ugyanakkor pásztázó-lézer konfokális mikroszkópiával ki lehetett mutatni, hogy a mitokondriumok rendelkeznek a kalciumion és a szubsztrát transzportjához szükséges membránpotenciállal. Ebből arra lehet következtetni, hogy a NADH-szintézis hibás szabályozásának hátterében a kalciumion-függő mitokondriális dehidrogenáz enzimek károsodása áll.

Mind a krónikus, mind az akut epilepsziamodellekből származó eredményeknek, az epileptikus aktivitás metabolikus következményeinek leírásán túl, jelentősége van potenciális neuroprotektív stratégiák kidolgozásában is. A gyógyszer-rezisztencia mechanizmusának megismerése pedig az antiepileptikus terápia számára jelenthet áttörést.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Az Intézet eredményesen működik együtt hazai egyetemi kutatóhelyekkel. Ezek közül kiemelendő a Semmelweis Egyetem Orvosi-Vegytemi Tanszékével folytatott hosszú távú kooperáció, aminek a keretében több közös publikáció jelent meg kondenzált pirimidin-származékok előállításáról és vizsgálatáról. A Szegedi Egyetem Mikrobiológiai Tanszékével multidrog-rezisztencia gátlására végeztek tesztek. A Pécsi Tudományegyetem Biokémiai és Orvosi Kémiai Intézetével folytatott közös kutatások négy publikációt eredményeztek. A SOTE I. sz. Patológiai és Kísérleti Rákkutató Intézetében végzik az Intézetben előállított oligonukleotid-prodrugok tumorgátló hatásának tesztelését. A Szegedi Egyetemmel kemometriai kutatásokban működnek együtt.

Az Intézet tevékenyen részt vesz az egyetemi oktatómunkában. Összesen 11 kutató oktat rendszeresen a BMGE-n, a Semmelweis Egyetemen és az ELTE-n. Két közös laboratóriumot működtetnek az ELTE-vel. Az Intézetben 14 Ph.D.-hallgató dolgozik.

2005-ben egyetemi kollégákkal közösen 13 tudományos publikációjuk jelent meg.

A hazai együttműködések kiemelt jelentőségű hányada a MEDICHEM I., ill. II. program – „Validált célmolekulákon alapuló gyógyszer- és diagnosztikum tervezés” – keretében folyt, ill. folyik jelenleg is. E programban négy hazai egyetemmel (Pécsi Tudományegyetem, Semmelweis Egyetem, ELTE, BMGE) dolgoznak együtt.

Az MTA Peptidkémiai Kutatócsoportjával a szomatosztatin receptorokon való kötődést vizsgálják. Az MTA Enzimológiai Intézetével együtt vesznek részt 2005-2007 között egy tematikus GVOP-pályázat kutatásaiban oligonukleotid – prodrug kutatások témával. Az MTA Növényvédelmi Kutatóintézetével új fermonok szintetizálását végzik együttműködésben.

Több hazai vállalat (pl. Ubichem Rt., Richter Gedeon Vegyészeti Gyár, IVAX Gyógyszerkutató Intézet) részére végeznek jelentős, gyakorlati célú K+F munkát.

Élénk és eredményes nemzetközi együttműködésekkel folytattak 2004-ben.

A 2003-ban elnyert Európai Kiválósági Központ pályázat programja lehetőséget nyújtott számos tanulmányútra, ill. külföldi kutatók fogadására.

2004-ben sikeresen megszervezték a XXI. European Conference on Heterocyclic Compounds (Sopron) rendezvényét.

6 tudományos publikációjuk jelent meg külföldi kutatókkal kooperálva 2004-ben.

A Humboldt Egyetemmel (Berlin) „Ca és NO hatása a metabolizmus aktivitására és az idegsejtek sérülésére epilepsziában” tématerületen kialakított gyümölcsöző együttműködésük eredményeit 2004-ben közös dolgozatban foglalták össze.

Német-magyar TÉT-projekt részeként a frankfurti Max-Planck-Institute für Hirnforschung-ban folytatott kéthónapos tanulmányút keretében az Intézet egyik Ph.D.-hallgatója mutagenézissel glicin-receptor pontmutánsokat állított elő, amelyeket az Intézetben vizsgáltak tovább.

Az Alaszkai Egyetemmel folytatott közös munka eredményeként született a „The structural basis of ligand interactions in the 5-HT₃ receptor binding site” c. könyvfejezet.

Az Intézetben szintetizált, potenciálisan tumorgátló hatású karbociklusos nukleozidok biológiai tesztelését egy német kutatócsoport végzi (Resprotect Ltd., Drezda) tudományos együttműködés keretében.

Az Osztrák-Magyar Akcióalapítvány támogatásával, a Grazi Műszaki Egyetem Szerves Kémia Tanszékével közösen azacukor típusú glikozidáz-inhibitorokat, elsősorban a heparánáz enzim bnb gátlószereit szintetizálták. Az együttműködésben két Ph.D.-hallgató két-két hónapig a grazi egyetemen tanulmányozta az azacukrokra ott kidolgozott metodikának heparin oligoszacharidokra történő alkalmazását. A további rövidebb kutatócserék az Intézet kutatói által korábban kidolgozott ortogonális védőcsoportstratégia azacukrokra való sikeres kiterjesztését eredményezték. A kutatásokról közösen számoltak be a 22. Nemzetközi Szénhidrát Szimpóziumon.

Fontos gyakorlati célú együttműködésekkel folytatnak több külföldi vállalat kutatóival, így például a következőkkel: Altana Pharma AG (Németország), Bayer CropScience (Németország), Sigma-Aldrich (Németország), Clariant-Lancaster (UK), Hawai-Biotech (US), Novartis (Svájc).

2004-ben összesen 38 külföldi konferenciái, ill. tanulmányúti kiutazáson vettek részt az Intézet kutatói.

Több nemzetközi folyóirat szerkesztőbizottságában is képviselteti magát az Intézet (Drug Metabolism Reviews, European Journal of Drug Metabolism and Pharmacokinetics, Pest Management Science, Heterocyclic Communication, Arkivoc).

Több fontos nemzetközi szervezet munkájában vesznek részt tisztségviselőként, így pl. a következőkben: European Collegium on Heterocyclic Chemistry, Blue Danube Symposium on Heterocyclic Chemistry tudományos bizottsága, International Society for the Study of Xenobiotics, COST B16, D13, D31 bizottságok.

IV. Fontosabb, elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

Az Intézet biomolekuláris és szerves kémiai kutatási iránya, a korszerű tudományos irányzatokhoz illeszkedve, az élettudományi kutatások integráns részeként tekinthető. Különösen igaz ez, ha a 2001-2003. közötti időre NKFP-támogatást elnyert MediChem I., illetve annak folytatásaként a MediChem II. projektek céljait és részfeladatait tekintjük. Az Intézet által koordinált MediChem Konzorcium, Validált célmolekulákon alapuló gyógyszer és diagnosztikum tervezés c. projektje a Nemzeti Kutatási Fejlesztési Pályázaton 410 millió forint támogatást nyert el.

Az interdiszciplináris kutatási potenciált összefogó konzorcium kutatásainak elsődleges célja volt, hogy hozzájáruljon a Magyarországon legfőbb halálókként szereplő szív- és érrendszeri, valamint daganatos megbetegedések, továbbá bizonyos idegrendszeri megbetegedések korai felismerését célzó, nagy kapacitású diagnosztikai eljárások kidolgozásához, diagnosztikai reagensek kifejlesztéséhez, valamint a betegségek kezelésére irányuló specifikus gyógyszerek előállításához és terápiás kipróbálásához.

Az Intézetnek meghatározó szerepe volt a programban, aminek egyik legfontosabb eredménye, hogy az új hatóanyagok kutatásának feladatait az anyagok előállításától, a szerkezetvizsgálatokon és a hatásmechanizmus felderítésén át a fiziológiai-klinikai hatásvizsgálatokig egységbe foglalta.

Az Intézet által elért eredmények közül megemlíthendők a következők:

Több új, biomolekulákon aktív heterociklusos vázú molekulát állítottak elő. Felderítették a vegyületek biológiai hatását. Kimutatták, hogy a GYKI-47261 jelzésű gyógyszerjelölt antiepileptikum nem toxikus a májsejtekre *in vitro*. Új, proteoglikán-fehérje kölcsönhatásokon alapuló, kismolekulájú vegyületeket szintetizáltak. Szabad gyök fogó tulajdonsággal rendelkező komplexeket állítottak elő, amelyek engedélyezése folyamatban van. Olyan szintetikus, analitikai és hatásvizsgáló módszereket fejlesztettek ki, amelyek jól alkalmazhatók a racionális hatóanyag-tervezés során. A neurális hálózat elvén működő farmakofor modellt alakítottak ki. Részt vettek az EGIS-7229 antiarrithmikum kidolgozásában, ami szabadalmi oltalmat kapott. Proteomikai módszerekkel kimutatták az MMP9 és MMP2 szerepét fényindukált retinopatiában. *In silico* módszert dolgoztak ki az AMPA-típusú glutaminsav receptor ligandumok agonista, ill. antagonisták hatásának előrejelzésére. Olyan antiszensz oligonukleotid-származékot sikerült előállítaniuk, amely a már ismert AON-gyógyszernél mintegy 8-szorosan hatásosabbnak bizonyult.

A „Center of Excellence for Biomolecular Chemistry” program 2004-ben több területen kiemelkedő kutatási eredményeket hozott. Így pl. új, szintetikus módszereket fejlesztettek ki és élettanilag aktív heterociklusos vegyületeket állítottak elő, a drug-receptor kölcsönhatások modellezésére számítógépes programot készítettek, aktív és inaktív CNS-receptor konformációk predikcióját írták le *in silico*, felderítették a szabad gyökök szerepét epilepsziamodellekben *in vivo*.

Különösen gyümölcsözőek voltak az együttműködések a következő kutatóhelyekkel: Danish University of Pharmacological Sciences, Catholic University of Louvain-la-Neuve, University Hospital, Malmö, European Institute of Oncology, Milano, FOM Institute for Atomic and Molecular Physics, Amsterdam, Technical University of Graz.

A program keretében több új kutatási együttműködés jött létre, ill. erősödött meg. Több fiatal kutató tett külföldi tanulmányutakat, amelyek révén új mérési módszereket sikerült meghonosítaniuk, ill. közös konferencia-előadásokat tartottak.

Az elnyert hazai és nemzetközi pályázatokról a VI. b. és c. táblázatok adnak tájékoztatást.

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

1. Nagy I, Hajós Gy, Riedl Zs: New preparative route to hetaryldienes and azadienes, *Heterocycles*, 63, 2287-2307 (2004)
2. Moldvai I, Temesvári-Major E, Incze M, Szentirmay É, Gács-Baitz E, Szántay Cs: Enantioefficient synthesis of α -ergocryptine: First direct synthesis of (+)-lysergic acid, *The Journal of Organic Chemistry*, 69, 5993-6000 (2004)
3. Kovács I, Simon Á, Szárics É, Barabás P, Héja L, Nyikos L et al. (7): Cyclothiazide binding to functionally active AMPA receptor reveals genuine allosteric interaction with agonist binding sites, *Neurochemistry International*, 44, 271-280 (2004)
4. Jemnitz K, Veres Zs, Török G, Tóth É, Vereczkey L: Comparative study in the Ames test of benzo[a]pyrene and 2-aminoanthracene metabolic activation using rat hepatic S9 and hepatocytes following in vivo or in vitro induction, *Mutagenesis*, 19, 245-250 (2004)

VI. A kutatóhely 2004. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: Kémiai Kutatóközpont, Biomolekuláris Kémiai Intézet

Átlaglétszám ¹ : 92	Ebből kutató ² : 65	
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma: 34		
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma: 36		
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ³ : 36		
<i>Ebből</i> idegen nyelvű külföldi folyóiratban: 27	idegen nyelvű hazai folyóiratban: -	
nemzetközi együttműködés keretében: 6	SCI által regisztrált folyóiratban: 26	
összesített impakt faktor: 42,972	összes hivatkozás száma ⁴ : 440	
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül: 375		
Megjelent könyv: -	könyvfejezet: 2	jegyzet: -
<i>ebből</i> magyar nyelven könyv: -	könyvfejezet: -	jegyzet: -
Megvédett PhD értekezés: 4	Megvédett MTA doktori értekezés ⁵ : -	
Bejelentett találmányok száma: 1	Megadott szabadalmak száma: -	
<i>ebből</i> külföldön: -	<i>ebből</i> külföldön: -	
Értékesített szabadalmak száma: -		
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma: 18	poszterek száma ⁶ : 27	
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ⁷ : 12		
Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 6	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság: 5	
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege: 368,190 MFt		
Beruházási támogatás: - MFt	Fiatal kutatói álláshelyek száma ⁸ : 1	
Az év folyamán művelt OTKA témák száma: 12		
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: 13,125 MFt	
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma: 15		
NKFP: 2	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: 107,200 MFt	
Egyéb: 13	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: 34,636 MFt	
Az év folyamán művelt NFT témák száma ⁹ : -		
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: -		MFt
Külföldi vagy nemzetközi forrásból művelt témák száma ¹⁰ : 2		
EU forrásból: 2	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: 40,881 MFt	
Egyéb: -	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: - MFt	
Egyéb pályázatok keretében művelt témák száma ¹¹ : 1		
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: 0,388 MFt	
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány ¹² :		0,739 MFt

VI/a A kutatóhely 2004. évi tudományos teljesítményének egyéb bemutatható eredményei¹³

Az intézet neve: Kémiai Kutatóközpont, Biomolekuláris Kémiai Intézet

Megvizsgálták a Hawaii Biotech amerikai gyógyszerfejlesztő cég által előállított, intravénás bevitelre tervezett karotinoid származék kölcsönhatását humán szérum albuminnal (HSA). Megállapították hogy a HSA a molekulát megköti és megakadályozza annak aggregációját vizes közegben, így az biztonságosan alkalmazható injekciós készítmény hatóanyagaként nagy mennyiségű szabadgyök felszabadulásával járó akut emberi megbetegedések kezelésére. Kimutatták hogy a széleskörű farmakológiai aktivitással rendelkező kurkumin megkötődik a DNS kis árkában. Ez az eredmény új megvilágításba helyezheti a molekula részleteiben korántsem tisztázott daganatellenes és egyéb hatásait. Az Onkológiai Intézettel együttműködve klinikai vérmintákban meghatározták az AGP genetikai összetételét.

I. A Kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

A Felületkémiai és Katalízis Intézet fő feladata 2004-ben a következő volt:

- 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.

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

Új mangán- és vastartalmú, pirokatechin-oxidáz és fenoxazinon-szintetáz típusú, funkcionális enzimmodelleket állítottak elő dioximáto-ligandumok felhasználásával. Részletesen vizsgálták az új komplexek szerkezetét (egykristály röntgendiffrakció, ill. oldatröntgen, Mössbauer-spektroszkópia) és katalitikus aktivitását (gázvolumetria, ESR-spektroszkópia) 3,5-diterc-butyl-pirokatechin és 2-amino-fenol modell-szubsztrátum oxidációjában. Megállapították a modellreakciók kinetikáját és mechanizmusát. A vizsgált esetekben az oxidáció szabadgyökös mechanizmus szerint játszódik le, aminek fő lépése vagy a hidrogénatom-leszakítás vagy pedig a proton-csatolt elektronátvitel az aromás OH-csoportról a dioxigén molekulára. Deutérium kinetikus izotópeffektus mérésével e két eset megkülönböztethető, és ezáltal *összefüggés mutatható ki az aktivitás és a katalizátorkomplex szerkezete között.*

<i>Kutatói kapacitás:</i>	3,5 fő
<i>ebből intézeti állományban:</i>	3,5 fő
<i>Teljes ráfordítás:</i>	17,5 M Ft
<i>ebből pályázati forrás:</i>	1 M Ft

Eljárást dolgoztak ki új típusú, önszerveződésen alapuló felületmódosításra acél és vas felületén. Tanulmányozták alkil-mono- és difoszfónátok ($H(CH_2)_n-PO_3H_2$, ahol $n=6-10$, ill. $H_2O_3P-(CH_2)_n-PO_3H_2$, ahol $n=5-12$) önszerveződését, a felületi rétegek kialakulásának kinetikáját és korróziógátló hatását. A kidolgozott eljárást alkalmazva megvizsgálták, hogy ezek a speciális tulajdonsággal rendelkező rétegek hogyan építhetők össze poliakrilát vizes bázisú bevonati rendszerekkel. Megállapították, hogy a foszfónátos kezelés minden esetben nagy mértékben csökkentette mind a vizes bázisú lakk száradása során fellépő korróziós károsodást, mind pedig a fém/foszfónát-réteg/lakk hármass rendszer korrózióját agresszív közegben. Tanulmányozták a foszfónátok passzív vas felületen lejátszódó önszerveződését.

Megállapították, hogy az oxidréteg igen fontos szerepet játszik a foszfonáts csoport felületi kölcsönhatásában. Potenciosztatikusan passzívált vas felület a foszfonát réteg jelentős stabilizálását eredményezte.

Önszerveződött molekuláris rétegek segítségével a tömbi fázistól eltérő tulajdonságú (acél, alumínium, horgany és tűzhorgany) korróziógátló és adhéziónövelő fémfelületeket hoztak létre, amely elősegíti fémfelületeken a védőbevonatok biztonságos kialakítását. Megállapították, hogy a felületeken kialakított szerves bázisú, önszerveződő rétegekkel érhető el a legjobb eredmények.

Langmuir-Blodgett és önszerveződött nanorétegek kialakításával nagymértékben csökkentették réz és vas korrózióját, valamint a korrózióért felelős mikroorganizmusok megtapadását.

Az adszorpciós-deszorpciós folyamatoknak a réz felületén történő *in situ* nyomon követésére az elektrokémiai kvarckristály – mikromérleg – módszert alkalmazták.

Megvalósították alumínium-oxid-hidroxid mikrorészecskék felületének titán-dioxiddal történő bevonását, és kidolgozták azokat a kísérleti paramétereket, amelyek lehetővé teszik a bevonat kristályszerkezete előre eltervezett minőségének elérését.

Új típusú, korrózióvédő bevonatrendszer előállítását dolgozták ki armco vas felületének védelmére, amely a korábban már sikerrel alkalmazott önszerveződő molekulák rétegének és szerves ZrO₂-rétegeknek az együttes alkalmazásán alapul. Kimutatták, hogy a két, különböző típusú védőréteg kombinált alkalmazása rendkívül nagymértékű szinergikus effektust eredményez.

Megvalósították a nanoindentáció során keletkezett lenyomat alakjának összehasonlítását a próbatest alakjával, és a módszert üveghordozós SnO₂-réteg és a Ti-fém vizsgálatára alkalmazták. A durvaszemcsés titánon szemcsénként eltérő anizotrópiát, míg az SnO₂ rétegen eltérő mértékű relaxációt mutattak ki. A katalizátorkutatás számára a vizsgálatok új eredményekhez vezethetnek.

Vizsgálták szén-nanocsövek vezetőképességét ab initio kvantumkémiai módszerek alkalmazásával. Kimutatták, hogy az „ $n - m = 0 \text{ mod } 3$ ” szabály nem szigorúan érvényes. Az eredmény a szén nanocsövek tervezésénél bírhat jelentőséggel. Numerikus módszereket dolgoztak ki, amelyek alkalmasak különböző alakú grafit-mintázatokban a Kekulé-határszerkezetek és a konjugált gyűrűk megszámlálására. A módszer a szén-nanocsövek stabilitásának meghatározása szempontjából jelentős.

A szén-nanocsövek felületét módosították, hogy azoknak a különböző műanyag kompozitokba való bekeverésekor tapasztalható összetapadását megelőzzék. A módosított szén-nanocsövek jelenléte javítja a műanyag különböző fizikai tulajdonságait. Az aromás és alifás hidrofób csoportokat tartalmazó molekulákkal elvégzett funkcionális hatékonyságát diszpergálási kísérletekkel és SEM-felvételekkel bizonyították. Sikertelenül olyan molekulákat találniuk, amelyek alkalmazásával stabilizálni lehetett nanocsövek vizes és szerves oldószeres diszperzióit.

Egyes molekulákkal nem diszpergálást értek el, hanem a nanocső-kötegek szerkezetét, morfológiáját tudták stabilizálni. Megoldották a vizes és a szerves típusú módosítások stabilizálását. Különböző szerves reakciók segítségével olyan felületmódosított szén-nanocsöveket állítottak elő, amelyek elősegítik a műanyagokba való homogén bekeverést és növelik az elektromos vezetőképességet.

Szén gőzfázisú leválasztásával sikerült szilícium felületeken tömör, gyémánt-védőréteget kialakítani. Kimutatták, hogy a keletkezett réteg hatékonyan védi a szilícium felületét, ezért az eljárás várhatóan fémek esetében is alkalmazható lesz. A korrózióval szemben a védőréteg csak akkor lesz hatékony, ha összefüggő és tömör. Az említett tényt műszeres vizsgálatokkal is igazolták.

<i>Kutatói kapacitás:</i>	14,5 fő
<i>ebből intézeti állományban:</i>	11 fő
<i>Teljes ráfordítás:</i>	55,2 M Ft
<i>ebből pályázati forrás:</i>	26,2 M Ft

Folytatták az alkil-ón vegyületekkel végzett katalizátormódosítás tanulmányozását a fő hangsúlyt a Pt-Re/Al₂O₃ kétfémes katalizátorokra, valamint az SnO_x nanoréteget tartalmazó hordozók előállítására helyezve. Kimutatták, hogy az ón-tetraetillel történő módosítás eredményeként három fémet tartalmazó Sn-Pt-Re nanoklaszterek képződnek. Az ily módon kialakított hordozós katalizátorokat benzin reformálásában vizsgálták. Kimutatták, hogy az ón bevitelével jelentősen csökkenthető a reformált benzin aromástartalma.

SnO_x nanoréteget vittek fel SiO₂, Al₂O₃, MgO és TiO₂ hordozókra. Az így kialakított hordozókon nanoméretű aranyklasztereket stabilizáltak. Az előállított új típusú hordozós aranykatalizátorokat CO alacsony hőmérsékletű oxidációjában vizsgálták.

Szénmonoxid alacsony hőmérsékletű oxidációját tanulmányozták mind hidrogén jelenlétében, mind anélkül. Ezekben a vizsgálatokban egyrészt különböző módszerekkel előállított Sn-Pt/SiO₂, Au/MgO, Au/Al₂O₃ és módosított Fe/MCM-41 katalizátorokat alkalmaztak, másrészt új típusú hordozós aranykatalizátorokat állítottak elő átmenetifém spinelleket alkalmazva katalizátorhordozóként. A kapott eredmények egyértelműen bizonyították a redox típusú módosítók aktivitás növelő szerepét. A CO oxidációját nagy áteresztőképességű reaktorokban is vizsgálták. A kinetikai vizsgálatok rámutattak a hidrogén aktivitást növelő szerepére. Valószínűsítették, hogy a hordozós aranykatalizátorokon a CO oxidációjának mechanizmusa eltérő 273 K alatt, szobahőmérsékleten, illetve 350 K fölött.

A CO molekula és a karbonilvegyületek heterogénkatalitikus aktiválásában további bizonyítékokat kaptak a „fémion-fém nanoklaszter” aktív hely együttesek szerepére a PtRe, a RuSn, a RuPtRe, a Fe/MCM-41 és a redox típusú fénoxidokkal módosított hordozós aranykatalizátorokon.

Folytatták az piroszőlősav-etilészter és különböző diketonok heterogénkatalitikus aszimmetrikus hidrogénezését. Vizsgálták az akirális terciér aminok enantioszelektivitást növelő hatását, valamint a izocinkoninek anomális viselkedését aprotikus oldószerekben.

A metán alacsony hőmérsékletű oxidációját kombinatorikus úton tervezett, többkomponensű katalizátoron vizsgálták. Kimutatták a kismennyiségű arany promotor hatását a Pt-Pd/CeO₂ katalizátorok aktivitásának növelésében.

Összehasonlították a kombinatorikus-katalízis kutatásokhoz kidolgozott informatikai rendszerüket (Holografikus Kutatási Stratégia, HRS) az irodalomban ismert módszerekkel. Kimutatták, hogy a HRS gyorsabb és megbízhatóbb módszer katalizátorkönyvtárak előállítására, mint a legelterjedtebben alkalmazott Genetikus Algoritmus.

<i>Kutatói kapacitás:</i>	9 fő
<i>ebből intézeti állományban:</i>	9 fő
<i>Teljes ráfordítás:</i>	45 M Ft
<i>ebből pályázati forrás:</i>	2,3 M Ft

Szilícium-dioxid mellett átmeneti fémet, alumíniumot, vasat, rezet, illetve kobaltot tartalmazó, MCM-41-szerkezetű anyagokat szintetizáltak. A szintézist úgy vezették, hogy a 25-100 nm hosszúságú, hexagonális elrendezésű, 2-2,5 nm átmérőjű párhuzamos csatornákat, azaz nanopórusokat magukba foglaló részecskék 50-100 nm átmérőjű gömböcskéket formáljanak. Mechanizmust javasoltak a gömb-morfológia kialakulására. Kimutatták, hogy az alumínium vagy a vas beépülése a szilícium-dioxid szerkezetbe Brønsted- és Lewis-savas helyek képződését váltja ki a nanopórusokban. Maguk az átmenetifém ionok redoxi típusú, katalitikusan aktív centrumok. Különböző reakciókban jellemezték a szabályos és egységes méretű nanopórusokban elhelyezkedő savas és a redoxi centrumok katalitikus aktivitását és szelektivitását.

<i>Kutatói kapacitás:</i>	9 fő
<i>ebből intézeti állományban:</i>	3 fő
<i>Teljes ráfordítás:</i>	45 M Ft
<i>ebből pályázati forrás:</i>	13,5 M Ft

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

Felületi tulajdonságaikban módosított üvegeket vizsgáltak. Tanulmányozták a hidrofobicitás és a felületi szerkezet közötti kapcsolatot.

Tenzidelegyek oldat/levegő határfelületi viselkedését tanulmányozták. Összegfrekvencia-keltési spektroszkópia alkalmazásával megállapították, hogy hosszú oldallánccal rendelkező katanionos tenzidek esetén egy határfelületi elsőrendű fázisátalakulás jön létre.

Aminosavak adszorpcióját tanulmányozták oxidos Ti és kvarcüveg felületen. Megállapították, hogy a savas oldalláncot tartalmazó aminosavak irreverzibilisen adszorbeálódnak TiO₂ felületre, míg a semleges oldalláncúak vizes öblítéssel eltávolíthatóak.

<i>Kutatói kapacitás:</i>	4 fő
<i>ebből intézeti állományban:</i>	4 fő
<i>Teljes ráfordítás:</i>	16 M Ft
<i>ebből pályázati forrás:</i>	0,5 M Ft

Beszámoló egy kiemelt kutatási eredményről

Kombinatorikus heterogén-katalitikus kutatások

Korunk erőteljesen fejlődő kémiai kutatási irányzatai egyre inkább alkalmazzák a kombinatorikus megközelítéseket és módszereket. A kombinatorikus, illetve nagy áteresztőképességű módszerek közös jellemzője a nagyszámú minta párhuzamos előállítása, illetve párhuzamos vizsgálata anélkül, hogy bármelyik részlépés a teljes folyamat szűk keresztmetszetét jelentené. Ezért helyeztek munkájukban az Intézet kutatói egyre nagyobb hangsúlyt a katalízis és anyagtudomány területén használható kombinatorikus, ill. nagy áteresztőképességű módszereket alkalmazó eszközök kifejlesztésére és alkalmazásának vizsgálatára.

A kombinatorikus módszerek katalitikus optimalizálási feladatok megoldására igen jól alkalmazhatók. Hasonlóan a biokémiai kombinatorikus kutatásokhoz, itt is anyagkönyvtárakat, pontosabban katalizátorkönyvtárakat hoztak létre. „Katalizátorkönyvtár” alatt tulajdonképpen a katalizátorösszetétel többdimenziós kísérleti terének adatait értjük. Az Intézet kutatói olyan katalizátorkönyvtárak tervezését végzik, amelyek tagjai többkomponensű szilárd anyagok. Ezek csak összetételben különböznek egymástól.

A katalizátorkönyvtárak tervezéséhez szükséges új és hatékony optimumkereső algoritmusok létrehozása kulcsfontosságú. A kutatócsoport kifejlesztette az úgynevezett Holografikus Kutatási Stratégiát (HKS), ami egy új optimalizáló algoritmus. Ezen a területen jelenleg még „egyeduralkodónak” számít a Genetikus Algoritmus (GA), ami véletlenszerű elemeket alkalmaz. Ezzel szemben a HKS determinisztikus eljárás, ami hatékonyabb optimalizálást tesz lehetővé, mint a GA.

A HKS a többdimenziós kísérleti tér speciális, kétdimenziós leképezésén alapul. A transzformációban képződő, ún. kísérleti hologramok számos analógiát mutatnak a hagyományos értelemben vett optikai holografikus képekkel. A kísérleti hologramok kis részletei is tartalmaznak információt a teljes térről, és a teljes tér folytonos leképezésének tekinthetők. Kísérleti hologramok esetén a dimenziókat a katalizátorok különböző komponensei jelentik, amik száma általában háromnál több. Az ábrázolásmód jellemzője, hogy a komponenseket a kétdimenziós tér X és Y tengelye mentén számos variációban rendezhetjük el, amelyek más és más kísérleti hologramhoz vezetnek. A kísérleti hologramok képpontjai, a tengelyeken meghatározott összetételhez tartozó katalizátorok aktivitását jelentik meg általában különböző színekkel. Így a kapott kép leginkább egy domborzati térképhez hasonlít.

A holografikus optimalizálás iteratív jellegű. A következő generáció katalizátorait a megelőző lépésben kapott eredmények határozzák meg. A kísérleti hologramban elhelyezzük a megelőző lépésekben kapott eredményeket, majd ezt az elrendeződést első lépésben az X és Y tengelyen található komponensek pozíciójának cseréjével (forgatásával) megváltoztatjuk. Ily módon a „képpontok” új környezetbe kerülnek. Második lépésben a katalitikusan legjobbnak bizonyuló adatpont környezetében vesszük fel az új generáció katalizátorait. Az algoritmus a fenti lépések ismétlődése révén egyre közelít az optimum felé.

Ki kell emelni a komponensek X és Y tengely menti forgatásának jelentőségét. Mivel ez megváltoztatja a képpontok elrendeződését, azok új környezetbe kerülnek, ahol eddig még

nem vizsgált katalizátorok találhatóak. Azt is mondhatjuk, hogy a komponens forgatása a holografikus optimalizálás hajtóereje.

A HKS-t sikerrel alkalmaztuk a Mesterséges Neurális Hálózatokkal (MNH) összekapcsolva mind optimalizálásra, mind többdimenziós kísérleti terek feltérképezésére, azaz információnyerésre („information mining”). A MNH-k szerepe ezekben az esetekben a katalizátorok összetétele és aktivitása közötti mennyiségi összefüggés feltárása. Segítségükkel tulajdonképpen virtuális kísérleteket hajthatunk végre. A MNH-k viselkedése ebben az értelemben egy fekete dobozéhoz hasonlítható, amelynek bemeneti adatai a komponensek koncentrációi, míg a kimenetén az ehhez az összetételhez tartozó aktivitásérték jelenik meg. Hasonló célra polinomok is alkalmazhatók, de a neurális hálók óriási előnye a polinomokkal szemben, hogy megfelelő kialakításukhoz lényegesen kevesebb előzőleg megmért kísérleti pontra van szükség.

Az előzőekben bemutatott hatékony informatikai hátteret a kutatás hardver eszközei egészítik ki és teszik alkalmazhatóvá. A nagy áteresztőképességű tesztelést egy a csoport által kifejlesztett 16-csatornás reaktorrendszer biztosítja. Magának a reaktornak a felépítése egyenletes hőmérséklet- és áramlást elosztást biztosít mind a 16 csatornában, amit könnyen szabályozhatunk. A reaktornak egy bemenete és a 16 csatornának megfelelően 16 kimenete van. A katalitikus reakció eredményeképpen a bementi gázáram összetétele megváltozik, amit a kimenetekenél távozó gázelegy folyamatos elemzésével követhetünk nyomon. Egy 16-állású szelep választja ki a csatornákat, amelyeket így periodikusan vizsgálnak tömegspektrométerrel. A katalizátorok előállítását robottechnikát alkalmazva automatizálták. Saját fejlesztésű folyadékkiosztó robot segítségével a kívánt prekursor vegyületeket tetszőleges koncentrációban lehet összekeverni.

A katalizátorkönyvtárak tervezésének lépéseit egy környezetvédelemmel kapcsolatos esettanulmányban vizsgálták, ami többkomponensű katalizátorok optimalizálására irányult metán teljes oxidációjában. A földgázzal működő járművek egyre nagyobb számban jelennek meg, s így az elégni nem képes metán emissziója évről-évre nő, ami erősíti az üvegházhatást. A cél olyan, újszerű katalitikus anyagok előállítása, továbbá tesztelése kombinatorikus úton, amelyek alacsony hőmérsékleten működnek, nagy aktivitással égetik el a kis koncentrációjú metánt és ellenállóak a füstgázokban előforduló kén-szennyezésre és vízgőzre. A kezdeti katalizátorkönyvtárban mutatkozó legjobb katalizátoron csak 44 %-os metán konverziót mértek, míg 167 katalizátor tesztelése után az 5. generációban találtak egy olyan katalizátort, amelyen már a metán teljes átalakulását tapasztalták. Többkomponensű katalizátorok összetétele és aktivitása közötti összefüggések feltárásához MNH-k nemlineáris illesztését végezték el a rendelkezésre álló adatsoron, majd ezt a matematikai szerkezetet transzformálták könnyen érthető kétdimenziós hologramokká. Ezzel lehetőség nyílt a teljes kísérleti tér megjelenítésére. Az ábrák tanulmányozásával világos képet kaptak a vizsgált heterogén katalitikus rendszerről, így a MNH-k alkalmazása gyorsítja a további optimalizálást, hiszen elkerülhető a katalitikusan feltehetően inaktív anyagok előállítása és vizsgálata.

Feltehető, hogy a jövő autókban a hidrogén fontos szerepet fog játszani, mint üzemanyag, amelyet azonban meg kell tisztítani a benne nyomokban előforduló szénmonoxidtól. Ehhez a CO szelektív oxidációja szükséges az egyben jelenlevő hidrogén oxidációja nélkül. Az Intézet kutatócsoportja már megkezdte a kinetikai vizsgálatokat spinell-hordozós, aranytartalmú katalizátorok jellemzésére CO szelektív oxidációjában. A 16-csatornás reaktorban a vizsgálatok hatékonyabban hajthatók végre, mint a hagyományos átáramlásos

reaktorban. Ezek a kutatások jelentősek a kombinatorikus módszerek további fejlesztését és alkalmazását célzó munkáikban.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Az Intézetnek 2004-ben, csakúgy mint korábban, igen szerteágazó és szakmailag mindegyik résztvevő számára eredményes kapcsolatai voltak különböző egyetemi tanszékekkel. A közös kutatások eredményeiről 2004-ben hét publikáció jelent meg. Együttműködtek mind katalíziskutatási, mind felületkutatási (nanotudományi) témákban a BMGE, az ELTE, a Veszprémi és a Szegedi Egyetem megfelelő tanszékeivel, ill. akadémiai kutatócsoportjaival. Az Intézet jelentős mértékben kiveszi részét – mind elméleti tárgyak oktatásával, mind gyakorlatok vezetésével, ill. a doktoranduszi képzésben való közreműködésével – az egyetemi oktatómunkából a Veszprémi Egyetemen és a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetemen. A kutatók közül 8 fő vesz részt rendszeresen az egyetemi oktatásban. 2004-ben az Intézetben 9 fiatal kutató dolgozott Ph.D. munkáján.

Eredményesek voltak 2004-ben is azok a tudományos kutatásokra alapozott alkalmazott kutatások, amelyeket hazai fejlesztő intézményekkel és vállalatokkal folytattak. Ezek közül kiemelendő a Szilikát és Kerámia Anyagkutató és Fejlesztő Kft-vel sikeresen befejezett „A katalitikus paraffinátalakító állóagyas DEW katalizátor gyártási technológiájának továbbfejlesztése” c. projekt.

Az Intézet, a korábbi évekhez hasonlóan sikeres együttműködéseket folytatott számos témában külföldi kutatóhelyekkel. A közös kutatások 2004-ben 14 publikációt eredményeztek.

Különösen eredményesek voltak az Edinburgh-i Egyetemen „Új szén/zeolit kompozit anyagok előállítása és jellemzése” (5 közlemény és 2 konferenciaelőadás), a BTA-MTA-egyezmény keretében a Bolgár Tudományos Akadémia Szerves Kémiai Intézetével „Új típusú zeolitok és zeolitszerű anyagok előállítása és szilárd fázisú módosítása” (4 közlemény és egy előadás), valamint az „NO_x szelektív katalitikus redukálása szénhidrogénnel, különféle zeolit alapú katalizátorokon” c. témában (egy közös cikk és egy előadás) és a Santa Fe-i Egyetemen (Argentína) (TÉT-együttműködés keretében) folytatott közös kutatások. Jelentősek a tudományos kooperációk a következő kutatóhelyekkel is: University of Pittsburgh az „Sn-Pt/SiO₂ katalizátorok alkalmazása a környezetvédelemben”, University of Concepción (Chile) az „Aszimmetrikus hidrogénezési reakciók tanulmányozása”, Instituto de Investigaciones en Catalisis y Petroquímica (Argentina) a „Nanostrukturált kétfémes hordozós katalizátorok előállítása és vizsgálata”, Lille University of Sciences and Technologies Laboratory of Catalysis (Franciaország) a „Többkomponensű katalizátorok előállítása szénhidrogén reakciókhoz”, Raluca Ripan Chemical Research Institute, Cluj (Románia) az „Ón-oxid nanorétegek előállítása, jellemzése és alkalmazása elektrokémiai szenzorok kifejlesztésére” c. témákban.

Megemlítendő továbbá, hogy a Román és a Magyar Tudományos Akadémia közötti együttműködési egyezmény keretében a „Környezetbarát, vékonyrétegű, nanokristályos ónoxid bevonatok” c. témában több tanulmányutat bonyolítottak le 2004-ben, és egy közös cikk is született.

Több témában kölcsönös tanulmányutak révén jelenleg folyik a publikációk véglegesítése. Így pl. a következőkben: „Rozsdamentes acélok előkezelése és a korróziót előidéző anaerob

mikroorganizmusok megtapadása közötti összefüggések” (Universidade de Lisboa, Portugália), „Nanocsövek kémiai tulajdonságainak modellezése, ill. nanocsövek elektronszerkezete” (National Institute of Chemistry, Ljubljana, MTA-Szlovén Tudományos Akadémia közötti szerződés).

Az Intézet kutatói 2004-ben összesen 64 külföldi kiutazáson vettek részt.

Néhány külföldi társaság fejlesztései részben az Intézetben végzett tudományos munkára alapozódnak. Anyagi szempontokból is jelentős például a Petroleum Research Centre-vel folytatott együttműködés (Líbia). A nevezett intézmény részére: „Korróziós inhibitorok és biocidok kifejlesztése”, valamint „Kombinatorikus módszerek alkalmazása katalizátorok tervezésére” c. témakörökben folynak kutatások.

Az Intézet kutatói közül többen fontos nemzetközi tudományos bizottságoknak a tisztségviselői, így pl. a következőknek: International Society of Electrochemistry, Európai Korróziós Szövetség, Electrochemical Society (USA), International Geothermal Association, COST Nanostag (Strategic Forecast) munkabizottság, European Federation of Catalysis Societies (EFCATS).

Az Intézet kutatói a következő nemzetközi folyóiratok szerkesztőiként, ill. szerkesztőbizottságának tagjaként reprezentálják a magyar tudományt: Corrosion Reviews; Corrosion Engineering, Science and Technology; Materials and Corrosion; J. Electrochemical Society; Croatica Chemica Acta.

IV. Fontosabb, elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

Az Intézet felületkutatással foglalkozó csoportjainak tematikája a legkorszerűbb irányzatokhoz kapcsolódik. Az Intézet által koordinált, a nanotudományok rendkívül sokrétű és szerteágazó területét felölelő, három évre 110 millió forint támogatást élvezett: „A különleges tulajdonságú, nanoszerkezetű bevonatok fejlesztése környezetbarát felületmódosítási eljárásokkal” c. projekt (NANOTECH) keretében fémfelületeken olyan komplex, nanostrukturált bevonatrendszereket dolgoztak ki, amelyek ellenállóak a legkülönbözőbb külső hatásokkal (mechanikai, tribológiai, korróziós) szemben. Korszerű felületmódosító eljárásokat vezettek be, a jelenleg használatos felületkezelési technológiákat új, környezetbarát eljárásokkal fejlesztették tovább. Nanoszerkezetű, speciális tulajdonságú, többrétegű bevonatrendszereket alakítottak ki szol-gél technikával, a molekulák önszerveződése alapján, nem-egyensúlyi elektrokémiai eljárásokkal, CVD-, PVD-módszerekkel és lézeres felületmódosítással. Ipari hasznosításra alkalmas, önszerveződő molekulákat tartalmazó, korrózióvédő alapanyagokat fejlesztettek ki.

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

Az Intézet nemzetközi együttműködési projektjei jelentős mértékben hozzájárulnak ahhoz, hogy erőteljesebben kapcsolódjanak be az európai kutatási térség munkájába. A korábbi eredmények alapján olyan kapcsolatokat sikerült kialakítaniuk, amelyek lehetővé tették, hogy az Intézet a következő időszakban fontos témákban koordinátor, ill. partner lehessen. A témák közül kiemelendő a számos résztvevővel folytatott nanotudományi együttműködés.

Környezetvédelmi szempontból jelentősek a hatékonyabb és egyszerűbb szennyvíztisztítási eljárások kidolgozását célzó EU-program keretében elért eredmények.

A „Hungarian Network of Excellent Centers on Nanosciences” projekt keretében lehetőség nyílt egy virtuális Magyar Nanotudományi Központ kiépítésére, továbbá arra, hogy ösztönözzék a hazai K+F-helyeket az európai együttműködésekben való aktív részvételre, előmozdítsák a kutatók-fejlesztők információcseréjét és a fiatal kutatók szakmai továbbképzését. A programban résztvevő külföldi kutatóhelyekkel a nanotudományok területén igen hasznos és eredményes kapcsolatokat sikerült kialakítaniuk.

A projektben részt vesz az Intézet koordinálásában a BMGE, az ELTE, a Miskolci Egyetem, a Debreceni Egyetem, a Szegedi Egyetem, a BAYATI, továbbá a SciTech Link, SE, SME (Svédország), a Tel Aviv University (Izrael), az NMRC, Cork, IRE PRP, RES (Írország), a Lund University (Svédország), az Atomic Energy Commission, Grenoble (Franciaország) és a University of New Castle (UK).

Az elnyert pályázatoknak jelentős hatása van a kutatások interdiszciplináris jellegének erősítésére, új témák indítására, korszerű kutatási profil kialakulására, a hazai- és a nemzetközi együttműködések erősítésére, további EU-pályázatokon történő részvételre.

Az elnyert hazai és nemzetközi pályázatokról a VI. b. és c. táblázatok adnak tájékoztatást.

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

1. Simándi TM, Simándi LI, Győr M, Rockenbauer A, Gömörly Á: Kinetics and mechanism of the ferroxime(II)-catalysed biomimetic oxidation of 2-aminophenol by dioxygen. A functional phenoxazinone synthase model, Dalton Transactions, (7), 1056-1060 (2004)
2. Szőcs E, Bakó I, Kosztolányi T, Bertóti I, Kálmán E: EC-STM study of 5-mercapto-1-phenyl-tetrazole adsorption on Cu(1 1 1), Electrochimica Acta, 49, 1371-1378 (2004)
3. Margitfalvi JL, Göbölös S: Role of 'metal ion-metal nanocluster' ensemble sites in activity and selectivity control, In: Catalysis 17, The Royal Society of Chemistry, 2004, pp 1-104
4. Ulla MA, Gutierrez L, Lombardo EA, Lónyi F, Valyon J: Catalytic features of Pt,Co-mordenite for the SCR of NO_x monitored by DRIFT spectroscopy using adsorbed N₂ as a probe, Applied Catalysis A: General, 277, 227-237 (2004)
5. Pásztai Z, Wang J, Clarke ML, Chen Z: Sum Frequency Generation vibrational spectroscopy studies of protein adsorption on oxide-covered Ti surfaces, Journal of Physical Chemistry B, 108, 7779-7787 (2004)

VI. A kutatóhely 2004. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: Kémiai Kutatóközpont Felületkémiai és Katalízis Intézet

Átlagléttség ¹ : 58	Ebből kutató ² : 39	
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma: 14		
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma: 54		
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ³ : 54		
Ebből idegen nyelvű külföldi folyóiratban: 28	idegen nyelvű hazai folyóiratban: -	
nemzetközi együttműködés keretében: 14	SCI által regisztrált folyóiratban: 21	
összesített impakt faktor: 45,786	összes hivatkozás száma ⁴ : 480	
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül: 411		
Megjelent könyv: -	könyvfejezet: 9	jegyzet: -
ebből magyar nyelven könyv: -	könyvfejezet: -	jegyzet: -
Megvédett PhD értekezés: 1	Megvédett MTA doktori értekezés ⁵ : -	
Bejelentett találmányok száma: 1	Megadott szabadalmak száma: -	
ebből külföldön: -	ebből külföldön: -	
Értékesített szabadalmak száma: -		
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma: 30	poszterek száma ⁶ : 17	
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ⁷ : 8		
Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 8	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság: 5	
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege: 256,081 MFt		
Beruházási támogatás: 17,489 MFt	Fiatal kutatói álláshelyek száma ⁸ : 1	
Az év folyamán művelt OTKA témák száma: 15		
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: 19,267 MFt	
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma: 22		
NKFP: 4	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: 73,153 MFt	
Egyéb: 18	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: 25,832 MFt	
Az év folyamán művelt NFT témák száma ⁹ : -		
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: -		MFt
Külföldi vagy nemzetközi forrásból művelt témák száma ¹⁰ : 7		
EU forrásból: 7	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: 52,995 MFt	
Egyéb: -	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: - MFt	
Egyéb pályázatok keretében művelt témák száma ¹¹ : 3		
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: 9,164 MFt	
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány ¹² :		4,471 MFt

VI/a. A kutatóhely 2004. évi tudományos teljesítményének egyéb bemutatható eredményei¹³

Az intézet neve: Kémiai Kutatóközpont Felületkémiai és Katalízis Intézet

A SZIKKTI Kft. és az MTA Kémiai Kutatóközpont, Felületkémiai és Katalízis Intézet konzorciuma az OMFB támogatásával folytatott „A katalitikus paraffin átalakító állóágyas DEW katalizátor gyártási technológiájának továbbfejlesztése (DEWPRO)” c. kutatási-fejlesztési projektet 2004-ben befejezte. Az MTA KK FKI Mikro és mezopórusos anyagok osztálya kutatási eredményeire alapozva, új gyártási technológiával a SZIKKTI Kft. 6000 kg katalizátort gyártott le a MOL Rt. gázolajok dermedéspontjának katalitikus csökkentését megvalósító GOK-3 üzemé részére a 2004-ben esedékes üzemi katalizátor cseréjéhez. A korábban alkalmazottnál kedvezőbb aktivitású zeolitkatalizátor lehetővé teszi a MOL Rt. számára, hogy versenyképes ajánlattal pályázzon új, hasonló üzemek létesítésére. A kutató-fejlesztő konzorcium elérte, hogy a zeolitmátrix szerkezetének változtatásával a fejlesztés tárgyát képező, Ni-tartalmú bifunkciós zeolitkatalizátorok alkán krakkolási/izomerizálási szelektivitását tervezhető módon lehessen változtatni. Egy új alkán hidroizomerizációs katalizátorból piackutatásra alkalmas mennyiséget, 1000 kg-ot gyártottak.

I. A Kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

A Szerkezeti Kémiai Intézet fő feladata 2004-ben a következő volt:

- nemzetközi színvonalú tudományos kutatások végzése a molekulák és a szupramolekuláris szerkezetek sajátságainak különböző spektroszkópiai és diffrakciós mérési módszerekkel, továbbá elméleti kémiai vizsgálatokkal történő feltárására.

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

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

Kimutatták, hogy az ionos folyadékok kiválóan alkalmasak micellák tulajdonságainak megfelelő módosítására a felhasználási igények szerint. Oktilcsoportot tartalmazó ionos folyadékok vizes oldatában aggregálódást vagy micellaképződést tapasztaltak, ami környezetvédelmi szempontból is fontos lehet.

A molekulászerkezet és a fotofizikai folyamatok sebessége közötti kapcsolat szisztematikus vizsgálatának eredményeként egy olyan anyagot (1-hidroxi-fluorenon) találtak, melynek fluoreszcenciás sajátságai nagymértékben függenek a mikrokörnyezettől, hidrogénhid kötésre képes vegyületek jelenlététől, így jól alkalmazható jelzőanyagként. Előállítottak egy új naftálimid származékot (N-(4-piridil)-1,2-naftálimid), mely protonálódás hatására nagy határfokkal fluoreszkál, és ezáltal már nyomnyi mennyiségű sav is kimutatható segítségével. Naftalin jelenlétében e vegyület kettős fluoreszcenciát bocsát ki. Igazolták, hogy e jelenség gerjesztett állapotú komplex képződésétől ered. Feltárták, hogyan hatnak a hidroxilcsoportot tartalmazó vegyületek a gerjesztett komplex képződésének és energiavesztésének kinetikájára.

Fontos mérés-technikai fejlesztéseket hajtottak végre platina-, palládium- és óntartalmú, szupramolekuláris szerveződéssel jellemezhető fémorganikus vegyületek szerkezet-vizsgálatában. Méréseik kiterjedtek a szupramolekulák translációs diffúziós sajátságainak, továbbá molekuladinamikai folyamatok energetikájának tanulmányozására. Fejlesztéseik a korszerű egy- és többdimenziós, heteronukleáris diffúziós (DOSY) mérések ^1H - ^{13}C , ^1H - ^{31}P , ^1H - ^{119}Sn magkombinációkon történő hazai meghonosítását, valamint a kémiai kicserélődési folyamatok tanulmányozásához szükséges szelektív inverziótranszfer kísérletek kiértékelésének modernizálását valósították meg.

FTIR-spektroszkópiai diagnosztikai módszert dolgoztak ki az emberi szervezet általános fiziológiai állapotának felmérésére. A kiválasztott személyek részletes orvosi vizsgálatait igazolták, hogy különféle betegségek, ill. kezdeti, még tünetmentes stádiumban lévő

elváltozások az alkalmazott spektroszkópai módszerrel detektálhatók. Eredményeik a preventív orvosi diagnosztika területén gyümölcsöztethetők.

FT-IR és Raman-spektroszkópai mérések alapján, valamint skálázott kvantumkémiai erőterekkel végzett teljes rezgési analízis, ill. intenzitászámítások segítségével részletesen értelmezték különböző bonyolultsági fokú szerves vegyületek (benzolszármazékok, arilidén-izokromanonok, elektromosan töltött molekulák) rezgési spektrumait.

Fullerének, magas-hőmérsékletű szupravezetők és zeolitok elektromos és mágneses tulajdonságainak jellemzésére új ESR-spektroszkópai módszereket dolgoztak ki. A C60 mátrix NC59 dópolásával töltéshordozókat vittek be a szigetelőanyagba, amely a megfigyelt elektronlocalizáció révén lehetőséget kínál új típusú félvezető anyagok kifejlesztésére. A megfigyelt jelenség elvi lehetőséget nyújt kvantumszámítógépek kidolgozására is.

<i>Kutatói kapacitás:</i>	14 fő
<i>ebből intézeti állományban:</i>	10 fő
<i>Teljes ráfordítás:</i>	55 M Ft
<i>ebből pályázati forrás:</i>	1,3 M Ft

Gázfázisú vizsgálatok keretében újszerű gyorsáramlásos és lézerfotolitikus módszerek alkalmazásával meghatározták az acetonylgyök ($\text{CH}_3\text{C}(\text{O})\text{CH}_2$) lézergérsztési (LIF) és tranziens abszorpciós (TA) spektrumát. Sebességi együttható értékeket adtak meg a $\text{CH}_3\text{C}(\text{O})\text{CH}_2$ -gyök O_2 -nel, NO-dal, NO_2 -dal és H-atommal végbemenő reakciójára, amelyeknek alapján molekulaszervezet–reaktivitás összefüggéseket állapítottak meg. Az LIF- és a TA-spektrumok alkalmasak a légkörkémiai fontos szerepet játszó acetonylgyök nagyérzékenységű detektálására; a meghatározott kinetikai adatokat pedig légkör kémiai modelljeiben használják fel. Ilyen modellek kifejlesztésében a SCOUT-O3 EU kutatási projekt keretében vesznek részt.

Reakciókinetikai mérésekkel megállapították, hogy az OH-gyök a hangyasav-észterek alkilcsoportjának hidrogénatomját hasítja le, szemben a várt formil H-atom absztrakcióval; eredményeiket kvantumkémiai számításokkal támasztották alá.

Oldatfázisú vizsgálatok keretében fontos eredményeket értek el a hidrogénhidas komplexek termodinamikájával és képződésük kinetikájával kapcsolatban. Fenantridinon és N-naftálimid származékok fotofizikai vizsgálatai alapján általánosítható következtetésekre jutottak. Megállapították, hogy a komplexálódás hatására megváltozik a szingulett gerjesztett állapot energiája. A fellépő szingulett energiaváltozás lineárisan függ a komplexképződés egyensúlyi állandójának logaritmusától. Az összefüggést egyszerű modellek segítségével értelmezték, amelyeknek felhasználásával eljárást dolgoztak ki a szingulett gerjesztett állapot hidrogénhidas savságának és ezen keresztül a reakciók szabadentalpia változásának becslésére. A szabadentalpia-változás ismeretében korrekt módon kiértékelhetők a komplexálódás folyamatát jellemző fluoreszcencia-lecsengési paraméterek, becsülhető az alapállapotú komplexálódás és a komplex elbomlásának a sebessége.

<i>Kutatói kapacitás:</i>	7 fő
<i>ebből intézeti állományban:</i>	7 fő
<i>Teljes ráfordítás:</i>	48 M Ft
<i>ebből pályázati forrás:</i>	9,6 M Ft

Olyan instabilis Pd- és Pd-Pt dimereket izoláltak és jellemeztek kristálydiffrakciós módszerek segítségével, amelyekről korábban csak folyadék NMR-adatok álltak rendelkezésre. Elvégezték a di(*p-tert*-butilfenil)-*N,N*-di-(*izo*-butil)karbamoilmetilfoszfin oxid (a Los Alamos National Laboratory-ban használt „aktinida extraktor”) és organoón-, ill. uranil-komplexeinek teljes szerkezeti és spektroszkópai jellemzését. Vizsgálták a triorganoón(IV)-vegyületek kétfogú O,O/N-donor ligandumokkal mutatott önszerveződési reakcióját irányító tényezőknek a képződő termékekre gyakorolt hatását. Megállapították, hogy szilárd fázisban a triorganoón(IV)-tetramer diorganoón(IV)-dimerré alakul metilcsoport-vándorlással járó diszmutációs reakcióval.

Rendszereztek a réz- és ón-tiokarbamid komplexek szerkezeti típusait.

Jellemezték a teofillin zárványvegyületeinek szerkezetét.

Tanulmányozták az izostrukturalitás előfordulását polimorf rendszerekben, leírták egy aliciklusos beta-laktám 3-dimenzióban izostrukturális polimorfjait.

Meghatározták a kristálytervezésben fontos H-híd-kölcsönhatás különbségek várható nagyságát. Előállították és vizsgálták nagy pórusú, kristályos, háromfogású szimmetriájú gazdavegyületek rendszereit és meghatározták kristályszerkezetüket.

<i>Kutatói kapacitás:</i>	7 fő
<i>ebből intézeti állományban:</i>	7 fő
<i>Teljes ráfordítás:</i>	49 M Ft
<i>ebből pályázati forrás:</i>	6 M Ft

Hazai együttműködésben meghatározták egyes katalitikus hatású katekoláz vaskomplexek szerkezetét röntgendiffrakcióval és sűrűségfüggő számításokkal. Jellemezték a komplexek kinetikai viselkedését. Ilyen jellegű vizsgálatokat eddig még nem írtak le az irodalomban, a módszernek potenciálisan komoly hatása lehet a katalíziskutatásra.

Amerikai kutatókkal együttműködésben vizsgálatokat végeztek egyes önszerveződő szupramolekuláris rendszerek (makrociklusos platinakomplexe) szerkezetének meghatározására, a kialakuló szupramolekuláris formák geometriai jellemzésére. A vizsgálat az előzőhöz hasonlóan úttörő jelentőségű.

Osztrák együttműködésben (TÉT) ab initio számításokat, molekuláris dinamikai szimulációkat, röntgendiffrakciós és neutroindiffrakciós méréseket végeztek Li⁺ és Be²⁺ iont tartalmazó oldatokon (acetonitril és dimetilszulfid oldószerekben). Az eredményekről három közös közlemény már megjelent.

Folytatták a nagynyomású röntgendiffrakciós- és sűrűségméréseket a metanol szerkezetének felderítésére 100 bar-3 kbar nyomáson. Az adatok kiértékelése jelenleg folyik.

<i>Kutatói kapacitás:</i>	3 fő
<i>ebből intézeti állományban:</i>	3 fő
<i>Teljes ráfordítás:</i>	15 M Ft
<i>ebből pályázati forrás:</i>	1,2 M Ft

A tömegspektrométerben lejátszódó folyamatok modellezésére kifejlesztett Windows-alapú számítógépes programot (MassKinetics), aminek népszerűségét a több mint 950 regisztrált

felhasználó jelzi, 2004-ben továbbfejlesztették. A programot sikeresen alkalmazták protonált dimerek entrópiaeffektusainak vizsgálatára. Számításaik segítségével meghatározták, hogy az ún. kinetikus módszer milyen feltételek teljesülése esetén alkalmazható és az így meghatározott entrópia mennyire pontos. Eredményeikkel az irodalomban egy már régóta folyó vitát sikerült lezárniuk.

Együttműködve az ELTE és a BMGE kutatócsoportjaival, különböző szintetikus és izolált természetes vegyületek szerkezetazonosítását végezték el, többek között új típusú perfluoro-alkil láncot tartalmazó heterociklusos, ill. foszfororganikus vegyületekét.

Az újszülöttkori anyagcsere-betegségek szűrésére kidolgozott módszerüket sikeresen alkalmazták: a Budai Gyermekkórház megbízásából több száz csecsemő szűrését végezték el 2004-ben. Az eredményes szűrésnek köszönhetően sok csecsemő szellemi és testi leépülése vált elkerülhetővé.

Az Országos Onkológiai Intézettel megkezdett együttműködés folytatásaként új, tömegspektrometriai alapú diagnosztikai módszert fejlesztenek ki rosszindulatú daganatos megbetegedések korai kimutatására. Kutatásaik során megállapították, hogy a vérben található alfa-1-savas-glikoprotein (AGP) oligoszaccharid részében bekövetkező szerkezetváltozás a rákos megbetegedés kialakulását jól jelzi. A kidolgozott módszert várhatóan fel lehet használni a rákos megbetegedések diagnosztizálásában.

<i>Kutatói kapacitás:</i>	9 fő
<i>ebből intézeti állományban:</i>	9 fő
<i>Teljes ráfordítás:</i>	54 M Ft
<i>ebből pályázati forrás:</i>	13,5 M Ft

Kvantumkémiai módszerekkel meghatározták három Ru-bipiridil és Ru-fenatrolin komplex szerkezetét triplett gerjesztett állapotban.

Klasszikus mechanikai trajektóriaszámításokban megállapították a reakciódinamikában ismert Polányi-szabályok érvényességi határait.

Kimutatták, hogy a Löwdin-féle atomi populációk nem rendelkeznek az elvárható általános rotációs invariancia tulajdonsággal, ami miatt alkalmazásuk jelentős elvi és gyakorlati problémákat vet fel.

Egy új másodkvantált formalizmust javasoltak kölcsönhatások additivitásának és interferenciájának vizsgálatára.

Bevezették az "atomik egységfelbontás" fogalmát, ami lehetővé teszi, hogy a legkülönböző populációs analízis és energiadekompozíciós módszereket egy közös, általános formalizmus keretében vizsgáljuk.

Kvantumkémiai számítások alapján meghatározták a CH_2BrCl UV-fotodisszociációjához tartozó potenciálfelületek közti átmeneti dipólmomentumokat, illetve nem-adiabatikus csatolást.

Periodikus modelleken elvégzett kvantumkémiai számítások segítségével jellemezték a Pd(111), Rh(111) és Pt(111) felületeken adszorbeált molekulák szerkezeti tulajdonságait.

Röntgen- és neutron-diffrakciós mérések, illetve molekuladinamikai számítások alapján pontosították a 2,2,2-trifluoroetanol és a hangyasav folyadékszerkezetét.

Kvantumkémiai számítások segítségével értelmezték azt a kísérleti tapasztalatot, miszerint a $[\text{PdH}(\text{dppe})]^+$ fémkomplex reakcióiban a hidrogénjét mind proton, mind pedig hidrid formában is átadhatja.

Megmutatták, hogy a CO_2 és C_2H_4 molekulák oxidatív C-C csatolásakor a széndioxid fémcentrumhoz történő koordinációja nem szükségszerű elemi lépés, továbbá azt, hogy a C-C kapcsolat aktiválási gátja a segédligandumok módosításával előnyösen szabályozható.

<i>Kutatói kapacitás:</i>	8 fő
<i>ebből intézeti állományban:</i>	8 fő
<i>Teljes ráfordítás:</i>	48 MFt
<i>ebből pályázati forrás:</i>	8 MFt

Beszámoló egy kiemelt kutatási eredményről

Önszerveződő organoón(IV)-vegyületek szintézise és szerkezeti jellemzése

Az önszerveződő organoón(IV)-vegyületek szintézisével és az ezeknek a koordinációs vegyületek kristályaiban előforduló molekulaelrendeződések szupramolekuláris kémiai szemléletű elemzésével az Intézet Egykristálydiffrakciós Laboratóriuma már több mint hét éve foglalkozik. Az utóbbi években az organoón(IV)-szupramolekulák koordinatív kötéseken alapuló spontán önszerveződési reakcióinak tanulmányozása a szerves kémiai kutatások egyik hajtóerejévé vált, hiszen e molekulák alkalmazásával nagy bonyolultságú, kémiailag egységes koordinációs vegyületek kialakítása lehetséges. Ezeknek, a koordinatív kötéseken keresztül létrejövő önszerveződési reakcióknak a precíz és kontrollált irányításához először az önszerveződő egységek szerkezeti milyenségét (a fém koordinációs helyeinek számát és szimmetriáját, kötőszögét, a ligandum merevségét, stb.) tervezik meg, majd a szintetikus tényezőknek (oldószer, hőmérséklet, koncentráció, templátok stb.) a kialakuló szupramolekuláris szerkezet képződésére gyakorolt hatását derítik fel. Az önszerveződési reakcióban alkalmazandó alegységek szerkezeti sajátosságainak a tervezéséhez a krisztallográfiai adatbázisokat használják, a folyadékfázisú NMR-spektroszkópia modern mérési módszereivel pedig a szintetikus tényezőknek az önszerveződési reakciókra gyakorolt hatását derítik fel. Az oldatbeli molekulaszervezetek megismerése elengedhetetlenül szükséges a kristályképződés törvényszerűségeinek a feltárásához, hiszen az oldatfázisban kialakuló rend döntően meghatározza a kristályképződést és ezáltal a kialakuló szupramolekuláris szerkezet milyenségét. A lehetséges szintézisutak, valamint az alkalmas szerkezetfelderítő módszerek kidolgozása teszi lehetővé az önszerveződő módon előálló organoón(IV)-vegyületek potenciális alkalmazási területeinek feltárását (pl. nanoméretű részecskék gyártása, molekuláris elektronika, elválasztástechnika, katalízis, stb).

Triorganoón(IV)-vegyületek körében végzett kutatásaikra támaszkodva választ kerestek arra a kérdésre, hogy a triorganoón(IV)-kationok kétfogú O,O-donor ligandumokkal mutatott reakciójában milyen tényezők eredményeként keletkezik az egyik esetben ciklikus, máskor pedig nyíltláncú termék. A templáthatás tisztázása érdekében különböző kationok jelenlétében vizsgálták a trimetilón(IV)-kation (Me_3Sn^+) és a kétfogú O,O-donor kupferronato-anion (*N*-nitrozo-*N*-fenil-hidroxil-aminato) (a továbbiakban cupf⁻) önszerveződési reakcióját. Azt találták, hogy az NH_4^+ -kationok jelenléte a szupramolekuláris szerveződést mutató tetramer

[Me₃Sn(cupf)]₄ vegyületet kialakulásának, míg a Na⁺-kationok a sztannoxán kötéseken keresztül önszerveződő dimer [Me₂Sn(cupf)₂]₂ kialakulásának kedveztek. Előző munkáikból ismeretes volt, hogy a dimer a tetramer metanolos átkristályosítása során spontán ligandum redisztribúciós reakcióval képződik, tetrametilón(IV) keletkezése közben. Oldatfázisú NMR-spektroszkópiával vizsgálták különböző oldószereknek a tetramer → dimer átalakulásra gyakorolt hatását. Apoláris oldószerekben a tetramer koordinatív kötési monomer egységek képződése közben átszerveződnek. Ez a tetramer ↔ monomer egyensúly a hőmérséklet változtatásával befolyásolható. A Me₃Sn⁺-kation és a kétfogú O,O-donor benzoato-anion (bz⁻) önszerveződési reakcióját NH₄⁺- és Na⁺-kationoknak a jelenlétében is megvizsgálták. Azt találták, hogy mindkét reakció az S-alakú szupramolekuláris szerveződést mutató végtelen hosszú koordinációs polimer, [Me₃Sn(bz)], kialakulásának kedvezett.

Egy, a szakirodalomban még le nem írt új, termikusan indukálható, szilárd fázisú átalakulást is azonosítottak, amelynek során egy metilcsoport-vándorlásos dizmutációs folyamatban a [Me₃Sn(cupf)]₄ tetramer egykristályai [Me₂Sn(cupf)₂]₂ dimer egykristályokká alakultak. Az időfüggő, szilárdfázisú átalakulás termékeinek molarányát NMR-mérésekkel derítették fel, a képződő egykristályokon röntgendiffrakciós méréseket végeztek. Azt találták, hogy az olvadékból kiváló [Me₂Sn(cupf)₂]₂ dimer kristályszerkezetében különbözik a hagyományos szintézisből átkristályosítással nyert terméktől.

Tri-, di- és monoorganoón(IV)-vegyületek és számos O,O- és O,N-donor gyógyszermolekula koordinatív kötéseken keresztül megvalósuló önszerveződési reakcióját is tanulmányozták. Az így nyert fémkomplexeken egykristály röntgendiffrakciós és NMR-méréseket végeztek. A mérésekből levonható szerkezeti összefüggéseket peptid, fehérje és DNS-kutatásokban hasznosítják.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Az Intézet 2004-ben, a korábbi évekhez hasonlóan, széles körű és eredményes együttműködésekkel folytatott a hazai egyetemekkel. Ezekből a munkákból 35 közös publikáció született. Különösen eredményesek voltak a kooperációk a BMGE Szerves Kémiai, Általános és Analitikai Kémiai, Fizikai, valamint Szerves Kémiai Technológia Tanszékével, amelyekkel összesen 11, a Szegedi Egyetem Fizikai Kémiai, Gyógyszerkémiai, Szervetlen és Analitikai Kémiai, továbbá Magkémiai Tanszékével, amelyekkel 8, a Veszprémi Egyetem Szerves Kémiai Tanszékével, ill. az MTA Analitikai Kémiai Tanszéki Kutatócsoportjával, amelyekkel 3, ill. 4 közös dolgozatot jelentettek meg.

Az Intézet kutatói közül jelentős számban (18 fő) vesznek részt mind az elméleti, mind a gyakorlati tárgyak oktatásában a következő egyetemeken: Veszprémi Egyetem, ELTE, BMGE, Pázmány Péter Katolikus Egyetem, Debreceni Egyetem.

Jelenleg 7 Ph.D.-ösztöndíjas dolgozik az Intézetben.

Hazai kapcsolataik között jelentősek a más MTA-intézetekkel, kutatócsoportokkal, továbbá kórházakkal folytatott együttműködések. Kiemelendő a Heim Pál Gyermekkorházal és az Országos Onkológiai Intézettel kialakított kooperációjuk orvosi diagnosztikai kutatásokban. Alapvetési eredményeiket jól hasznosítják ipari szerkezetfelderítési problémák megoldásában. A következőkben felsorolt hazai vállalatokkal dolgoznak közös feladatokon: Chinoin, Biogal és EGIS Gyógyszergyár Rt, Biomedicina Rt.

Az Intézet nemzetközi tudományos együttműködései igen sikeresek voltak 2004-ben is. Összesen 34 tudományos publikációt jelentettek meg a közös munka eredményeiből. Az együttműködések közül külön kiemelendők a következő intézményekkel folytatott kutatások: Université de Provence, Marseille, amellyel két közös publikáció és egy előadás készült, a The Ohio State University, Columbus, amellyel egy közös cikket jelentettek meg. Megemlítendő továbbá a Helsinki és a Stockholmi Egyetem, amellyel MTA-egyezményes kutatások során két-két közös cikk, az Universitat Innsbruck Ionfizikai Intezete (TET együttmukodes), amellyel harom publikacio, valamint a Technische Universitat, Munchen Szervetlen Kemiai Tanszeke (TET-DAAD-egyezmeny), ill. az Elemento-organikus vegyuletek Nesmeyanovrol elnevezett Intezete (Oroszorszag), a Notre-Dame de la Paix Egyetem, Namur (Belgium) es a Bolgar Tudomanyos Akademia Szerves Kemiai Intezete (Szofia), amelyekkel a megfelelo akademiai egyezmenyes kutatasok eredmenyul tobb kozos eloadast tartottak nemzetkozsi konferenciakon 2004-ben. Fontos partneruk a Max-Planck-Institut fur Biophysikalische Chemie, Gottingen, az Universidad Extremadura, Badajo (Spanyolorszag), a University of Texas at El Paso, a University of Cape Town, a University of Lodz es a Babes-Bolyai Tudomanyegyetem, amely intezmenyekkel egy-egy, mig a Technische Universitat, Freiburg, amellyel harom kozos publikaciot jelentettek meg 2004-ben.

MTA-NSF-OTKA projekt keretében egy kutato 3 hetet toltott a Northwestern University Kemiai Tanszeken, Evanstonban (US). Az együttmukodes eredmenyekent sokatomos molekulak reakciodinamikai vizsgalatara szamitogepes programot dolgoztak ki, amelyet konferencian is bemutatnak. Kozos Marie Curie Training Network palyazatot nyujtottak be a Perugiai Egyetem Kemiai Tanszekevel. Ket olasz kutato 1-1 honapot toltott az Intezetben es a SzTAKI-ban a reakciodinamikai programok parhuzamositasa c. tema keretében (COST Action D23).

Az Intezet kutatoi 2004-ben osszesen 82 alkalommal vettek reszt konferenciakon, ill. tanulmanyutakon.

Jelentos szakmai sikert hozott a Central European Symposium on Quantum Chemistry megrendezese 2004-ben Tihanyban, valamint a 14th Informal Meeting on Mass Spectrometry nemzetkozsi konferencia, amelyet 2004-ben Padovaban rendeztek meg (az Intezet a rendezveny tarsszervezoje volt).

Az Intezet nemzetkozsi kapcsolatainak jelentosegere mutat az is, hogy reszt vesznek a COST harom kulonbozo bizottsaganak munkajaban es mas jelentos nemzetkozsi, ill. hazai tudomanyos szervezetek iranyitasában is (pl. Europai Fotokemiai Tarsasag Magyar Nemzeti Tagozata, Combustion Institute US Magyar egestudomanyi Bizottsag, ICORS International Steering Committee, AMPERE Committee, European Molecular Liquid Society).

Tobb nemzetkozsi folyoiratot szerkesztenek, ill. szerkesztobizottsagi tagkent tevekenykednek (pl. Croatica Chemica Acta, Asian Journal of Spectroscopy; Journal of Raman Spectroscopy; Vibrational Spectroscopy; Journal of Mass Spectrometry; European Journal of Mass Spectrometry; Journal of Analytical, Environmental and Cultural Heritage Chemistry; Rapid Communications in Mass Spectrometry).

IV. Fontosabb, elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

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

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

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

A COST D23-as akció (Metachem: metalaboratóriumok kémiai feladatok komplex számítógépes megoldására) keretében a SIMBEX (Molekulasugár kísérletek szimulációja számítógép Griden) munkacsoportban vesznek részt. A munka célja: földrajzilag távoli, számítógépes erőforrások elérhetővé tétele a jobb kihasználás és a nagyobb kapacitás biztosítása végett. A projekthez egy hazai IKTA-projekt is kapcsolódik, amelyben a SZTAKI egyik kutatócsoportjával hazai, kémiai célú számítógéppgridet építettek ki.

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

Az elnyert hazai és nemzetközi pályázatokról a VI. b. és c. táblázatok adnak tájékoztatást.

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

1. Villamena FA, Rockenbauer A, Galluci J, Velayutham M, Hadad CM, Zweier JL: Spin trapping by 5-carbamoyl-5-methyl-1-pyrroline N-oxide (AMPO): Theoretical and experimental studies, *Journal of Organic Chemistry*, 69, 7994-8004 (2004)
2. Sebők-Nagy K, Biczók L, Morimoto A, Shimada T, Inoue H: Energy dissipation processes of singlet-excited 1-hydroxyfluorenone and its hydrogen-bonded complex with N-methylimidazole, *Photochemistry and Photobiology*, 80, 119-126 (2004)
3. Skripkin MY, Lindqvist-Reis P, Abbasi A, Mink J, Persson I, Sandström M: Vibrational spectroscopic force field studies of dimethyl sulfoxide and hexakis(dimethylsulfoxide) scandium(III) iodide, and crystal and solution structure of the hexakis(dimethylsulfoxide) scandium(III) ion, *Dalton Transactions*, (23), 4038-4049 (2004)

4. Keszler AM, Nemes L, Ahmad SR, Fang X: Characterisation of carbon nanotube materials by Raman spectroscopy and microscopy - A case study of multiwalled and singlewalled samples, *Journal of Optoelectronics and Advanced Materials*, 6, 1269-1274 (2004)
5. Keresztury G, Holly S, István K, Sundius T, Lóránd T: Analysis of vibrational spectra of some new E- and Z-4-arylidene-3-isochromanones Part 2. Isomers and conformers of the 2'-pyrrolyl and 2'-nitrophenyl derivatives, *Journal of Biochemical and Biophysical Methods*, 61, 107-118 (2004)
6. Imrik K, Farkas E, Vasvári G, Szilágyi I, Sarzynski D, Dóbbé S et al. (8): Laser spectrometry and kinetics of selected elementary reactions of the acetyl radical, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 6, 3958-3968 (2004)
7. Fábián L, Kálmán A, Argay Gy, Bernáth G, Gyarmati ZsCs: Two polymorphs of a beta-lactam (trans-13-azabicyclo[10.2.0]tetradecan-14-one). Concomitant crystal polymorphism and isostucturality, *Chemical Communications*, 2114-2115 (2004)
8. Megyes T, Grósz T, Radnai T, Bakó I, Pálinkás G: Solvation of calcium ion in polar solvents: An X-ray diffraction and ab initio study, *Journal of Physical Chemistry A*, 108, 7261-7271 (2004)
9. Drahos L, Peltz Cs, Vékey K: Accuracy of enthalpy and entropy determination using the kinetic method: are we approaching a consensus? *Journal of Mass Spectrometry*, 39, 1016-1024 (2004)
10. Lagana A, Lendvay Gy(eds): *Theory of Chemical Reaction Dynamics*, Kluwer: Academic Publishers, Netherlands, 2004, p. 514

VI. A kutatóhely 2004. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: Kémiai Kutatóközpont, Szerkezeti Kémiai Intézet

Átlagléttség ¹ : 84	Ebből kutató ² : 62	
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma: 27		
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma: 102		
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ³ : 102		
Ebből idegen nyelvű külföldi folyóiratban: 94	idegen nyelvű hazai folyóiratban: -	
nemzetközi együttműködés keretében: 34	SCI által regisztrált folyóiratban: 92	
összesített impakt faktor: 178,751	összes hivatkozás száma ⁴ : 1351	
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül: 1148		
Megjelent könyv: -	könyvfejezet: 3	jegyzet: -
ebből magyar nyelven könyv: -	könyvfejezet: -	jegyzet: -
Megvédett PhD értekezés: 4	Megvédett MTA doktori értekezés ⁵ : -	
Bejelentett találmányok száma: -	Megadott szabadalmak száma: -	
ebből külföldön: -	ebből külföldön: -	
Értékesített szabadalmak száma: -		
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma: 31	poszterek száma ⁶ : 44	
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ⁷ : 18		
Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 8	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság: 8	
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege:	381,723 MFt	
Beruházási támogatás: -	MFt	Fiatal kutatói álláshelyek száma ⁸ : -
Az év folyamán művelt OTKA témák száma: 20		
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	20,181 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma: 13		
NKFP: 1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	20,351 MFt
Egyéb: 12	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	50,759 MFt
Az év folyamán művelt NFT témák száma ⁹ :		
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	MFt
Külföldi vagy nemzetközi forrásból művelt témák száma ¹⁰ : 2		
EU forrásból: 1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	4,120 MFt
Egyéb: 1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0,792 MFt
Egyéb pályázatok keretében művelt témák száma ¹¹ : 1		
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0,800 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány ¹² :		- MFt

VI/a. A kutatóhely 2004. évi tudományos teljesítményének egyéb bemutatható eredményei¹³

Az intézet neve: Kémiai Kutatóközpont, Szerkezeti Kémiai Intézet

Saját kutatás-fejlesztési munkával elkészítették egy *új típusú rézgőzlézer* laboratóriumi példányát, amit sikeresen alkalmaztak tájékozódó jellegű fotokémiai vizsgálatokban. A kifejlesztett lézerberendezést várhatóan alkalmazzák a gyakorlatban is. Jelentős érdeklődés mutatkozik iránta bőrgyógyászok és kozmetológusok részéről.

I. Az intézet fő feladatai a beszámolási évben

Az intézetben folyó kutatások - a korábbi évekhez hasonlóan - 2004-ben is az anyagtudomány és a környezeti kémia egyes tudományos problémáinak felderítésére irányultak. A fő területeken belül ugyanakkor folyamatosan korszerűsítik művelt témáikat.

Anyagtudományi kutatásaikban az anyagok összetétele, szerkezete, tulajdonságai és előállítási módszerei közötti összefüggések kémiai részleteinek feltárására törekedtek, célszerűen választott funkcionális és szerkezeti anyagok esetében. A tanulmányozott modellek között egyre nagyobb részt képviselnek a nanoszerkezetű rétegek és tömbi anyagok, valamint a biológiai-orvosbiológiai vonatkozású anyagi rendszerek.

Környezeti kémiai kutatásaik olyan fizikai-kémiai és kémiai összefüggések felderítésére irányultak, amelyek elősegítik a természeti környezetet az eddigieknél kisebb mértékben terhelő új termékek és eljárások megalapozását és kifejlesztését.

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

Anyagkémiai kutatások

NKFP projekt keretében izületi endoprotézisekben alkalmazott, ultra-nagy molekulatömegű polietilént kezeltek különféle ion- és atomsugarakkal, a kopásállóság javítása céljából. Összefüggést találtak a kopásállóság és az elektronspektroszkópiai úton meghatározott, ún. C1s plazmonvesztési energia között.

Száraz levegőben végzett, plazmaimerziós ionimplantációval (PIII) megjavították titánötvözetek és alumínium-tartalmú titánötvözetek keménységét és kopásállóságát. Az észlelt hatásokat az alumínium felületi szegregációjával és oxidált, titán- és alumínium-tartalmú felületi réteg kialakulásával magyarázták. Ugyanezen anyagok nitrogénben végzett PIII kezelésekor nem tapasztaltak szegregációt, viszont titán-nitrid képződött a minta felületén.

Folytatták az XPS mérések kvantitatív kiértékelésének fejlesztését. Befejezték a CN_x típusú rétegek tulajdonságainak jellemzésére irányuló kutatásokat. OTKA pályázat keretében megkezdték szén-alapú nanokompozit rétegek és szilícium-tartalmú DLC-rétegek növesztését és vizsgálatát.

Aromás poliimidet kobalt- és vas-ionokkal, nagy dózisban bombázva, elszenesedett polimer-mátrixból és fémrészecskékből álló nanokompozit rétegek képződését mutatták ki. XPS vizsgálataik szerint ezekben a rétegekben a vas oxidként, míg a kobalt fémes és oxidos állapotban van jelen. A kapott eredmények alapján a polimerek átmenetifém ionokkal történő bombázása alkalmas módszer lehet különleges tulajdonságú nanokompozitok előállítására.

Vizsgálták fullerének termikus plazmában történő előállítását, különböző korom és grafitporokból kiindulva. A vizsgálatok célja a fullerénképződés mechanizmusának és kinetikájának megismerése, és az előállítási körülmények hatásának felderítése volt. Megállapították, hogy a kiindulási anyagok szemcseméretén túlmenően, a korom- és grafit szemcsék hővezető képessége is nagymértékben befolyásolja a plazmában lezajló folyamatokat. Ennek oka, hogy a hővezető képesség (ami szoros kapcsolatban van a szerkezeti rendezettséggel) határozza meg a szemcsék elpárolgásának mértékét. Ezzel magyarázható, hogy fullerének termikus plazmában történő előállításához nem a kis szemcseméretű, amorf szerkezetű korom, hanem az 1-10 μ m szemcseméretű, rendezett szerkezetű grafit a megfelelő kiindulási anyag. Az eddigi legkedvezőbb esetben 6%-os fullerén kihozatalt értek el, ami közel másfélszerese az eddig alkalmazott előállítási módszereknél elért kihozatalnak. Az RF termikus plazmában kapott fullerén elegyben a C₆₀/C₇₀ arány 2,6 volt, és több magasabb szénatom-számú fullerént (pl. C₈₄-et) is kimutattak a termékek között. Felvázolták a fullerén képződés mechanizmusát, adott körülmények között. A fullerén kihozatal, a reakciókörülmények további javításával, várhatóan növelhető. Jó esély van arra, hogy a korábbinál termelékenyebb és gazdaságosabb módszert dolgozzanak ki nagyobb molekulatömegű fullerének előállítására, ami lehetővé teszi a fullerének eddiginél szélesebb felhasználását.

Tanulmányozták szerkezeti és funkcionális kerámiák előállítására alkalmas, nanoszemcsés porok, így cink-oxid és cink-ferritek, illetve cink-ferro-ferritek előállítását, termikus plazmában. Meghatározták a termékek összetételét és morfológiáját befolyásoló műveleti paramétereket, a kívánt összetételű, komplex oxidok kialakításának feltételeit, valamint az ún. inverz spinellek szintézisének legcélszerűbb körülményeit. A kapott, nagy tisztaságú, nanoszemcsés porokból újszerű, különleges optikai, elektromos vagy mágneses tulajdonságú kerámiák készíthetők.

Eljárást dolgoztak ki új típusú, hiperelágazásos polimerek szintézisére, a kváziélő, gyökös polimerizáció törvényszerűségeinek alkalmazásával. A kapott anyagok szerkezetének felderítésével és oldatainak vizsgálatával igazolták a nagyszámú funkciós csoporttal rendelkező, hiperelágazásos polimerek létrejöttét. E polimerek alkalmasak lehetnek molekuláris kapszulázásra, nanorészecskék szintézisére, új típusú polimer keverékek és térhálósító adalékok előállítására, és a gyógyszerkémiában is várhatóan széles körben használhatók fel.

Az utóbbi időben világszerte igen intenzív kutatások folynak a szupramolekuláris rendeződésre képes, szintetikus polimerekkel kapcsolatban. Az intézetben - nemzetközi együttműködésben - egy új szupramolekuláris polimer rendszert állítottak elő tökéletes láncvégi funkcionalitással rendelkező poliizobutilénből kiindulva, kváziélő karbokationos polimerizációval. A poliizobutilén-polietilén-oxid blokk-kopolimerekből képződő micellák szabályosan kitöltik a teret. Ezeket templátként alkalmazva, nanoméretű, üreges szilícium-dioxid és titán-dioxid szemcséket állítottak elő. Az így készített, rendkívül nagy fajlagos felületű anyagok számos területen előnyösen használhatók fel.

Számottevő eredményeket értek el az amfifil polimer kotérhálók nanofázisú morfológiájának felderítésében. A világon elsőként állítottak elő széles összetétel-tartományban olyan amfifil kotérhálókat, amelyekben az elkülönülő fázisok jellemző mérete 3-20 nm közé esik. Különbőféle, egymástól független szerkezetkutató módszerekkel tanulmányozták az összetétel és a morfológia közötti összefüggéseket ezeknél az anyagoknál. Megállapították, hogy az ezeket alkotó fázisok nanoméretben különülnek el egymástól, és az összetevők térbeli

elrendeződése nagymértékben függ az összetételtől. Az ilyen polimer kotérhálók - szemben a hasonló jellegű, két- és többkomponensű polimerekkel - széles összetétel tartományban megőrzik különleges, kofolytonos morfológiájukat. Ez számos nanotechnológiai alkalmazást tesz lehetővé.

Folytatták a polimerek környezeti lebomlásával és stabilizációjával foglalkozó kutatásaikat. Megállapították, hogy egyes fenolos antioxidánsok hidrolitikus stabilitása nemcsak a modellkísérletek körülményei között, hanem az iparilag feldolgozott polietilén csövekben is kicsi, és erősen függ a stabilizátor kémiai szerkezetétől. A kutatás elméleti és gyakorlati szempontból is fontos, mivel a modellként választott, nagysűrűségű polietilén egyik legnagyobb felhasználója a csőgyártás. A vízzel érintkező polietilén csövekben levő stabilizátorok sorsa egyelőre nem ismert, bár ennek jelentős egészségügyi és környezetvédelmi vonatkozásai vannak.

Heterogén polimer rendszerek tanulmányozása kapcsán vizsgálták a PP/PIB keverékek szerkezete és tulajdonságai közötti kapcsolatokat. Megállapították, hogy a komponensek kölcsönös oldhatósága különbözik, ami az összetétel függvényében érdekes szerkezetek kialakulásához, és ennek megfelelő tulajdonságokhoz vezet. Részletesen vizsgálták a töltőanyagok felületi jellemzőinek meghatározására alkalmas módszereket. Az egyik leggyakrabban alkalmazott ilyen eljárás az inverz gázkromatográfia. Irodalmi adatok, valamint saját méréseik alapján megállapították a módszer buktatóit és korlátait, és eljárást javasoltak a felületi jellemzők megbízható meghatározására.

Jelentősen előrehaladtak a delaminációval előállított, rétegszilikát nanokompozitok tanulmányozásában. Különböző mátrixú nanokompozitok vizsgálatával megállapították, hogy a rétegszilikát mindig csak részlegesen delaminálódik. A feldolgozás során bonyolult szerkezet alakul ki, ami eredeti szemcséket, a polimer által duzzasztott szilikát egységeket és delaminált egyedi lemezeket egyaránt tartalmaz. Nagy szilikáttartalomnál kártyavárszerű szerkezet is kialakulhat. A delamináció mértékét a komponensek kölcsönhatása és kinetikai tényezők határozzák meg; a szerkezet mennyiségi jellemzése azonban még nem megoldott. Egyértelműen bizonyították, hogy poliamid nanokompozitok tulajdonságait jelentősen befolyásolják a határfelületi kölcsönhatások.

Folytatták a biológiailag lebontható műanyagok előállítására és a természetes alapanyagok felhasználására irányuló kutatásaikat. Befejezték a cellulóz savas és enzimés bontási kísérleteit, amelyek célja az volt, hogy a bomlástermékeket alifás poliészterrel kombinálva, biológiailag lebontható műanyagot állítsanak elő. Megállapították, hogy mind a savas, mind az enzimés bontás nagyon kis polimerizáció-fokú termékekhez vezet, amelyekkel az eredeti célt nem lehet elérni. Ennek megfelelően módosították a kutatás irányát, és a cellulóz kémiai lágyításának lehetőségeit kezdték tanulmányozni. Természetes erősítőanyagok felhasználásával módosított polipropilén társított anyagokat állítottak elő; ezekből használati tárgyak és akusztikus eszközök állíthatók elő. Vizsgálták, hogy a kompozit tulajdonságai miként függenek a komponensek típusától, valamint a határfelületi kölcsönhatásoktól. Megállapították, hogy kombinált, reaktív/nem-reaktív felületkezeléssel jelentősen növelni lehet a szilárdságot. Az erősítőanyag mennyiségének növelése ugyanakkor lerontja a feldolgozhatóságot.

Elektrokémiai kutatásaik során iparilag használható foszfátozó fürdőt fejlesztettek ki. A fürdőben kis porozitású, nanométer vastagságú bevonatok alakíthatók ki horganyfelületeken. Az új eljárással kiküszöbölhetők azok a környezetre ártalmas, kromátozási eljárások,

amelyeket eddig a karosszériaelemek gyártására használt, tűzihorganyzott vaslemezek korrózióvédelmére alkalmaztak.

Réz-alumínium fém-pár korróziós sajátságainak vizsgálatakor megállapították, hogy a rézionok, illetve az alumíniummal galvanikus kapcsolatban lévő fémréz gyorsítja a korróziót; a hatás nagymértékben függ az alumínium felületének állapotától. Utóbbi már viszonylag rövid ideig tartó, forró desztillált vízben végzett előkezeléssel is jelentősen módosítható.

Klorid-ionok és hidrogén-szulfát-ionok specifikus adszorpciójának radioaktív nyomjelzéses vizsgálatával bepillantást nyertek a vas, kobalt és mangán korróziója során bekövetkező határfelületi jelenségekbe. Megállapították, hogy a klorid- és szulfát-ionok adszorpció más és más pH tartományban játszódik le. A jelenséget azzal magyarázták, hogy a kétféle ion különböző erősséggel kötődik meg oxidált, illetve tiszta fémfelületen.

Iridium (111) egykristályon végeztek elektrokémiai vizsgálatokat. A voltammetriás módszerrel és a kettősréteg-kapacitás mérésével kapott elektródpotenciál görbéket hasonlóknak találták a platina (111) elektródokon mérhetőkhöz.

Nagyérzékenységű, mintegy 0.1pA felbontású elektrokémiai mérőberendezést (ún. bipontenciosztót) fejlesztettek ki nanorések kialakításához, és az így létrehozott résekben a molekuláris vezetőképesség méréséhez.

Új módszert dolgoztak ki vas(III)-poligalakturonát komplexek molekulatömegének meghatározására. A módszer lényege, hogy a láncvégi cukormolekula nem egyszerűen komplexet képez a vas(III)-ionokkal, hanem a gyűrű felhasadása révén redoxireakcióba is lép vele, miközben a vas(III) vas(II)-vé redukálódik. A redoxireakció kvantitatív, és felhasználható a láncvégződés számának meghatározására. Utóbbiból kiszámolható a cukormolekulák száma, majd az átlagos molekulatömeg. A vas(III)-poligalakturonát komplex átlagos tömegének ismerete az élő szervezetben történő vasszívódás szempontjából fontos.

Gyógynövénykutatásaik során elsőként írták le az illóolajok és komponenseik antioxidáns tulajdonságát, redukáló képességük meghatározása alapján. Összefüggést találtak a redukáló képesség és a molekula szerkezete között: megállapították hogy a nagyobb redukáló képességű illóolaj komponensek delokalizált elektron szerkezetűek. Kimutatták, hogy az illóolajok redukáló képessége nagyobb, mint az illóolaj komponenseké; a redukáló képesség tehát nem köthető kizárólag a terpénekhez, hanem azt a jelenlévő egyéb vegyületek is befolyásolják.

Környezatkémiai kutatások

Nagyteljesítményű folyadékkromatográfiás HPLC/APCI-MS és MALDITOFMS módszert dolgoztak ki növényolajok gyors elemzésére és eredetének vizsgálatára, a triglicerid összetétel alapján.

Tanulmányozták környezetszennyező anyagok kötődését egyes növényi fehérjékhez. Meghatározták, hogy a vizsgált szennyező molekulák (növényvédőszer bomlástermékei, oldószer, felületaktív anyagok) lipofil jellege és sztereokémiai viszonyai hogyan befolyásolják a kialakuló kölcsönhatások erősségét. Bizonyították a Trucker-3 modell alkalmazhatóságát nagy kromatográfiás adatmátrixok értékelésére.

Számos, elsősorban környezetvédelemhez és ipari korrózióvédelemhez kapcsolódó analitikai feladatot oldottak meg hazai iparvállalatok és kutatóhelyek megbízásai alapján.

Módszert dolgoztak ki a műanyag hulladékok pirolízisekor kapott olajok finomítására használt katalizátorok gyors és egyszerű tesztelésére. Megállapították, hogy a katalizátorok aktivitása a felületükön lerakódó szén miatt csökken. A lerakódás, levegőben történő hevítéssel, teljes mértékben eltávolítható, egyéb módszerekkel a katalizátorok aktivitását nem lehet visszaállítani. Az eredmények arra utalnak, hogy az elektronikai hulladékok technológiai méretben is környezetkímélő módon hasznosíthatók.

Vizsgálták brómozott égésgátlók pirolitikus bontását kalcium-karbonát - szén adalékelegy jelenlétében. Ezzel az adalékkal a polimerekből keletkező, folyékony pirolízis termékekben levő halogének jó hatásfokkal megköthetők.

Folytatva korábbi kutatásaikat, megállapították, hogy a poli(vinil-klorid), a világon harmadik legnagyobb mennyiségben gyártott polimer az ipari gyártásnál mindig alkalmazott stabilizátorok jelenlétében is lebontható, oxidáló körülmények közötti kezeléssel. Kimutatták, hogy az általuk korábban kidolgozott oxidációs módszer ón-stabilizátorok jelenlétében is a PVC láncok jelentős tördelődését eredményezi, és kisebb molekulatömegű, oxidált szerkezeteket tartalmazó polimer láncok képződnek. Ez lehetőséget teremt a PVC másodlagos újrahasznosítására olyan területeken is, ahol az eredeti PVC - szerkezete miatt - nem alkalmazható.

Vizsgálták egyes, nagy mennyiségben előforduló veszélyes hulladékok – égetőműi pernye, kohászati hulladékok stb. – plazmatechnológiával történő ártalmatlanításának, illetve másodlagos nyersanyagként történő felhasználásának lehetőségeit, a plazmatechnológia környezetvédelmi célú hazai bevezetésének megalapozása céljából. A kutatások során fontos szempont, hogy a kidolgozandó eljárás ne csak a hulladékok ártalmatlanítására, hanem azok értékes termékévé történő átalakítására is alkalmas legyen. Így nemcsak kisebb környezetterheléssel lehet számolni, hanem az eljárás bevezetésével gazdasági haszon is realizálható.

A téma eddigi művelése során analitikai módszereket dolgoztak ki égetőműi pernyék, kohászati szállóporok és iszapok szerves és szervetlen összetevőinek minőségi és mennyiségi meghatározására. Termodinamikai számításokat végeztek poliklórozott szénhidrogének és származékaik esetében a termikus plazmában végzett hőbontás mértékének előrejelzésére, és a várható egyensúlyi összetételek meghatározására. Ugyancsak termodinamikai számítások alapján meghatározták a vizsgált szerves hulladékok termikus plazmában végzett olvasztása során létrejövő fázisokat. Mintavételi módszert és elemzési eljárást dolgoztak ki a plazmareaktorból kilépő gázáram összetételének meghatározására.

Vizsgálták a víztisztító kapacitás bővítésének lehetőségeit Garé és Hidas térségében, ahol a korábban lerakott és nem megfelelően tárolt, 16000 tonna vegyes poliklór-benzol hulladék súlyos talaj- és talajvízszennyezést okozott. Kombinált reaktort fejlesztettek ki a szennyezett talajvíz előtisztítására, ezáltal a meglévő víztisztító üzem áteresztőképességének jelentős növelésére. A reaktor a következő feladatokat látja el:

- nappal - napenergia felhasználásával - a klórbenzolokat mozgó folyadékrétegben, fotokatalitikus reakcióban oxidálja,
- éjjel-nappal működve, ellenáramú levegővel sztrippeli a mozgó vízréteget és a kihajtott klórbenzolokat katalitikusan oxidálja,
- nappal - napkollektorként működve - melegíti a kezelendő vízréteget, ami jelentősen növeli a sztrippelés hatásfokát.

A BME Vegyipari Műveletek Tanszékével együttműködve folytatták a szakaszos hibrid elválasztási módszerek fejlesztésére irányuló kutatásaikat.

A napenergia termikus hasznosítására irányuló kutató-fejlesztő munka során megterveztek és Cagliariában installáltak egy, a tengervíz desztillációjára szolgáló, új típusú, üzemi méretű napenergiás berendezést. A rendszer bevizsgálását és optimalását a Cagliari Egyetemmel közösen végzik.

Energetikai ültetvényekről származó faféleségek termikus viselkedését tanulmányozták, különös tekintettel a hőbomlást befolyásoló paraméterekre, így a szervesetlen sók, az extrahálható anyagok és a kéreg mennyiségére. Megállapították, hogy az extraktumok bomlása széles hőmérséklettartományban játszódik le, és ez befolyásolja a fa hőbomlását is. Az extrahálható anyagokat különböző származékképzési eljárások segítségével azonosították.

Ma már léteznek olyan, gazdaságos és környezetkímélő faszéngyártási eljárások, amelyeknél a biomassa energiatartalmának többsége a faszénbe kerül. Ezen eljárások fejlesztésébe bekapcsolódva, módszert dolgoztak ki faszének égési tulajdonságainak termogravimetriával történő tanulmányozására, és az eredmények matematikai-reakciókinetikai leírására. A biomassa hatékony energetikai hasznosítását elősegítő kutatások az éghajlati katasztrófák elkerüléséhez járulnak hozzá, a Kiotói egyezménynek és az EU direktíváknak megfelelően.

Új, környezetbarát hordozóanyagot fejlesztettek ki helikopterrel végzett, biológiai szúnyogirtáshoz. A granulátum formájú hordozóanyag alkalmas a szúnyoglárva elpusztítására, mivel a rávitt hatóanyagot folyamatosan, szabályozott módon bocsátja ki. E tulajdonsága egyedülálló a világon. A gipszet, perlitet, karboxi-metil-cellulózt és glicerint tartalmazó granulátum tulajdonságainak optimalására vizsgálták a különböző körülmények között előállított termékek úszóképességet, úszási idejét, mechanikai szilárdságát és a hatóanyag leadási sebességét. Kifejlesztették a granulátum előállítási technológiáját.

Bízató eredményeket értek el propilén-glikol hűtőközegben alkalmazható, korróziógátló adalékanyagok kifejlesztésében. Az eredmények alapján reális lehetőség van a környezeti szempontból káros etilén-glikolt kiváltó, alacsony dermedéspontú, környezetbarát hűtőközeg létrehozására. Az új, propilén-glikol alapú hűtőközeg, a gépjárművek hűtőrendszere mellett, ipari rendszerekben is felhasználható. Az adalékanyag szabadalmaztatására, és az eljárás ipari megvalósítására 2005-ben kerülhet sor.

Beszámoló egy kiemelt kutatási eredményről

Az MTA KK AKI-ban hosszabb ideje foglalkoznak plazmakémiai kutatásokkal, elsősorban is a magas hőmérsékletű, ún. termikus plazmák anyagtudományi és anyagtechnológiai, valamint környezetvédelmi alkalmazási lehetőségeinek tanulmányozásával.

A termikus plazmák, amelyek lényegüket tekintve nagy energiatartalmú, ionizált gázelegyek, kiválóan alkalmazhatók magas hőmérsékleten lejátszódó kémiai reakciók kivitelezésére. Az intézetben folyó plazmakémiai kutatások alapvető célja annak felderítése, hogy különböző modellrendszerek esetében milyen összefüggések állapíthatók meg a plazmában végzett átalakítások körülményei és a képződő reakciótermékek tulajdonságai között.

A termikus plazmákban biztosítható különleges reakció-feltételek (a több ezer fokok hőmérséklet, az intenzív hő- és anyagátadás, a gázfázis összetételének széles határok közötti változtathatósága) mind a különleges tulajdonságú és nagy tisztaságú funkcionális és

szerkezeti anyagok előállítására, mind a fokozottan veszélyes anyagok ártalmatlanítására alkalmassá teszi ezeket a rendszereket.

Az AKI-ben többféle, különböző kapacitású plazmareaktor áll a kutatások rendelkezésére. A nagylaboratóriumi méretű, ún. rádiófrekvenciás (RF) plazmareaktor képe és a reaktorban kialakuló plazmaláng hőmérséklet-eloszlása az 1. ábrán látható. Érdeemes megjegyezni, hogy a plazmaláng legmagasabb hőmérsékletű (az ábrán vörössel színezett) zónájában 10000K feletti hőmérséklet uralkodik.



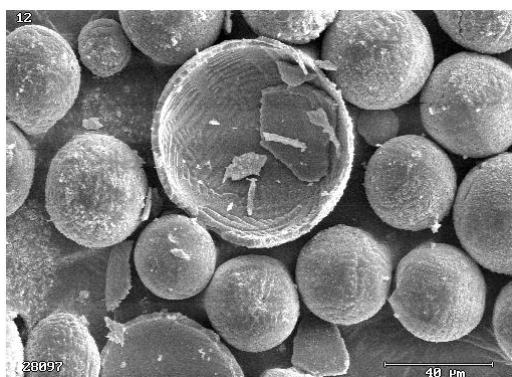
1. ábra Az AKI-ban üzemelő RF plazmarendszer képe és a plazmareaktor hőmérséklet-eloszlása

Anyagtudományi vonatkozású plazmakémiai kutatásaikban elsősorban különleges tulajdonságú és morfológiájú, jellemzően mikro- és nanoméretű ($1\mu\text{m} = 10^{-6}\text{m}$, $1\text{nm} = 10^{-9}\text{m}$) szemcsékből álló porok előállítási folyamatait tanulmányozták. A vizsgált modellek körébe tartoznak

- a tömör és üreges kerámiaanyagok (Al_2O_3 , SiO_2 , TiO_2 , Si_3N_4 , ZnO)
- a fullerének (C_{60} , C_{70} , C_{84}) és
- a különleges szerkezetű és tulajdonságú mágneses anyagok (cink-ferritek, inverz ferritek)

Kutatásaik során tisztázták a nanoporok képződésének számos részletét, a folyamatok időbeli lefutását és felderítették a termékek tulajdonságai és előállítási körülményei közötti kapcsolatokat.

A termikus plazmában előállított, mikroméretű Al_2O_3 gömbök pásztázó elektronmikroszkópos (SEM) felvétele a 2. ábrán látható. A kép közepén levő, kettétört, üreges szemcse átmérője mintegy $50\mu\text{m}$. Ugyancsak gömbszemcsés, de lényegesen kisebb, $30\text{-}60\text{nm}$ átlagos szemcseméretű szilícium-nitridet is előállítottak az 1. ábrán látható kísérleti berendezésben. A kapott szilícium-nitrid „nanoporok” előnyösen használhatók fel magas hőmérsékleten, különleges igénybevétel mellett (gépkocsi motorokban, erőművekben, űrtechnikában) alkalmazásra kerülő műszaki kerámiák alapanyagaként.



2. ábra RF plazmában készített Al₂O₃ SEM felvétele. A felvétel jól mutatja, hogy termék gömbszerű, üreges és tömör szemcsékből áll.

A termikus plazmák környezetvédelmi célú alkalmazásához kapcsolódóan, széleskörű hazai és nemzetközi együttműködésben

- eljárást dolgoztak ki fémtartalmú kohászati szállóporok kezelésére
- tanulmányozták egyes halogéntartalmú, fokozottan veszélyes szerves anyagok termikus plazmában történő lebontását és környezetre nem veszélyes anyagokká történő átalakítását.

Tisztázták a folyamatok számos fontos részletét, és technológiai ajánlást dolgoztak ki a termikus plazmatechnológia hazai környezetvédelmi célú bevezetésére.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Az AKI kutatói a hazai kutatóhelyek közül számos akadémiai kutatóintézetrel (KK-KI, KK-IKI, MFA, GKI) és egyetemi (ELTE, BME, DE, ME, SE, SZE, SZIE, VE) tanszékekkel dolgoztak együtt különféle kutatási témákban. Az intézet BME-vel közösen működteti a hazai felületmérnök-képzés bázislaboratóriumát, és a Veszprémi Egyetem kihelyezett tanszékeként is részt vesz a hazai felsőfokú oktatásban. Az Alkalmazott Polimer Fizikai Kémiai Osztály gyakorlatilag egy szakmai egységet alkot a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Műanyag- és Gumiipari Tanszékével. Az intézet munkatársai ezen kívül a több egyetemen (CEU, DE, Dunaújvárosi Főiskola, ELTE, ME, SE, SZE, VE) tartanak graduális és posztgraduális kurzusokat.

Témáik többségét nemzetközi kutatási együttműködés keretében művelik. A közös kutatások kereteit egyrészt EU projektek (lásd később), másrészt az alábbi, kétoldalú együttműködések adják.

Plazmakémiai folyamatok modellezésében az OTA Szervetlen Kémiai Intézetével, fullerének termikus plazmában végzett szintézisével kapcsolatban a belgrádi Vinca Atommag Kutatóközponttal, az elektrokémiai kettősréteg vizsgálatában az Ulmi Egyetemen, napenergiás desztillálók fejlesztésében a Cagliari Egyetemen működnek együtt.

Polimer-kémiai kutatásokban igen eredményesen működnek együtt a Drezdai Polimer Intézetrel, a mainzi Polimer Kutatási Max Planck Intézetrel, a Freiburgi Egyetemen, a Nottinghami Egyetemen. 2004-től TÉT támogatással közös kutatási projektet indítottak a Bécsi Egyetemen. Polimertechnológiai témákban hazai vállalatokkal (TVK Rt), a Bay Zoltán Anyagtudományi Intézetrel, a francia Clariant Huningue céggel, a penangi Malajzia Egyetemen és a Twenti Egyetemen végeznek közös kutatásokat.

TÉT támogatással két indiai kutatóhellyel van közös kutatási projektjük. A Jodhpur Egyetemen együttműködve permanganát-komplexek szintézisét tanulmányozzák, míg a hyderabadi Indiai Technológiai Intézettel fém tartalmú, mágneses aktív szenek előállításának lehetőségeit kutatják.

Műanyag hulladékok újrahasznosítási lehetőségeinek kutatásában az Okayama Egyetemen (Japán), míg a biomassza anyagok energetikai felhasználásának kutatásában a Hawaii Egyetemen, a Norvég Műszaki Egyetemen, a nápolyi Frederico II. Tudományegyetemen és a Katalán Műszaki Egyetemen működnek együtt.

IV. A fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

Hazai pályázatok

Az intézet kutatói által 2004-ben művelt OTKA pályázatok közül az alábbiakban értek el figyelemreméltó eredményeket:

- Szén alapú nanokompozitok előállítására és komplex szerkezeti jellemzésére irányuló pályázatukban (T043359) szilícium-tartalmú DLC-rétegeket növesztettek CVD módszerrel, és vizsgálták felületkémi és nanomechanikai tulajdonságaikat XPS, nano-indentációs és nano-karcolásos módszerekkel.
- Nanoporok plazmaszintézisére irányuló projektjükben (T047360) fullerének, továbbá nanoméretű cink-oxid és cink-ferrit szemcsék plazmatechnológiával történő előállításának részfolyamatait tanulmányozták és értelmezték.
- Nanoszerkezetű amfifil kotérhálók és gélek kutatásában (T046759) jelentős előrehaladást értek el az amfifil kotérhálók morfológiájának, nevezetesen a nanofázisok elválásának felderítésében.
- Az elektrokémiai adszorpcióval kapcsolatos kutatásaik (T031703, T045888, T037241, T042452) hozzájárultak a korróziós folyamatok első elemi lépésének pontosabb megismeréséhez, ami jó alapot ad az eddigieknél hatékonyabb korrózióvédelmi eljárások és technológiák kidolgozásához.
- A réz-alumínium fém pár korróziós sajátságainak felderítése, és az azokat befolyásoló tényezők megismerése (T037693) lehetővé teszi a fűtési rendszerekben fellépő korróziós károsodások csökkentését.
- Az égésgátló szereket tartalmazó műanyagok hőbomlásának kutatása (T047377) fontos alapinformációkat szolgáltatott arra, hogy az adott hulladékféleség újrahasznosítása miként valósítható meg környezetre ártalmatlan melléktermékek képződése nélkül.

Az intézet a következő egyéb hazai kutatási pályázatok művelésében vett részt 2004-ben:

- Hosszú élettartamú humán-izületi protézisek kifejlesztése (NKFP 1/013/2001): izületi endoprotézisekben alkalmazott, ultra-nagy molekulatömegű polietilént kezeltek különféle ion- és atomsugarakkal a kopásállóság javítása céljából. Összefüggést találtak a kopásállóság növekedése és a felület kémiai állapotának megváltozása között.
- Az AKI Környezetvédelmi Laboratóriumának akkreditálása (OM-KMA 00221/2004): az akkreditálás után a Laboratórium az eddiginél is hatékonyabban fogja támogatni az intézetben folyó kutatásokat, és képes lesz konkrét környezetvédelmi feladatok ellátására

is. A kialakítandó vizsgálati háttér lehetőséget ad ivóvíz, felszíni és felszín alatti vizek, ipari víz, szennyvizek, szennyvíziszapok, talaj, valamint veszélyes hulladékok komplex fizikai-kémiai minősítésére, az érvényben lévő szabványok és törvényi előírások figyelembevételével.

- Új hordozóanyag helikopterrel végzett biológiai szúnyogirtáshoz (KMFP-00036/ 2002): a kutatási-fejlesztési munka során olyan olcsó, környezetbarát, könnyen gyártható, tárolható és szállítható, hordozóanyagon rögzített készítményt dolgoztak ki, amely alkalmas szúnyoglárvák biológiai irtására. Kifejlesztették és elkészítették a készítmény célba juttatására alkalmas berendezést is. A fejlesztés fontosságát az adja, hogy Magyarországon is terjedőben van néhány gyötrő-szúnyogfaj és nyugat-nílusi láz vírushordozó szúnyogfaj, amelyek sokszor halálos szövődeményekkel járó megbetegedéseket terjesztenek. A pályázat kapcsán megvalósult kutatások, a technológiai fejlesztések és a beruházások lehetővé teszik az e szúnyoglárvák elleni hatékony védekezést.
- Klórbenzolokkal szennyezett talaj és talajvíz tisztítása (KMFP-000318/2004): a Garé és Hidas térségében található, poliklór-benzolokkal szennyezett talajvíz előtisztítására egy 2 m³/h névleges kapacitású, modern adatgyűjtő és folyamatszabályozó rendszerrel ellátott, kísérleti üzemet terveztek és építettek meg. Megkezdték az üzem műszaki-gazdasági optimalizálását.
- Veszélyes hulladékok plazmatechnológias ártalmatlanításának hazai megalapozása (KMFP-000547/2004): tisztázták több veszélyes hulladék termikus plazmában történő átalakításának célszerű körülményeit. Az eredmények megfelelő kiindulási alapot jelentenek a plazmatechnológián alapuló hulladékhasznosító eljárások hazai bevezetéséhez. Ennek érdekében együttműködnek két, az eredmények ipari megvalósításában érdekelt hazai céggel.

Nemzetközi pályázatok

Az intézet kutatói az alábbi EU pályázatok kidolgozásában vettek részt 2004-ben:

- Új, felületmódosított protézisek (G5ST-CT-2002-50247): száraz levegőben végzett plazma-immersziós ionimplantációval jelentősen megjavították titán- és alumínium-tartalmú titánötvözetek keménységét és kopásállóságát. Nemzetközi együttműködésben megkezdődtek a kapott eredmények gyakorlati alkalmazásával kapcsolatos vizsgálatok is.
- Halogéntartalmú anyagok integrált termikus és kémiai kezelése (GRD1-CT-2002-03014): módszert dolgoztak ki a műanyag-hulladékok pirolízisekor kapott olajok finomítására használt katalizátorok gyors és egyszerű tesztelésére. A módszerrel nyomon követték, hogy a projektben, a Karlsruhei Kutatóközpontban üzemelő kísérleti reaktorban, elektromos és elektronikai hulladékok hőbontása során kinyert olaj halogén-mentesítésére szolgáló zeolit katalizátorok aktivitása felhasználás közben miként változik. Módszert javasoltak a katalizátorok regenerálására. A teljes eljárás gazdaságosságát az EU projektben hamarosan üzembe helyezendő, ipari reaktor hosszabb idejű, folyamatos működése alapján lehet majd megítélni.

- Újszerű ívplazmás eljárás veszélyes hulladékok lebontására (GRD1-CT-2000-25035): széleskörű nemzetközi együttműködésben technológiát dolgoztak ki fémtartalmú szilárd ipari és energetikai hulladékok, valamint veszélyes szerves anyagok termikus plazmában végrehajtott együttes hőbontására, és értékes építőipari anyagokká történő átalakítására. Elkészítették a technológia részletes műszaki-gazdasági értékelését, és összeállították az ipari bevezetést célzó megvalósíthatósági tanulmányt.

Egyéb nemzetközi pályázatok:

- A Cagliari Egyetemmel folytatott, magyar-olasz TÉT együttműködés keretében az intézet kutatói megterveztek és legyártattak, és Olaszországban üzembe helyeztek egy tengervíz sótalanítására szolgáló, napenergiás modult. Megkezdték a rendszer üzemi körülmények közötti bevizsgálását és optimalizálását.
- Osztrák-Magyar TÉT pályázatot nyertek el két éves időszakra, szupramolekuláris polimerek kutatásában való együttműködéshez. A tárgyévben kapott eredmények lehetőséget biztosítanak új szerkezetű, telekelikus polimereken alapuló, szupramolekuláris rendezésre képes polimerek előállítására.
- A DuPont amerikai céghez benyújtott kutatási pályázatukkal „DuPont Research Award” címen nyertek támogatást új típusú, funkciós, hiperelágazós polimerekkel kapcsolatos kutatásaikhoz.

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

1. Erdődi G, Iván B: Novel amphiphilic conetworks composed of telechelic poly(ethylene oxide) and three-arm star polyisobutylene, Chemistry of Materials, 16, 959-962 (2004)
2. Fekete E, Moczó J, Pukánszky B: Determination of the surface characteristics of particulate fillers by linear IGC; a critical approach, Journal of Colloid and Interface Science, 269, 143-152 (2004)
3. Forgács E, Cserhádi T, Miksik I, Echardt A, Deyl Z: Simultaneous effect of organic modifier and physicochemical parameters of barbiturates on their retention on a narrow-bore PGC Column, Journal of Chromatography B, 800, 259-262 (2004)
4. Horányi Gy: Investigation of the specific adsorption of HSO_4^- (SO_4^{2-}) and Cl^- ions on Co and Fe by radiotracer technique in the course of corrosion of the metals in perchlorate media, Corrosion Science, 46, 1741-1790 (2004)
5. Ladó C, Then M, Varga I, Szőke É, Szentmihályi K: Antioxidant property of volatile oils determined by the ferric reducing ability, Zeitschrift für Naturforschung, 59c, 354-358 (2004)
6. Mészáros E, Várhegyi G, Jakab E, Marosvölgyi B: Thermogravimetric and reaction kinetic analysis of biomass samples from an energy plantation, Energy and Fuels, 18, 497-507 (2004)
7. Mészáros G, Szenes I, Lengyel B: Measurement of charge transfer noise, Electrochemistry Communications, 6, 1185-1191 (2004)

8. Szabó P, Epacher E, Földes E, Pukánszky B: Miscibility, structure and properties of PP/PIB blends, *Materials Science and Engineering, A* 383, 307-315 (2004)
9. Szépvolgyi J, Mohai I, Gubicza J, Sáray I: RF thermal plasma synthesis of ferrite nanopowders from metallurgical wastes, *Key Engineering Materials*, 264-268, 2359-2362 (2004)
10. Tóth A, Mohai M, Ujvári T, Bell T, Dong H, Bertóti I: Surface chemical and nanomechanical aspects of air PIII-treated Ti and Ti-alloy, *Surface and Coatings Technology*, 186, 248-254 (2004)

VI. A kutatóhely 2004. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

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

Átlagléttség ¹ : 73	Ebből kutató ² : 47	
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma: 20		
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma: 102		
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ³ : 102		
Ebből idegen nyelvű külföldi folyóiratban: 68	idegen nyelvű hazai folyóiratban: -	
nemzetközi együttműködés keretében: 27	SCI által regisztrált folyóiratban: 65	
összesített impakt faktor: 66,129	összes hivatkozás száma ⁴ : 936	
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül: 774		
Megjelent könyv: 1	könyvfejezet: 18	jegyzet: -
ebből magyar nyelven könyv: 1	könyvfejezet: 1	jegyzet: -
Megvédett PhD értekezés: 4	Megvédett MTA doktori értekezés ⁵ : -	
Bejelentett találmányok száma: -	Megadott szabadalmak száma: -	
ebből külföldön: -	ebből külföldön: -	
Értékesített szabadalmak száma: -		
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma: 38	poszterek száma ⁶ : 46	
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ⁷ : 19,5		
Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 5	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság: 8	
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege:	361,673	MFt
Beruházási támogatás: -	MFt	Fiatal kutatói álláshelyek száma ⁸ : 7
Az év folyamán művelt OTKA témák száma: 17		
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	19,236 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma: 12		
NKFP: 3	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	26,788 MFt
Egyéb: 9	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	66,170 MFt
Az év folyamán művelt NFT témák száma ⁹ : -		
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: -		MFt
Külföldi vagy nemzetközi forrásból művelt témák száma ¹⁰ : 4		
EU forrásból: 3	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	35,342 MFt
Egyéb: 1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	2,163 MFt
Egyéb pályázatok keretében művelt témák száma ¹¹ :		
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány ¹² :		28,799 MFt

I. A Kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

Az Intézet 2004. évi feladatait két alapvető kutatási irányba csoportosította:

- heterogén katalitikus folyamatok és katalizátoraik vizsgálata;
- nukleáris kémiai kutatások, különös tekintettel gyakorlatban is alkalmazható módszerek fejlesztésére és alkalmazására.

A heterogén katalitikus és kapcsolódó anyagkutatások terén fő feladatok voltak: a nagyaktivitású, nanoszerkezetű arany/fémoxid tartalmú, a kétfémes és grafit nanoszál katalizátor rendszerek fejlesztése és működésük felderítése, környezetvédelmi szempontból fontos katalitikus reakciók mechanizmusának vizsgálata. Az anyagszerkezeti kutatások terén a felületi és vékonyrétegek, rétegyületek és porózus anyagok szerkezete, nehézionos sugárzással előidézett szerkezetváltozások képezték a súlyponti feladatokat.

A nukleáris kémiai kutatások fő céljai a Handbook of Prompt Gamma Activation Analysis (PGAA) c. monográfia elkészítésének befejezése, a módszer további fejlesztése és az in-beam Mössbauer spektroszkópia kiépítése voltak.

A sugárhatáskémiai kutatások fő feladata a polimerizációkinetika terén az iniciálás mechanizmusa és az iniciáló gyök szerkezete közötti összefüggések tanulmányozása és funkcionális polimer monolitok előállítása volt. Másik fő irány volt az ipari szennyvizekben levő kemikáliák sugárzásos lebontása.

A kutatási tevékenység mellett az Intézet végezte „háttértevékenység” –ét az Országos Atomenergia Hivatal (OAH) számára. E téren a sugárzó anyagok új nyilvántartási rendszerének bevezetése volt különösen jelentős feladat. A nukleáris ellenőrzési módszerek fejlesztése terén a paksi sérült fűtőelemek hasadóanyag tartalma meghatározási módszerének kidolgozása volt az egyik fő feladat.

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

Heterogén katalitikus folyamatok és katalizátorok kutatása (tisztá és célzott alapkutatás^{})*

Katalizátorkutatás, különös tekintettel a nano-szerkezetekre:

UPS, XPS, TEM és SIMS-ToF MS vizsgálatok eredményei bizonyították, hogy a vas-oxid vékonyréteg CO oxidációban mutatott katalitikus aktivitásának növekedése a felület *alatt* elhelyezkedő arany fém réteg ill. Au nanorészecskék hatására következik be, és nem az Au felületre történő migrációjának következménye. Elektron kölcsönhatásra utal a

^{*} A KF tevékenység minősítése a 2004. évi CXXXIV törvény 4 §-a alapján

nanorészecskék nagyobb promoteáló hatása. Hasonló hatás tapasztalható titán-dioxid esetében is.

0.6 Ti/Au arányú szilícium–oxid hordozós Au/Ti-oxid-hidroxid nanokompozitot állítottak elő, amelynek aktivitása eléri az azonos szemcseméretű Au/TiO₂ katalitikus aktivitását ugyanebben a reakcióban. Kimutatták a CeO₂ hordozós AuPd nanorészecskékben, továbbá a két fém közötti gyenge szinergikus hatást. Előnyösen befolyásolták gamma radiolízis útján készített, polimerrel stabilizált ezüst szőlők katalitikus tulajdonságait arany leválasztása útján. Számos kísérlet történt inverz micellás kétfémes nanorészecskék készítésére és CO oxidációban mutatott aktivitásának vizsgálatára.

Hordozós Pt és Rh katalizátorok felületmódosítása során megállapították, hogy kisebb mennyiségű inaktív adalékok (Ge, Sn) meghatározott típusú aktív helyeket foglalnak el, nagyobb mennyiségben elegyfázist képeznek. Ugyancsak elegyfázis képződését állapították meg Pt-Pd és Pt-Rh mintáknál is.

Néhány nm átmérőjű Rh és Pt-szemcsés, grafit nanoszál hordozós, nagy stabilitású, oxidálással regenerálható katalizátorokat vizsgáltak, és megállapították, hogy azok szelektivitása – a grafit nanoszálak hidrogéntároló képességének köszönhetően – előnyös a hexán vázátrendeződés szempontjából.

Módszert dolgoztak ki hordozós ezüst katalizátorok ezüst felületének szelektív meghatározására N₂O kemisorpcióval.

Fizikai módszerekkel (XRD, XPS, HRTM) bizonyították Pt és PtS egyidejű jelenlétét szulfidált állapotban hordozós platina katalizátoron, amely nem volt aktív a benzol, de aktívnak mutatkozott a ciklohexán hidrogénezésben, összhangban azzal az eredménnyel, amely szerint a redukált formában felületükön zérus vegyértékállapotú fémet tartalmazó MoO_x bázisú katalizátorok, valamint a hordozós monometallikus Co, Ni, Pd és Pt szulfidált állapotban is jól hidrogénezik a ciklohexánt, de egyáltalán nem katalizálják a benzol/ciklohexán hidro-dehidrogénezést, ami e két folyamat eltérő mechanizmusára utal.

Ráfordítás: 18 fő [10 fő intézeti], 90 Mft állami KV és 5,5 Mft pályázati forrás.

Reakciómechanizmus vizsgálatok:

CO preferenciális oxidációja H₂ jelenlétében (PROX-reakció, amely mind környezetvédelmi, mind alapanyag-átalakítási szempontból nagy perspektívájú folyamat): Különböző arányú cirkónium- és cérium-oxidot tartalmazó hordozós Pt katalizátoron négy lehetséges mechanizmust mutattak ki, ezek közül a fém-fémoxid határfelületen a CO-oxidáció nagy szelektivitással Langmuir-Hinshelwood mechanizmus szerint fut le.

Megállapították, hogy a H-ZSM-5 hordozós MoGa katalizátoron adszorbeált metán N₂O jelenlétében CO₂-vé, etánná és etilénné alakul. A reakcióban már szobahőmérsékleten N₂O hatására Mo⁶⁺ és Mo⁴⁺ centrumok keletkeznek. Azonosították a Ga által generált oxidációs centrumokat.

Ráfordítás: 5 fő [4 fő intézeti], 15 Mft állami KV, 2Mft pályázati forrás.

Tömbi szerkezetvizsgálatok:

Nehéz ionokkal (⁸⁴Kr, ²⁰³Bi) végzett besugárzás során Ti és Hf-foszfát szerkezetének változatlan állapotban maradását, és vezetőképességük változatlanságát állapították meg. In situ Mössbauer spektroszkópiás és XRD vizsgálatokkal nyomon követték az Fe-MFI templát impregnálásos szintézisének részlépéseit. Megállapították, hogy a lokális kristályosodás a

szintézis első szakaszában megindul, a röntgen diffrakcióval kimutatható kristályos fázis kialakulása azonban hosszabb időt igényelt.

Összességében: az e témakörökben előirányzott feladatok nagy része teljesült.

Ráfordítás: 4 fő [2 fő intézeti] 3 Mft állami KV

Nukleáris kémiai kutatások (tisztá és célzott alapkutatás és kísérleti fejlesztés)

Kimutatták a radiatív erősségfüggvény nagymértékű növekedését az alacsony energiájú kvázi-kontinuumban lejátszódó γ -átmenetek során.

Új PGAA alkalmazások:

A módszer alkalmazhatóságát kiterjesztették további, nukleáris anyagtudományi, geológiai és régészeti (archeometriai) feladatok megoldására. A PGAA mérés technikát – részben EU FP6 támogatással – fejlesztették: újabb eljárásokat (pld. nyalábszaggató mérések) standardizáltak, az időben változó gamma-intenzitások mérés technikáját tökéletesítették. A módszer további fejlesztésének alapját képezi a *Handbook of Prompt Gamma Activation Analysis with Neutron Beams* c. monográfia véglegesítése és megjelentetése. A módszer kidolgozásában, fejlesztésében és sokirányú alkalmazási eljárások kifejlesztésében az Intézet munkatársai néhai Molnár Gábor akadémiai doktor (elh. 2004) vezetésével kiemelkedő, világszerte elismert szerepet játszottak.

Nukleáris PGAA alkalmazások:

Meghatározták a transzmutációs berendezések fő szerkezeti anyaga, a $^{204, 206, \text{NAT}}\text{Pb}$ neutronbefogási hatáskeresztmetszetét, módszert dolgoztak ki neutron befogásos γ - γ koincidencia mérésére, ^{209}Bi hatáskeresztmetszet meghatározására, megállapították, illetve pontosították több neutronbefogási, illetve n, γ reakcióval kiváltott gamma átmenet energiáját.

Az eredmények többirányú gyakorlati hasznosítása lehetséges: a nukleáris hulladékok átalakításos feldolgozása, különböző további módszerek kifejlesztése útján. A kutatások részben EU FP6 és EU3RC- támogatással, részben az OAH-val kötött KF szerződés keretében, továbbá kiterjedt nemzetközi együttműködés keretében folynak [belga (Geel), francia (Cadache, Saclay, Grenoble) intézetekkel].

Ráfordítás: 3 hazai kutató, 2 hazai PhDs, 4 külföldi kutató és 1 külföldi PhD-s. Állami KV: 16 Mft, pályázati forrás 8 Mft

Analitikai alkalmazások:

Kompozit kerámiák, szén nanocsövek és TL doziméterek szennyezettségét, halogénlámpákban alkalmazott fémhalogenidek összetételét, tórium tartalmát határozták meg. (Együttműködés: MTA MFA, IKI, General Electric Bp.)

Geológiai alkalmazások:

A Bodai Aleurolit formációból származó fűrómag-mintákban (kiégett fűtőelemek végleges elhelyezésével kapcsolatos vizsgálatokhoz), a Balaton-felvidék vulkanitjaiban és a Persány hegység felsőkéreg xenolitjaiban meghatározták az elemi összetételt.

Archeometriai alkalmazások:

Különböző földrészekben az ókorban ill. a középkorban művi úton készített anyagok (pld. venezuelai kerámiák, középkori és barokk üvegek) összetételét határozták meg, továbbá anyagösszetétel alapján i.e.első és második évezredi vastechnológiai és I-V. sz. vaskohászati eljárásokat azonosítottak széleskörű hazai (MNM) és nemzetközi (Tübingeni E. Bolivar E., Nukl. Kém. és Techn. Int. Krakko) együttműködés keretében, részben EU FP 6 keretében.

Az előirányzott kutatási-fejlesztési feladatok messzemenően teljesültek. Az *in beam* Mössbauer mérőberendezés üzembehelyezése a beszerzések elhúzódása miatt még nem történt meg.

Ráfordítás: 5 kutató [3 hazai], 1 hazai PhDs, 2 külföldi kutató, ill. állami KV-ből 11 Mft, pályázati forrásból 18 Mft.

Sugárbiztonsági kutatások (célzott alapkutatás és kísérleti fejlesztés)

Ellenőrző módszerek fejlesztése:

Roncsolásmentes módszert dolgoztak ki uránminták korának (azaz a dúsítás, ill. reprocessálás óta eltelt időszak) a gamma spektrum – a $^{214}\text{B}/^{234}\text{U}$ aktivitás arányán alapuló – meghatározására. PGAA eljárást dolgoztak ki ólomkonténerben elhelyezett, sugárforrással maszkírozott urán kimutatására. Ezek az eredmények a nukleáris anyagok illegális forgalmának felderítésére alkalmazhatók. A PuBe tartalmú források hasadóanyag tartalmának meghatározására az Intézet által kidolgozott módszert kiterjesztették más, transzurán tartalmú neutron-forrásokra. Ez hozzájárul a nyilvántartási és ellenőrzési kötelezettségek pontosabb teljesítéséhez.

Ráfordítás: 5 intézeti kutató, 25 Mft állami KV, 30 Mft pályázati forrás

Sugárdozimetria:

Új eljárást dolgoztak ki nagyenergiájú ipari gyorsítók elektronenergiájának mérésére. A „Sunna” dozimétert optikai abszorpció, ill. optikailag gerjesztett lumineszcencia mérésére alkalmassá tették, ami lehetővé teszi alkalmazását dózisellenőrző rutin módszerként nagy aktivitású γ - és nagy energiájú elektron-besugárzó berendezésekben. Különböző sugár-iniciált jelenségek (optikai és termolumineszcencia, vezetőképesség, optikai abszorpció) paraméter változásai és a dózis nagysága közötti korrelációt határozták meg, ezzel ezeket, a dózis mérésére elvben alkalmazható anyagokat rutinmérésekre alkalmassá tették. Így tovább növelték a különböző feladatokra alkalmas dózismérők választékát.

Ráfordítás: 3 intézeti kutató, 35 Mft állami KV, 4 Mft pályázati forrás.

Részvétel a PA RT-ben 2003-ban bekövetkezett üzemzavar következményeinek felszámolására irányuló előkészületekben:

Kidolgozták a sérült, újratokozott fűtőelem-maradványok hasadóanyag tartalma γ -spekrometriás meghatározási módszerét. Számításos becslést végeztek a tokokban sugárzás által iniciált gázkiválás mértékére. Konzultációkat folytattak a kivált gázok katalitikus hatástalanításának lehetőségéről és véleményezték az orosz partner erre vonatkozó ajánlatát.

Ráfordítás: 3 intézeti kutató, 4 Mft állami KV, 6 Mft szerződéses forrás.

A nagyaktivitású atomerőművi hulladékok végleges elhelyezését célzó kutatások részeként kidolgozták radioizotópok kőzetmintákban történő migrációjának méréséhez alkalmazható

metodikát. Elemző tanulmány készült e hulladékok elhelyezésének környezetvédelmi problémáiról, spallációs átalakítási és hasznosítási lehetőségeiről.

Az előirányzott fő feladatok alapvetően teljesültek.

Sugárhatáskémiai kutatások

A polimerizációkinetika terén:

Az izo-propil gyök reakcióit tanulmányozták maleát, fumarát, akrilsav- ill. metakrilsav észter típusú vegyülettel, impulzus-radiolízis technikával. Megállapították, hogy a gyök addicionálódik a kettős kötésre, vagy elektronátadás útján reagál. A polimerizáció témakörben készült akadémiai doktori értekezést 2004 novemberében, a PhD tézist 2005 januárjában sikerrel védtek meg.

Ráfordítás: 2 intézeti kutató, 16 MFt állami KV, 2 MFt pályázati forrás.

Az ipari szennyvizek sugárzásos ártalmatlanítása:

Tisztázták az Apollofix red színezék híg, vizes oldatban lejátszódó sugárzásos degradációjának mechanizmusát: a hidratált elektron az azo-csoport támadásával megszünteti a kiterjedt konjugációt, ezért jó hatásfokkal színtelenít, míg a hidroxil gyök rossz hatásfokú, mert a telítetlen kötésekkel támadja, a reakcióban keletkező gyökök nagy része visszaalakul kiinduló vegyületté.

Ráfordítás: 2 intézeti kutató, 21 MFt állami KV, 3 MFt pályázati forrás.

Különleges tulajdonságú polimerek sugárzásos előállítására:

Újabb, gyógyszerek adagolására alkalmas géleket szintetizáltak polimerek sugárzásos térhálósításával. Kromatográfiás proteintisztításra és elválasztásra alkalmazható funkcionális polimer monolitokat állítottak elő, és meghatározták az adott elválasztási feladathoz rendelhető optimális előállítási körülményeket. Kísérletileg bizonyították e monolitok alkalmasságát HPLC kolonna töltetként proteinek és nukleinsavak szétválasztására.

Ráfordítás: 2 intézeti kutató, 16 MFt állami KV, 0,8 MFt pályázati forrás.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Az IKI munkatársai által 2004-ben megjelentetett tudományos dolgozatok társszerzőinek 20 %-a más hazai, további 50%-a külföldi intézmény munkatársa.

A katalíziskutatás terén a fő hazai együttműködő partnerek a SzTE több (Kolloidkémiai, Szerves Kémiai, Alkalmazott és Környezetkémiai) tanszéke, az ELTE Magkémiai Tsz., az MTA MFA, RMKI, a KK egyes intézetei. Nemzetközi (kétoldalú) együttműködésben partnerek a CNR (Nanostrukturális Anyagtud. I.), a Svéd TA Kém.Techn. I., a LACCO CNRS Katalízis és Petrolkémiai I. CSIC, és a Fritz Haber I. (Berlin). A nemzetközi együttműködés többek között az Au, AuPd nanoszerkezetű katalizátorok előállítására és jellemzésére, a CO-oxidációra a PROX reakcióra, az előállított katalizátorok közös kémiai és fizikai vizsgálatára irányul, nagy teljesítményű fizikai berendezések (XRD, XPS, EMR stb) igénybevételét teszi lehetővé.

A nukleáris kémiai kutatások terén a hazai együttműködő partnerek: MTA KFKI AEKI, ATOMKI, MFA, Magyar Nemzeti Múzeum, ELTE Közettan-Geokémiai Tsz. A nemzetközi

együttműködés 14 intézményre terjed ki, melyek közül külön említendők a szakterület élvonalában lévő NIST (Washington DC), a Lawrence Berkeley Nat. L., I. Laue Langevin (Grenoble), JINR (Dubna). A vezető nukleáris intézetekkel a módszerhez kapcsolódó célzott alap kutatások és alkalmazott kutatások egy sor egyetemi tanszékkal, a módszer fejlesztésére és új alkalmazási lehetőségek feltárására irányuló fejlesztő kutatás, továbbá tiszta (archeometriai) alap kutatások terén van együttműködés.

A nukleáris kémiai és sugár biztonsági, valamint sugárhatáskémiai kutatás és fejlesztések terén az IKI a Nemzetközi Atomenergia Ügynökség (NAÜ) több projektjében vesz részt, a PGAA kutatások több EU programnak is részét képezik.

Kutatási fejlesztési megállapodások alapján az Intézet nukleáris biztonsági kérdésekben elsősorban az OAH-val működik együtt, továbbá a PA RT-vel és az Agroster besugárzó vállalattal.

A nukleáris biztonsági (rutin) tevékenység keretében az IKI együttműködik az OAH mellett az ÁNTSZ és a Belügyminisztérium illetékes szervezeteivel valamint a sugárzó anyagok szállításában és használatában érdekelt intézményekkel és vállalatokkal. 18 külföldi partnerrel, közöttük nemzetközi szervezetekkel ill, munkacsoporttal folytat együttműködést az Intézet, mint pld. az Internatl. Techn. Group for Combatting Illicit Trafficking of Nuclear Materials.

A sugárhatáskémiai kutatás terén öt hazai felsőoktatási intézménnyel és hét külföldi partnerrel (akadémiaközi ill. TÉT keretben), valamint a NAÜ-vel működik folyamatosan együtt az Intézet. Az együttműködést nagyban segítette, hogy az év folyamán 13 MTA kétoldalú egyezményes és 3 TÉT utazás valósult meg. Példaként említendő a CNR Bologna-i intézetével a sugárzásos polimerizáció terén az együttműködés: A vizsgálatokat részben az intézeti mérőegységgel, részben MTA-CNR, ill. Bolognában, a nagyobb időfelbontású impulzusradiolízis berendezéssel végezték.)

Az Intézet részvételét a felsőoktatásban – főleg a BMGE-n és a Veszprémi Egyetemen – oktatók száma és az intézeti PhD hallgatók száma jellemzi. Előadások tartása mellett említendő a radiokémiai oktatás lehetőségét biztosító tevékenység (előadás és laboratóriumi gyakorlatok vezetése) BME és ELTE hallgatók részére. Kettőn töltenek be nemzetközi szakfolyóiratban (Applied Catalysis A, ill. Radiation Physics and Chemistry) területi ill. szakterületi szerkesztői tisztséget.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok

Az Intézetben folyó nanokatalízis kutatások mind hazai (OTKA), mind nemzetközi (COST) forrásokból részesültek.

Kiemelkedő fontosságúak és eredményesek a beszámoló II. fejezetében ismertetett, nanorészecskéket tartalmazó modell katalizátorok kidolgozására, felületi tulajdonságaik és aktivitásuk vizsgálatára, valamint az arany alapú katalizátorok előállítása és jellemzése két COST és egy OTKA program keretében végzett kutatások. OTKA források is támogatják a nemzetközi együttműködésben folyó PROX- kinetika és a kétfémes katalizátorok szerkezeti, felületi és katalitikus tulajdonságai terén végzett, jelentős eredményeket hozó kutatásokat Az EU6Coordination of Nanostructured Catalytic Oxides Research and Development in EUROPE (CONCORDE) – programjában is részt vesznek.

A PGAA kutatás-fejlesztés széleskörű nemzetközi elismertségét mutatja az IKI-nek az EUFP 6 program NM13 témája keretében játszott szerepe és az összességében nem nagy, de

széleskörű nemzetközi ismertséget és együttműködési lehetőséget biztosító, rendszeresen elnyert több NAÜ pályázat. Több sugárhatáskémiai OTKA-forrás mellett két NAÜ projekt keretében végzett célzott alapkutatások és kísérleti fejlesztés bizonyítja a tevékenység elismert voltát. A proteinek elválasztására és tisztítására használható gélek és pórusos polimerek előállítását és vizsgálatát célzó projekt célkitűzései teljesültek. A sugárzásos szennyvízkezelés keretében a már ismertetett (II.fejezet) eredmények és projekt összejevetelek résztvevőinek – beleértve a NAÜ apparátus illetékeseit – véleménye a kutatás-fejlesztés eredményesen folyik.

Perspektivikus jelentősége miatt kiemelt érdemel a közelmúltban elnyert Funkcionalizált határfelületek fejlesztése és alkalmazása specifikus biokémia és kémiai rendszerekben (NKFP 3A058-04) c. 10 résztvevőből álló konzorcium keretében induló NKTH projekt, (211 MFt), melynek az IKI a koordinátora és melyben az Izotóp Intézet Kft is részt vesz. Ugyancsak kiemelhető, hogy az Intézet részt vesz a FUNMIG EU-6 Integrated Project-ben, amely a radioizotópok migrációjának alapfolyamatait vizsgálja (ami a nagyaktivitású atomerőművi hulladékok végleges elhelyezése szempontjából fontos, 51 részt vevő, 8 M€). A projekt keretében az IKI munkatársai anionos specieszek képzésére hajlamos radioizotópok migrációját vizsgálják.

Összességében: az intézeti kutatások pályázati támogatottságában a hazai elismerés elmarad a külföldihez képest. A kutatások hazai támogatása főleg az OTKA és az OAH részéről történik, a többi hazai pályázati forrás részéről a hazai megítélés messze elmarad a nemzetközitől. Ez talán az IKI sajátos működési profiljának, esetleg sajátos szervezeti helyzetének következménye.

V. Az év folyamán megjelent jelentősebb publikációk

1. Guczi L, Pető G, Beck A, Pásztai Z: Modeling transition metal nanoparticles: The role of size reduction in electronic structure and catalysis, *Topics in Catalysis*, 29, 129-138 (2004)
2. Baker RT, Rodriguez N, Mastalir A, Wild U, Schlogl R, Wootsch A, Paál Z: Platinum/graphite nanofiber catalysts of various structure: Characterization and catalytic properties, *J. Phys. Chem. B.*, 108, 14348-14355 (2004)
3. Voinov A, Algin E, Agvaanluvsan U, Belgya T, Chankova R, Guttormsen M, Mitchell GE, Rekstad J, Schiller A, Siem S: Large, Enhancement of Radiative Strength for Soft Transitions in the Quasicontinuum, *Phys. Review Letters*, 93, 142504 (2004)
4. Bagi J, Nguyen TC, Lakosi L: Assessment of the Pu content of Bu-Be neutron sources, *Nucl. Instruments and Methods in Physics Research B*, 222, 242-248 (2004)

VI. A kutatóhely 2004. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: Kémiai Kutatóközpont, Izotópkutató Intézet

Átlagléttség ¹ : 88	Ebből kutató ² : 39	
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma: 14		
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma: 55		
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ³ : 51		
Ebből idegen nyelvű külföldi folyóiratban: 34	idegen nyelvű hazai folyóiratban: 3	
nemzetközi együttműködés keretében: 23	SCI által regisztrált folyóiratban: 38	
összesített impakt faktor: 31,6	összes hivatkozás száma ⁴ : 553	
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül: 456		
Megjelent könyv: 1	könyvfejezet: 15	jegyzet: 1
ebből magyar nyelven könyv: 1	könyvfejezet: 15	jegyzet: 1
Megvédett PhD értekezés: 2	Megvédett MTA doktori értekezés ⁵ : 1	
Bejelentett találmányok száma:	Megadott szabadalmak száma:	
<i>ebből</i> külföldön: 0	<i>ebből</i> külföldön: 0	
Értékesített szabadalmak száma: 0		
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szöbéli előadások száma: 47	poszterek száma ⁶ : 35	
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ⁷ : 6		
Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 5	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság: 7	
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege: 372,479 MFt		
Beruházási támogatás: 7,913 MFt	Fiatal kutatói álláshelyek száma ⁸ : 1	
Az év folyamán művelt OTKA témák száma: 8		
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: 9,870 MFt	
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma: 13		
NKFP: 1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: 9,550 MFt	
Egyéb: 12	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: 24,784 MFt	
Az év folyamán művelt NFT témák száma ⁹ :		
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: 0 MFt		
Külföldi vagy nemzetközi forrásból művelt témák száma ¹⁰ : 10		
EU forrásból: 3	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: 7,428 MFt	
Egyéb: 7	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: 3,365 MFt	
Egyéb pályázatok keretében művelt témák száma ¹¹ : 5 (TÉT)		
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: 1,541 MFt	
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány ¹² :		0 MFt

