

KRÓNKA

MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
KÉMIAI KUTATÓKÖZPONT

30. évfolyam
2005 június

HÍREK.....	3
Általános hírek	3
Szervezeti változások	4
Kitüntetések, díjak, elismerések.....	5
ÚJ NAGYMŰSZEREK A KÉMIAI KUTATÓKÖZPONTBAN	7
Molekulaspektroszkópiai osztály – Lézerspektroszkópiai laboratórium (3.12.).....	7
Bioorganikus kémiai osztály – Molekulárfarmakológiai csoport (1.41.).....	7
Röntgendiffrakciós osztály – Kristálydiffrakciós laboratórium (3.31.).....	7
Felületmódosítás és nanoszerkezetek osztály (2.2.).....	8
Neurokémiai osztály – Molekuláris mechanizmusok csoport (1.51.).....	8
RENDEZVÉNYEK, ELŐADÁSOK	10
Szemináriumok.....	10
Rendezvények a Kutatóközpontban	12
Egyéb rendezvények	18
Előadások	19
TUDOMÁNYOS ÉRTEKEZÉSEK VITÁI.....	20
PhD – értekezések	20
MTA – doktori értekezés.....	20
KÜLFÖLDI ELŐADÓK.....	21
ÉRTEKEZLETEK	24
Az MTA KK Igazgatótanácsának ülései.....	24
A Tudományos Osztályvezetői Tanács ülései.....	24
Kémiai Kutatóközpont Kémiai Intézetének tudományos vezetői értekezletei:	24
Kémiai Kutatóközpont Biomolekuláris Kémiai Intézetének tudományos vezetői értekezletei:	25
Kémiai Kutatóközpont Felületkémiai és Katalízis Intézetének tudományos vezetői értekezletei:	25
Kémiai Kutatóközpont Szerkezeti Kémiai Intézetének tudományos vezetői értekezletei:..	25
Kutatói fórumok	26
PUBLIKÁCIÓS ADATOK 2004.....	27
A 2002-2004. évi publikációs pontok szervezeti egységenként	27
A 2003-ban 8, illetve ennél több független idézetet kapott cikkek.....	28
2004. ÉVI NYERTES PÁLYÁZATOK	30
Kutatási pályázatok	30
Műszerbeszerzést támogató pályázatok	32
ÚJ KÖNYVEK.....	34
SAJTÓSZEMLE	38

HÍREK**Általános hírek**

- Az oktatási miniszter előterjesztésére a Miniszterelnök *Pálincás Gábort* **2004. január 1. és 2006. december 31.** közötti időszakra a **Magyar Akkreditációs Bizottság** tagjának nevezte ki.
- **2004. január 6-án** elhunyt *Molnár Gábor*, az Izotóp és Felületkémiai Intézet osztályvezetője.
- Az Intézet **2004. február 23-án** megtartott **Kutatói Fóruma** a következő kutatókat delegálta az **MTA Kutatói Fórumába**: *Vinkler Péter, Hajós György, Keresztury Gábor, Kardos Julianna, Bencsura Ákos, Czugler Mátyás, Simonyi Miklós, Lendvay György, Jakus Judit, Lukovits István, Vereczkey László.*
- *Kálmán Erika* a **Felsőoktatási és Tudományos Tanács** megbízása alapján **2004. március 1-től 2007. február 28-ig** a **FTT Képzési és Kutatási Stratégiai Szakbizottságának** munkájában, mint a bizottság tagja vesz részt.
- **2004. július 1-én** zajlott az új **Kutatóközponti Közalkalmazotti Tanács** tagjainak megválasztása, amely azonban az alacsony részvételi arány miatt érvénytelen volt.
- **2004. március 30-31-én** *Prof. E. D. Jemmis* (INSA, Dean of School of Chemistry, University of Hyderabad, India) látogatást tett a Kutatóközpontban.
- **2004. május 13-án** A **ZeoRapŽ** nevű, szabadalmaztatott szennyvíztisztítási módszerről tartottak sajtótájékoztatót. A módszert a NATO SFP 972494. számú projektjének keretében fejlesztették ki. A kutatások irányításában Kalló Dénes is részt vett. A eljárás speciálisan előkezelt, modifikált zeolit alkalmazásán alapszik, melyet a tisztítandó szennyvízbe adagolnak, ezáltal javul a kezelt szennyvíz minősége, és növekszik a telep tisztítási kapacitása.
- **2005. január 17-én** *Kálmán Erika*, a Bay Zoltán Alapítvány, Anyagtudományi és Technológiai Intézetének igazgatója képviselte Magyarországot a **COST Working Group on Nanosciences** munkaértekezletén.
- **2005. január 28-án** az MTA dísztermében *Avram Hersko*, a 2004. évi kémiai Nobel-díj kitüntetettje (Israel Institute of Technology, Haifa, Izrael) "The ubiquitin sysem for protein degradation and some of its roles in the control of cell division" címmel tartott előadást.
- **2005. március 22-én** a *Chemical Singers*, a Kutatóközpont tehetséges fiatal énekeseiből, zenészeiből álló együttes, **Tavaszi zeneszó** címmel adott sikeres koncertet.
- **2005. május 31-én** tragikus körülmények között elhunyt *Holly Sándor* a Szerkezeti Kémiai Intézet, Molekulaspektroszkópiai csoportjának vezetője.

Szervezeti változások

- Az AKT **2003. december 17-i** ülésén javaslatokat tett a Kutatóközpont főigazgatói és igazgatói állásainak betöltésére 2004. január 1-től a következők szerint:
 - Pálinkás Gábor, Kémiai Kutatóközpont, főigazgató, 5 év
 - Pálinkás Gábor, KK Kémiai Intézet, igazgató, 2 év
 - Wojnárovits László, KK Izotóp- és Felületkémiai Intézet, igazgató, 5 év
 - Szépvölgyi János, KK Anyag és Környezetkémiai Laboratórium, igazgató, 5 év
- Az AKT **2004. március 8-i** ülésén elfogadta a *Kutatóközpont Szervezeti és Működési Szabályzatát*. Eszerint a szervezeti felépítés az alábbiak szerint alakul: A Kutatóközpont öt tudományos intézetből, valamint közös infrastrukturális szervezeti egységekből áll.
Tudományos intézetek:
 - Biomolekuláris Kémiai Intézet
 - Felületkémiai és Katalízis Intézet
 - Anyag- és Környezetkémiai Intézet
 - Izotópkutató Intézet
 - Szerkezeti Kémiai IntézetInfrastrukturális egységek:
 - Gazdasági Igazgatóság
 - Pénzügyi és számviteli osztály
 - Beruházási és ellátási osztály
 - Kutatóközponti Tudományos Titkárság
 - Kutatóközponti Könyvtár
 - Kommunikációs és Pályázati Iroda
 - Belső ellenőrzés
 - Humánpolitika
- Az MTA **2005. májusi** közgyűlése úgy határozott, hogy az **Izotópkutató Intézet 2005. december 31-ével** kiválik a Kutatóközpontból és önálló kutatóintézetként működik tovább.
- **2005. januárjában** alakult meg a **Koordinációs és Kommunikációs Iroda**, aminek feladatai közé tartozik a pályázati kiírások figyelése, a pályázatokkal kapcsolatos mindenféle információszerzés, a pályázatírással kapcsolatos összes adminisztrációs feladat intézése a pályázatírástól a szerződéskötésig, valamint a pályázati tevékenységek utánkövetése. Az Iroda látja el továbbá az összes olyan adatszolgáltatási feladatot, mely a pályázatokkal kapcsolatos. Ebbe beletartozik a minisztériumoknak, az MTA-nak és egyéb szervezeteknek szóló adatszolgáltatás, valamint a Kutatóközpont szervezeti egységeinek és igazgatóságának informálása a pályázatok aktuális állapotáról és jellemző adatairól. Az Iroda vezetője: Dobó András, munkatársai: Uhrin Emma és Bottka Sándor Mátyás.
- A GVOP-2004-3.2.2. (*A felsőoktatás és a vállalatok közötti kooperatív kutatást és technológia transzfert segítő partnerkapcsolatok és hálózatok kiépítésének támogatása (Kooperációs Kutató Központok, KKK)*) pályázat nyerteseként a Kutatóközpont koordinálásával **Kémia az életminőség javításáért** címmel létrejött egy **Kooperációs Kutatói Központ (KKK)** amelyen keresztül a Kutatóközpont és az ipari innovációs szféra között szoros, interdiszciplináris K+F és stratégiai együttműködés valósulhat meg. A KKK célja, hogy az életminőség javítását szolgáló kémiai kutatások kompetencia-centrumává váljon. A KKK feladatai közé tartozik a partnervállalatok korszerű műszeres

infrastruktúrát igénylő, kémiai kutatási háttérbázisának létrehozása, valamint a hasznosítható, multidiszciplináris tudományos kutatásokra, illetve kísérleti fejlesztésre alapozott, komplex gyakorlati problémák megoldását célzó eredmények technológia-transzferének meggyorsítása.

A projektnek két jelentős célcsoportja van. Az első csoport a konzorciumban résztvevő vállalatok és rajtuk keresztül a gazdaságban szereplő egyéb cégek. A már meglévő cégekkel a szakmai kapcsolatokat kölcsönös és folyamatos kapcsolatépítéssel fejlesztjük tovább. Ez magában foglalja az adott szakmai területen együttműködő kutatók intenzív kapcsolattartását, valamint a KKK igazgatójának vezetésével végzett piackutatást és újabb együttműködési területek feltárását. A másik jelentős célcsoport az oktatáson keresztül a fiatal kutatók és diákok. A kutatóintézet és a vállalatok együttműködéséből többszörös szinergiahatás származik. A vállalatok magas színvonalú kutatási eredményekhez juthatnak hozzá, a diákok pedig az iparban meglévő aktuális problémákkal, technológiai kérdésekkel és megoldásokkal ismerkednek meg.

Kitüntetések, díjak, elismerések

- **2004-ben Akadémiai Ifjúsági díjat nyertek:**
Megyes Tünde: Elektronszolvatáció mechanizmusának vizsgálata és értelmezése
Simon Ágnes: Immunrendszeri és idegrendszeri receptorok jellemzése molekulamechanikai és bioinformatikai módszerekkel
- **2005-ben Akadémiai Ifjúsági díjat nyertek:**
Pásztai Zoltán: Határfelületek in situ molekuláris szintű jellemzése korszerű spektroszkópiás módszerekkel: az összfrekvencia-keltési spektroszkópia néhány alkalmazása és Magyarország meghonosítása
Tompos András: Kombinatorikus megközelítések a heterogén katalízisben
Nagy Nóra Veronika: Mikroeloszlás és koordinációs módok meghatározása bioligandum-réz(II) egyensúlyi rendszerekben kétdimenziós ESR-spektroszkópiai módszerrel
- **2003-ban** a Magyar Tudományos Akadémia főtitkára kiváló gazdasági munkájának elismeréseképpen **Főtitkári Dicséretben** részesítette *Benussi Silvio Antoniot*.
- **2004-ben Széchényi-díjat** kapott *Pálinkás Gábor*, a folyadékok szerkezetének kísérleti és elméleti módszerekkel történő meghatározásában elért kimagasló eredményeiért és a nemzetközileg is elismert hazai tudományos iskola létrehozásáért.
- A **Magyar Kémikusok Egyesülete Intéző Bizottsága Héberger Károly** részére az ACE&CC Konferencia szervezésében kifejtett munkájáért **nívódíjat** adományozott.
- A **2003. évi Novicardin-díjat Ötvös László** kapta. Előadásának címe a „Nukleinsav támadáspontú daganatellenes szerek” volt.
- A Köztársasági Elnök a **Magyar Köztársasági Érdemrend Középkeresztjét** adományozta *Beck Mihálynak* a kémiai kutatások területén végzett nemzetközi elismertségű, iskolateremtő tudományos és oktatói tevékenységéért, tudományszervező, tudománytörténeti, tudományfilozófiai és tudományetikai munkásságáért, valamint a

határon túli magyar tudományosság hazai tudományos életbe történő bekapcsolása területén szerzett elévülhetetlen érdemeiért.

- *Schlosser Gitta* **L’Oreal-UNESCO magyar ösztöndíj: A Nőkért és a Tudományért** ösztöndíjat nyert.
- **2005-ben** *Kálmán Erika* kiemelkedő tudományos munkásságáért, kutatói és feltalálói tevékenységéért elnyerte a **Magyar Szabadalmi Hivatal Jedlik Ányos–díját**.
- **2004. november 10-én** *Valyon Józsefet* a Szegedi Tudományegyetem Habilitációs Bizottsága az egyetem habilitált tagjává fogadta a kémia tudomány szakterületen.

ÚJ NAGYMŰSZEREK A KÉMIAI KUTATÓKÖZPONTBAN

Molekulaspektroszkópai osztály – Lézerspektroszkópai laboratórium (3.12.)

Gyors fluoreszcenciás detektor

A Hamamatsu gyártmányú fluoreszcenciás detektor az OTKA műszerpályázat keretében került beszerzésre. Különlegessége, hogy kb. 10 μm átmérőjű csatornában sokszorozódnak a fény hatására keletkező elektronok, így a gyors fényimpulzusok által keltett elektromos jel lényegesen kisebb mértékben szélesedik ki, mint a hagyományos fotoelektron-sokszorozókban, miáltal pikoszekundum időtartományú mérésekre is alkalmassá válik.

A 220-900 nm hullámhossz-tartományú fényre érzékeny fotokatód hasznos felületének átmérője 10 mm.

A jel/zaj arány javítása érdekében a detektor $-30\text{ }^\circ\text{C}$ -ig hűthető. Működését egy 0 – 5 kV feszültség kiadására képes tápegység biztosítja, jelét pedig egy gyors (1,5 GHz) erősítő teszi adatfeldolgozásra alkalmassá.

A detektor részét képezi egy házilag épített, fluoreszcencia intenzitás időbeni változásának követésére alkalmas berendezésnek.

Bioorganikus kémiai osztály – Molekulárfarmakológiai csoport (1.41.)

Kapilláris elektroforetikus berendezés (CE)

Intézetünkben 2003 óta működik az OM műszerpályázati támogatással beszerzett *Agilent* kapilláris elektroforetikus berendezés, diódasoros UV-VIS detektálási lehetőséggel.

A kapilláris elektroforézis (CE) egy olyan, napjainkban rendkívül gyorsan fejlődő analitikai elválasztási módszer, mely egyesíti a klasszikus elektroforézis technikáját a modern kromatográfiás detektálás és automatizálás műszeres lehetőségeivel. A CE az egészen kis molekuláktól, szerves ionoktól kezdve a gyógyszervegyületeken keresztül a peptidok, oligonukleotidok, fehérjék elválasztásához és meghatározásához is alkalmazható. A nagy elválasztási hatékonyság mellett a CE nagy előnye az elválasztás körülményeinek nagy variabilitása, amely széles körű alkalmazását teszi lehetővé. A módszer további előnye a kis anyagigény, valamint a mérések automatizálhatósága.

A műszer segítségével biológiailag aktív kismolekulák enantiomer tisztaság vizsgálatát végezzük ciklodextrin adalékkal, valamint szérumfehérje-kötődés vizsgálati és fehérjeanalitikai módszereket dolgozunk ki.

Röntgendiffrakciós osztály – Kristálydiffrakciós laboratórium (3.31.)

Röntgendiffraktométer

A Rigaku R-AXIS RAPID típusú diffraktométer jellegzetessége, hogy sokféle diffrakciós kísérlet elvégzésére alkalmas:

- Kis molekulák intenzitásadatainak gyors gyűjtése réz, vagy molibdén sugárzással
- Az abszolút konfiguráció gyors meghatározása (réz sugárzással)
- Az elektronsűrűség-eloszlás kísérleti meghatározása (molibdén sugárzással)
- Adatgyűjtés fehérjékről kb. 150 Å nagyságú elemi cella paraméterig
- Ikerkristályok szerkezetének meghatározása

– Pordiffrakció

A detektor sajátos ívelt kialakítású, a sugárzás hullámhosszától független, foszfor sík-detektor, amely egyetlen állásban -60-tól +144°-os tartományban képes adatokat regisztrálni.

Tartozékok:

- Kapilláris optikai kollimátor, a fluxus növelésére.
- X-STREAM 2000CE alacsonyhőmérsékletű berendezés, amelynek XS-MS-NG20LA220 nitrogén-generátora a levegőből nitrogén gázt állít elő és azt egy héliumtöltetű hőcserélővel -180 °C hőmérsékletű nitrogéngáz-sugárrá alakítja, amellyel a kristálminta közvetlen közélről hűthető.

Felületmódosítás és nanoszerkezetek osztály (2.2.)

*DIAM 1200 – mikrohullámú plazmával aktivált CVD-kamra
(Chemical Vapour Deposition: Kémiai Gőzfázisú Leválasztás)*

A DIAM 1200 egy konvencionális kvarcharang burás, előfeszítéses nukleációra is alkalmas, kémiai gőzfázisú leválasztó berendezés, mely elsősorban széntartalmú vékonyrétegek (mikrokristályos gyémánt, gyémántszerű szén (DLC), grafit, esetleg szén-nanocsövek) leválasztására lett kialakítva.

A berendezés egy 1200 W teljesítményű, 2.45 GHz frekvenciájú mikrohullámú generátorral van ellátva, mely magnetron segítségével hangolható tápvonalon keresztül csatolja be az energiát a reakcióterbe. Ez a becsatolt energia (disszociáltató forrás) a minta felett halványkéken világító plazmagömb formájában jelenik meg.

A vákuumrendszer egy rotációs szivattyúból áll, mellyel kb. 10^{-4} mbar vákuum hozható létre a szintézis elejét jelentő tisztasági leszívásnál, majd a későbbiekben a tipikus nyomás 5-100 mbar tartományban állítható. A vákuumrendszer kiegészíthető turbomolekuláris szivattyúval is, melyhez a 'flange' a kamra oldalán található. A vákuummérés 'fullrange' (compact Penning-Pirani gauge) kombinált cellán keresztül történik, míg a nyomást egy kapacitív cella méri.

A forrásgázok (széntartalmú vékonyrétegek esetén) tipikusan metán és hidrogén, amik gázáramlásmérő szenzorokon keresztül jutnak be a reaktorba (MFC: Mass Flow Controllers). A berendezés három MFC-vel ellátva, melyekből (MFC1.: CH₄, MFC2.: H₂, MFC3.: tetszőleges additív pl.: Ar, O₂, N₂, CO₂) jelenleg kettő van aktív használatban. A reaktortérben a nyomás kb. 5-100 mbar tartományban állítható egy nyomásszabályzón keresztül.

Az acélból, ill. molibdénből kialakított mintatartó, ill. maga a minta feletti gáztér kb. 1200 °C-ig fűthető fel PID automatikán keresztül. A mintatartó továbbá előfeszíthető egyenfeszültséggel (BEN: Bias Enhanced Nucleation) kb. +/- 300 V-ig.

Neurokémiai osztály – Molekuláris mechanizmusok csoport (1.51.)

Elektrofiziológiai mérőrendszer

2004-ben OM-műszerpályázat keretében került beszerzésre a *Wu Tech, H469-IV Photodiode Array* nagy sebességű képalkotó fotodióda mátrix berendezés. A készülék a már meglévő kombinált elektrofiziológiai és fluoreszcens képalkotó berendezés új elemeként került installálásra, annak funkcióit egészíti ki.

Az inverz víz-immersiós objektívvel ellátott mikroszkóp a fluoreszcens képet egy fénykábel végződésekből álló lapra vetíti, ahonnan a kábelek a fényt a képalkotás helyére, az egyes fotodiódákhoz vezetik. A lap méhsejtre emlékeztető alakú így gyakorlatilag a

mikroszkóp teljes látómezejének leképezése megvalósítható, összesen 469 fotodióda segítségével. A fényintenzitásnak megfelelő feszültségjelek ezt követően párhuzamosan, egymástól függetlenül kerülnek feldolgozásra: minden fotodiódához tartozik egy-egy külön erősítő és egy-egy külön aluláteresztő szűrő, ami lehetővé teszi, hogy a jeleket az analóg-digitális átalakító dinamikus tartományának megfelelően, a Nyquist-szabály megsértése nélkül dolgozzuk fel a továbbiakban. Ez az egyik legnagyobb előnye a fotodióda mátrixnak a hagyományos, CCD chippel ellátott kamerákkal szemben, így ugyanis optimálisra állíthatjuk be a mérni kívánt jel méretéhez képest az erősítést és a lehetséges legjobb jel/zaj arányt érhetjük el, illetve elkerülhetjük, hogy az általunk rögzített jelekben eredetileg nem jelentkező új frekvenciakomponensek műtermékként megjelenhessenek. A fotodióda mátrix másik nagy előnye, hogy bár térbeli felbontása a CCD kamerához képest szerényebb (egy képpont éle ~70 μm), időbeli felbontása a CCD kameráét egy nagyságrenddel meghaladja (0,6 ms/kép). A fotodióda mátrix egy-egy csatornájára eső maximális mintavételi frekvencia 1 kHz felett van, ami – a fent vázolt elvi előny mellett – a gyakorlatban is lehetővé teszi a nagyfrekvenciás jelek tér- és időbeli követését. Ez a biológia eredetű jelek esetében, különösen ha idegrendszeri folyamatok vizsgálatáról van szó, igen nagy jelentőséggel bír, ugyanis az egyik legjellemzőbb idegi jel, az akciós potenciál élettartama az 1-2 ms időintervallumba esik.

Korábbi méréseink alapján felmerült, hogy az epileptiform aktivitás indításában a nagyfrekvenciás jeleknek, és azok szinkronizációjának nagy jelentősége lehet. Mivel azonban ezek a mérések az *in vitro* hippocampális agyszelet preparátum egy vagy két pontjáról származtak csupán, ezt a nagyfrekvenciás idegi szinkronizációt közvetlenül láthatóvá tenni, és így feltételezésünket minden kétséget kizáróan igazolni nem tudtuk. Többek között, ennek a vizsgálatára biztosít lehetőséget a fotodióda mátrix képalkotó sebessége és a transzmembrán feszültségfüggő fluoreszcens festékek alkalmazása.

RENDEZVÉNYEK, ELŐADÁSOK**Szemináriumok**

- **A Szerves Kémiai Szemináriumok** keretében alábbi előadások hangzottak el:
 - 2003. november 18.** *Prof. Luminita Silaghi-Dumitrescu* (Babes-Bólyai Tudományegyetem, Kolozsvár, Románia): The reactivity of organo-diarsenic derivatives
 - 2004. január 19.** *Dr. Tamara Perchyonok* (CHIROGEN Pty Ltd, School of Chemistry, The University of Melbourne, Ausztrália): Chirality transfer – single enantiomer outcomes of free radical chemistry
 - 2004. február 16.** *Bajor Zoltán*: Oligonukleotid kimérák szintézise, termikus és enzimátikus stabilitása
 - 2004. március 9.** *Lasztóczy Bálint*: A fotoaktiváció alkalmazása a neurokémiaiában
Jakus Judit: Gyógyszerjelölt vegyületek vizsgálata szabadgyökös rendszerekben
 - 2004. március 30.** *Ujváry István*: A kender (*Cannabis sativa*) különleges kémiája és a humánbiológiai következmények (irodalmi áttekintés)
 - 2004. június 1.** *Dr. Aluru S. Sarma* (Engineering College, Chennai, India): Marine sponge metabolites: Avarol & Avarone: biological properties and synthetic studies
 - 2004. június 7.** *Dr. Marko Mihovilovic* (Vienna Technical University) Biooxidations en route to bioactive compound intermediates using native and recombinant whole-cells
 - 2004. június 21.** *Dr. Ismail Yalcin* (Pharmaceutical Chemistry Department, Faculty of Pharmacy, Ankara University, Törökország): QSAR studies of some novel antimicrobial active Fused heterocyclic compounds
Dr. Esin Aki-Sener (Pharmaceutical Sciences Division of Faculty of Pharmacy, Ankara University, Törökország): Synthesis and chemotherapeutic activities of some fused isosteric heterocyclic compounds
 - 2004. június 29.** *Labádi Imre* (Szegedi Tudományegyetem): Mikrokalorimetriás vizsgálatok – molekulafelismerési lehetőségek
 - 2004. szeptember 6.** *Nagy Ildikó*: Új hetarildiének és szintetikus alkalmazásai
 - 2004. november 22.** *Kovács Richárd*: Epileptikus aktivitás hatása a mitokondriális membránpotenciál és kalciumion-koncentráció változására
 - 2005. február 21.** *Domonyi Frigyes*: Izokinolinok és kinolinok regioszelektív funkcionálizálása
Nagy Ildikó: Új hetarildiének és szintetikus alkalmazásai
 - 2005. március 21.** *Stadler Krisztián*: A Janus-arcú szabad gyökök és a diabetes késői szövődményei
Dalicsek Zoltán: Fluoros oxazaborolidin katalizátorok előállítása és felhasználásuk ketonok enantioszelektív redukciójában
 - 2005. április 4.** *Fügedi Péter*: Egy új hatékony glükolilezési módszer
Daragics Katalin: Új kemo- és regioszelektív módszer benzidilén típusú acetálok redukzív gyűrűnyitására
 - 2005. április 25.** *Sipos Ferenc*: Peptid nukleinsavak szintézise, tulajdonságai és alkalmazásai
Palkó Roberta: Kéntartalmú ikerionok szintézise és átalakításai
 - 2005. május 23.** *Ujváry István*: Rovarkémiai jelek kutatása – térkép nélkül, de nem céltalanul
- Az **MTA KK Anyag- és Környezetkémiai Intézet Szemináriumain** az alábbi előadások hangzottak el:

2004. március 17. *Ujvári Tamás:* Karbonitrid rétegek növesztése és polietilén felületmódosítása hidegplazmás és atomsugaras módszerekkel

2004. április 20. *Mink György:* Félüzemi eljárások klórbenzolokkal szennyezett talajvíz tisztítására

2004. június 15. *Mohai Miklós:* Kvantitatív röntgen-fotoelektron spektroszkópia és alkalmazása szervesen szilárd rendszerek vizsgálatára

2004. szeptember 21. *Pajkossy Tamás:* Az elektrokémiai kettősréteg és adszorpció vizsgálata

Pajkossy Tamás: Ívlámpákkal kapcsolatos mérés technikai fejlesztések

Fekete Éva: Alumínium és saválló acél kontaktkorróziójával kapcsolatos vizsgálatok

Szabó Sándor: Fémek adszorpciója idegen fémfelületeken

2004. október 19. *Horváth László:* Szoláris sótalánítás – Üzemi modul tesztek Cagliariiban

Blaszó Marianne: Gyors módszer műanyag hulladékok pirolízis-olajának minőségjavítására alkalmazható katalizátorok reaktivitásának ellenőrzésére

Várhegyi Gábor: Reakciókinetika alkalmazása összetett anyagok termikus tulajdonságainak felderítésében

Pekkerné Jakab Emma: Korom adalékanyag hatása polimerek hőbomlására

2004. november 23. *Gál Loránd:* Plazmaparaméterek hatása fullerének szintézisére

Mohai Ilona: Plazmadiagnosztika spektroszkópiai módszerekkel

- A **Polimerkémiai és Anyagtudományi Szemináriumok** keretében alábbi előadások hangzottak el:

2003. október 9. *Maria Bruma* (Romanian Academy of Sciences, Románia): Synthesis and study of new heterocyclic polymers for advanced applications

Corneliu Hamciuc (Romanian Academy of Sciences, Románia): Fluorinated polyether-ether-ketones and their modification through sulfonation

2004. január 15. *Zsuga Miklós* (Debreceni Egyetem, Alkalmazott Kémiai Tanszék): Telekelikus polimerek és polimer analóg reakciók

2004. február 16. *Szakács Tibor:* A poli(vinil-klorid) szabályozott degradációja, stabilizálása és kémiai módosítása

2004. április 26. *Fodorné Csorba Katalin* (MTA Szilárdtestfizikai és Optikai Kutatóintézet): Termotrop folyadékkristály polimerek

2004. május 11. *Kéki Sándor* (Debreceni Egyetem, Alkalmazott Kémiai Tanszék): A MALDI-TOF (Matrix – Assisted – Laser – Desorption – Ionization Time-Of-Flight) tömegspektrometria alkalmazása szintetikus polimerek analízisére

2004. június 21. *Domján Attila:* Nanofázis szerkezetű amfifil polimer kotérhálók analízise szilárdtest NMR-rel és röntgenszórással (kutatási beszámoló a „Max Planck Institut für Polymerforschung”-ban töltött 2 éves Marie Curie ösztöndíjas időszakról)

Kali Gergely: Amfifil polimer kotérhálók viselkedése sóoldatokban

2004. június 24. *Dr. Sheau-Hwa Ma* (DuPont, USA): New trends in polymer coatings technologies

2004. július 19. *Prof. Joseph P. Kennedy* (University of Akron, Akron, USA): Biocompatible smart amphiphilic conetworks for artificial organs

2004. október 6. *Erdődi Gábor* „Poliizobutilén alapú elágazott szerkezetű polimerek” című PhD értekezésének nyilvános vitája

2004. október 8. *Prof. Wolfgang Binder* (Vienna University of Technology, Bécs, Ausztria): Supramolecular chemistry of polymers: new approaches towards functional materials and surfaces

2004. október 22. *Szakács Tibor* „A poli(vinil-klorid) termooxidatív láncszakadása és kémiai módosítása” című PhD értekezésének nyilvános vitája

2004. október 24. *Ramona Lungu* (Faculty of Chemistry, Alexandru Ioan Cuza University, Iasi, Románia): New polymers containing imide rings

2005. január 20. *Takács Erzsébet*: Nagyenergiájú sugárzással iniciált polimerizáció: gyakorlati alkalmazások és alap kutatás

2005. február 10. *Fónagy Tamás* „Jól definiált szerkezetű polimerek előállítása atomátadásos gyökös polimerizáció és egyéb módszerek kombinálásával” című PhD értekezésének nyilvános vitája

2005. április 11. *Prof. Costas S. Patrickios* (Department of Chemistry, University of Cyprus, Nicosia, Ciprus): Amphiphilic polymethacrylate model networks

2005. május 11. *Janecska Ákos*: Olefinek polimerizációjának katalizátorai

2005. május 12. *Prof. Majoros István* (Center for Biologic Nanotechnology, University of Michigan, Ann Arbor, Michigan, USA): PAMAM dendrimer-based multifunctional engineered nanodevices for cancer therapy

- A **Röntgendiffrakciós Szemináriumok** keretében az következő előadások hangzottak el:
 - 2004. március 24.** *Besenyi Gábor*: Palládiumdimerek nitrénkomplexei
 - 2004. április 21.** *Sajó István*: Pordiffrakció és szerkezetkutatás
 - 2004. június 9.** *Barabás Orsolya*: A fehérjekrisztallográfia lehetőségei és kihívásai egy DNS-javító enzim vizsgálatának példáján
- A **Neurokémiai Szemináriumok** keretében az alábbi előadások hangzottak el:
 - 2004. november 26.** *Lasztóczy Bálint, Emri Zsuzsa*: Egy potenciális antiepileptikum (Q5) funkcionális vizsgálata elektrofiziológiai és képalkotó technikával
Nyikos Lajos, Lasztóczy Bálint: Membránpotenciál és $[Ca^{2+}]$ tér- és időbeli változása in vitro epilepszia modellben
 - 2004. november 29.** *Dr. Didier Rognan* (Faculté de Pharmacie, Université Louis Pasteur de Strasbourg, Franciaország): Virtual screening of protein libraries as a new chemogenomic tool

Rendezvények a Kutatóközpontban

- **2003. november 5-én a Magyar Tudomány Napja** keretében végzős középiskolás diákok számára „*Szerves, biomolekuláris és gyógyszerkémiái kutatások a Kémiai Kutatóközpontban*” címmel tartottunk rendezvényt, melyet *Pálinkás Gábor* főigazgató nyitott meg, ezt követően *Vinkler Péter* mutatta be a Kutatóközpontot. A délelőtt során néhány érdekes előadást hallgattak meg a diákok:
 - Hajós György*: Gyűrűs vegyületek a szerves kémiában
 - Zsila Ferenc*: Fehérjekötő helyek jellemzése CD-spektroszkópiával
 - Jakus Judit*: Janus-arcú szabad gyökök
 - Jablonkai István*: A kémiai antidotumok szerkezete és kölcsönhatásuk növényi enzimekkel
 - Szabó Pál*: Az izotópoktól a fehérjéig, avagy a tömegspektrometria nagy menetelése
 - Barabás Péter*: Fényérzékelés és adaptáció az emlős retinában
 - Vereczkey László*: Gyógyszerbiztonsági vizsgálatok
 A diákok délután pedig laborlátogatások során ismerkedhettek meg a Kutatóközpontban folyó munkával.
- **2004. április 27-28.** között került sor a Kutatóközpont **VII. Doktori Kémiai Iskolájára**. A rendezvényt *Telegdi Judit* szervezte. A DOKI programja a következő volt:
 - Megnyitó: *Telegdi Judit*

Pálinkás Gábor

Haraszti Márton, Iván Béla: Új szerkezetű amfifil polimer gélek

Szabó L. Sándor, Iván Béla, Jonas Scherble, Rolf Mülhaupt: Új szerkezetű amfifil polimer gélek

Szakács Tibor, Iván Béla, Kupai József: Nagyobb koncentrációban láncmenti funkció csoportot tartalmazó PVC előállítása és degradációja

Groh Werner Péter, Iván Béla, Feike de Jong, Teun Graafland: Izobutilén karbokationos polimerizációja környezetileg előnyös benzotrifluorid oldószerben

Frey Krisztina: A SiO₂ és TiO₂ hordozós AuPd kétfémes nanorészecskék katalitikus vizsgálata a CO oxidációban

May Zoltán, Simándi László: A dioxigén biomimetikus aktivitása dioximáto-vas(II) komplexekkel

Szigyártó Imola, Simándi László, Párkányi László, Győr Miklós, Schlosser Gitta: Dioximáto-mangán(II) komplex előállítása és katalitikus aktivitása

Kovács Anita: A Pt/H-mordenit katalizátor DRIFT spektroszkópiás és katalitikus vizsgálata

Báthori Nikoletta: Triszubsztituált triazinok előállítása és kristályszerkezetük felderítése

Payer Károly: Bepillantás a gáz- és folyadék-kromatográfiába

Szabó Ervin: CO alacsony hőmérsékletű oxidációja Au katalizátorokon

Somodi Ferenc, Borbáth Irina, Margitfalvi József: Ónnal módosított hordozós katalizátorok előállítása irányított felületi reakciók alkalmazásával

Pollreisz Ferenc, Gömör Ágnes, Schlosser Gitta, Vékey Károly: A kiralitás hatásának vizsgálata a szerin dimer stabilitására

Győrffy Nóra: Modell Pt-Pd katalizátorok jellemzése és katalitikus vizsgálata metil-etil-ciklopropán izomerek hidrogenatív gyűrűfelnnyílási reakciójában

Pilbáth Aranka, Felhősi Ilona, Kármánné Herr Franciska, Telegdi Judit, Kálmán Erika: Cink felületének előkezelése környezetbarát inhibitorokkal

Kallós Ágnes, Nagy Péter, Kálmán Erika: Szén módosulatok SPM-es vizsgálata

Gábor Tamás, Papp Katalin, Kármánné Herr Franciska, Kálmán Erika, Kaptay György: Szén nanocsövek kezelése

Gergely András, Tolnai Gyula: Alumínium-hidroxid töltőanyag felületének módosítása titán és cirkónium vegyületekkel, kompozit pigment előállítása

Csorbai Hajnalka, Csikváry Péter: Bórral adalékolt gyémánt-vékonyrétegek kialakítása CVD módszerrel

Mészáros Erika, Jakab Emma, Várhegyi Gábor: Lignocellulóz tartalmú anyagok vizsgálata termikus módszerekkel

Gál Loránd, Zoran Markovic, Szépvölgyi János: Fullerének előállítása RF termikus plazmában

Miskolczi Zsombor, Sebőkné Nagy Krisztina, Biczók László: Ionos folyadékok aggregációja és micellaképzése vízben

Gméling Katalin, Kasztovszky Zsolt, Harangi Szabolcs: PGAA a geológiában: Bórkoncentráció a Kárpát-Pannon térség neogén vulkáni kőzeteiben

Bíró Tímea, Maksay Gábor: Glicin receptorok: kötődés és allosztéria

Vaskó Ágnes Gyöngyvér, Hajós György, Riedl Zsuzsanna: Kísérletek új cinnolin származékok előállítására

Sipos Ferenc, Kenesi Gyöngyi, Sági Gyula: Új PNS monomerek szintézise

Matola Tünde, Jablonkai István: Egy glutation peptidomimetikum szintézise

Daragics Katalin, Fügedi Péter: Új kemo- és regioselektív módszer szénhidrátok 4,6-O-benzilidén típusú acetáljainak redukzív felnyitására

Csiki Zsuzsanna, Fügedi Péter: Vizsgálatok gyűrűs nitrogén tartalmú heparánáz inhibitorok szintézisére

Tatai János, Fügedi Péter: Az ortogonális védőcsoport-stratégia kiterjesztése FGF-kötő heparin oligoszacharidok szintézisére

Kaleta Zoltán, Soós Tibor: Fluoros reagensek előállítása és alkalmazása

- **2004. november 25-én az MTA Központi Kémiai Kutatóintézet megalapításának 50. évfordulójáról** tartottunk megemlékezést. A rendezvényt *Pálinkás Gábor* főigazgató nyitotta meg. Előadásában visszatekintett az Intézet eddigi történetére, az elért alapkutatási és gyakorlati eredményekre. Kitért arra, hogy a nemzetközi tudományos bizottságok, amelyek megismerkedtek az itt folyó munkákkal, az elért eredményekkel, arra a következtetésre jutottak, hogy az Intézet fontos szereplője a nemzetközi tudományos életnek és fenntartása nemzeti érdek. Ezután *Kroó Norbert*, az MTA főtitkára köszöntötte az összegyűlteket, és további eredményes munkát kívánt. Ezt követően *Márta Ferenc*, nyugalmazott főigazgató visszatekintést adott az elmúlt évekre, amelyek sok kiváló eredményt, de számos nehezen megoldható anyagi gondot is hoztak. A továbbiakban tudományos előadások hangoztak el:

Hajós György: Kutatásaink szerves részét képező területek. Visszaemlékezések és tervek

Margitfalvi József: Heterogénkatalitikus kutatások a Kémiai Kutatóközpontban: múlt, jelen és jövő

Vékey Károly: Tömegek, elefántcsonttorony és az életminőség

Iván Béla: Különleges polimerek, polimer kémiai és anyagtudományi kutatások a polimer korszakban a Kémiai Kutatóközpontban

- **2004. június 2-3-án** 10. alkalommal rendeztük meg a **Kutatóközponti Tudományos Napokat**, melyen a Kutatóközpont munkatársai kutatásaik legújabb eredményeiről számoltak be. A rendezvény lezárásaként került sor a „PRO ARTE CHEMICA” érmek és az előadói díjak átadására.

Kutatóközpontban hosszú időn át végzett, kiemelkedően eredményes kutatómunkájuk elismeréseképpen hárman vehették át a „**PRO ARTE CHEMICA**” érmet:

Holly Sándor, az MTA Doktora,

Lakosi László, az MTA Doktora,

Szántay Csaba, az MTA rendes tagja.

Kutatói díjban és az ezzel járó 600 ezer Ft kutatási támogatásban részesült:

Bakó Imre: Víz adszorpciója Pd(111) felületen: elméleti vizsgálatok;

Jemnitz Katalin, Veres Zsuzsa, Tóth Éva, Török Géza, Vereczkey László: „Benz[A]pirén és 2-aminoantracén metabolikus aktiválása indukált patkánymáj S9 frakcióval és hepatocitákkal – című előadása alapján.

Fiatalkutatói díjban és az ezzel járó 300 ezer Ft kutatási támogatásban részesült:

Fónagy Tamás, Ulrich Schulze, Iván Béla, Jürgen Pionteck: Poli(propilén-g-sztirol) ojtásos kopolimerek előállítása és polipropilén/polisztirol keverékben mutatott kompatibilizáló hatásuk vizsgálata;

Frey Krisztina, Gucci László, Pető Gábor, Beck Andrea: Arany nanorészecskék határfelületi szerkezetének modellezése: elektronszerkezet és aktivitás;

Gméling Katalin, Kasztovszky Zsolt, Harangi Szabolcs: A bórkoncentráció és a szubdukciós jelleg közötti összefüggések a Kárpát-Pannon térség neogén vulkáni kőzeteiben;

Ötvös Zsolt: Szén nanocsövek adszorpciós tulajdonságai;

Simon Ágnes, Czajlik András, Perczel András, Kéri György, Nyikos Lajos, Emri Zsuzsa, Kardos Julianna: A TT-232 kötőhelye az 1. típusú szomatostatin receptor homológiamodelljében;

Szigyártó Imola, Simándi László, Párkányi László, Győr Miklós, Schlosser Gitta: Dioximáto-mangán(II) dimer előállítás, szerkezetvizsgálata és katalitikus aktivitása;

Tárkányi Gábor, Deák Andrea: Organoón(IV) komplexek vizsgálata folyadékfázisú ^1H -, ^{13}C - és ^{119}Sn – NMR spektroszkópiával – című előadása alapján.

A zsűri dícséretben részesítette a következő előadókat:

Sebőkné Nagy Krisztina, Miskolczi Zsombor, Biczók László: Egy új fluoreszcenciás jelzőanyag mikroheterogén rendszerek vizsgálatára;

Rockenbauer Antal: Termodinamikai paraméterek meghatározása elektron spin rezonancia-spektroszkópiával;

Simándi László, Simándi Tatjana M., May Zoltán, Szigyártó Imola: Hidrogénatom- és elektronátviteli mechanizmusok a katecholáz és fenoxazon szintetáz funkcionális modellnél – című előadásuk alapján.

• **A Nemzetközi Tudományos Tanácsadó Testület ülése**

2004. szeptember 1-3. között tartotta ülését az MTA Kémiai Kutatóközpont **Nemzetközi Tudományos Tanácsadó Testülete**. A rendezvény első napján Somorjai Gábor „Frontiers of molecular surface chemistry. Nanoscience of catalyst design and biopolymer surface science” címmel tartott előadást.

A továbbiakban a következő előadások hangoztak el:

Bakó István: Adsorption of water on Pd(111): theory

Jemnitz Katalin, Veres Zsuzsa, Török Géza, Tóth Éva, Vereczkey László: Comparative study in the Ames test on benz[A]pyrene and 2-aminoanthracene metabolic activation using rat hepatic S9 and hepatocytes following in vivo or in vitro induction

Simon Ágnes, Czajlik András, Percze András, Kéri György, Nyikos Lajos, Emri Zsuzsanna, Kardos Julianna: Binding crevice for TT-232 in a homology model of type 1 somatostatin receptor

Gméling Katalin, Kasztovszky Zsolt, Harangi Szabolcs: Connection between the character of the subduction and the boron content of the neogene volcanic rocks from the Carpathian-Pannonian region

Frey Krisztina, Guzzi László, Pető Gábor, Beck Andrea: Modeling interfacial structure of gold nanoparticles: electron properties and activity

Szigyártó Imola, Simándi László, Párkányi László, Győr Miklós, Schlosser Gitta: Synthesis, structure and reactivity of a dioximatomangane(II) dimer

Ötvös Zsolt: Adsorption properties of carbon nanotubes

Tárkányi Gábor, Deák Andrea: Investigation of organotin(IV) complexes by liquid phase ^1H , ^{13}C , ^{119}Sn -NMR spectroscopy

Rockenbauer Antal: Determination of the thermodynamic parameters by electron spin resonance spectroscopy. Could we defeat the uncertainty principle?

Sebőkné Nagy Krisztina, Miskolczi Zsombor, Biczók László: A new fluorescent probe for the study of microheterogeneous systems

Simándi László, Simándi Tatjana M., May Zoltán, Szigyártó Imola: Hydrogen atom vs electron transfer mechanisms in functional models for catecholase and phenoxazinone synthase

Mohai Miklós, Tóth András, Bertóti Imre: Importance of quantitative analysis in XPS

Mohai Ilona, Károly Zoltán, Gál Lóránd, Szépvölgyi János: Synthesis of advanced microsized and nanosized powders in RF thermal plasma reactor

Pajkossy Tamás, Mészáros Gábor, Lengyel Béla: Two modern problems of electrochemistry

Földes Enikő, Pukánszky Béla: Efficiency and mechanism of phosphorous antioxidants in Phillips polyethylene

Haraszt Márton, Erdődi Gábor, Iván Béla: Smart nanostructured amphiphilic polymer conetworks

- **2005. május 5-6-án** került sor a Kutatóközpont **VIII. Doktori Kémiai Iskolájára**. A rendezvényt *Bikádi Zsolt* szervezte. A DOKI programja:

Köszöntő: *Pálinkás Gábor*

Somodi Ferenc, Borbáth Irina, Hegedűs Mihály, Szegedi Ágnes, Margitfalvi József: Az ónoxid promotor hatása alumíniumoxid hordozós arany katalizátorokon alacsony hőmérsékletű CO oxidációban

Szabó Ervin: A nanokörnyezet hatása a hordozós Au katalizátorok aktivitására

Gál Lóránd, Mohai Ilona, Károly Zoltán, Szépvölgyi János: Nanoszemcsés cinkferrit szintézisének optimalizálása

Kovács Anita, Valyon József: Hidrogénadszorpció Pt/H-zeolit katalizátorokon

Keszler Anna Mária, Nemes László: Lézer indukált szén plazmák emissziós spektroszkópiai vizsgálata (szilárd céltárgy, valamint gáz fázisú letörési plazmák esetén) és számítógépes modellezése

Miskolczi Zsombor, Sebőkné Nagy Krisztina, Biczók László: 2-Hidroxil szubsztituált Nílus-vörös fluoreszcenciás jelzőanyag kölcsönhatása szerves nitrogénvegyületekkel

Báthori Nikoletta: Orto-szubsztituált Piedfortok

Mijid Narmandahk, Iván Béla: Jól definiált láncvégi funkciós csoporttal rendelkező poliizobutilének szintézise és azoknak termikus analízise

Pálfı Viktória, Iván Béla: Láncvégi kettős kötással rendelkező poliizobutilének szintézise és a végcsoport átalakítása ozonolízissel

Szanka István, Iván Béla: Új típusú elágazásos polimerek szintézise kváziélő gyökös polimerizációval

Aranyi Dóra, Nagy M. Péter, Shafreeza Sobri, Kálmán Erika: Aranyvirágok

Paszternák András, Felhősi Ilona, Keresztes Zsófia, Kálmán Erika: Szerves vegyületek adszorpciója passzívált vasfelületen

Pilbáth Aranka, Felhősi Ilona, Telegdi Judit, Kármánné Herr Franciska, Kálmán Erika: Cink felületkezelése önszerveződő molekulákkal

Payer Károly: Szilárd fázisú extrakció (SPE)

Czinege Erzsébet, Fügei Péter: D-Glükuronsav tartalmú heparin tertraszacharidok előállítása ortogonális védőcsoport stratégiával

Csíki Zsuzsanna, Fügei Péter: Azacukor tartalmú heparánáz inhibitor szintézise

Tatai János, Fügei Péter: FGF-kötő heparin oligoszacharidok szintézise

Dalicsek Zoltán, Soós Tibor: Fluoros oxazaborolidin katalizátorok szintézise és felhasználása ketonok enantioszelektív redukciójában

Vakulya Benedek, Soós Tibor: Nitro-metán enantioszelektív Michael-addíciója transz-kalkonokra kinin-alapú bifunkcionális organokatalizátor alkalmazásával

Palkó Roberta, Riedl Zsuzsanna: Kéntartalmú ikerionok szintézise és átalakításai
Sitkei Eszter, Tárkányi Gábor, Párkányi László, Besenyei Gábor: Sztérikus hatások megnyilvánulása palládiumkomplexek önszerveződésében
Sipos Ferenc, Sági Gyula: Bázis-módosított PNS oligomerek szintézise
Lengyel György, Jemnitz Katalin, Veres Zsuzsa, Vereczkey László: ABC transzporterekkel kapcsolatos gyógyszer-interakciók tanulmányozása primer hepatocytá szendvics kultúrában
Molnár Tünde, Emri Zsuzsa, Simon-Trompler Edit, Palkovits Miklós, Kardos Julianna: Baclofen független gamma-hidroxi-butirát kötőhely ismertetése a nucleus accumbensben

- **2005. május 18-án** a Kutatóközpont **Fiatal Kutatói Fórumot** tartott a következő programmal:
Pálinkás Gábor előadása: A Kémiai Kutatóközpont jövőképe
Kérdések, hozzászólások, beszélgetés
- **2005. június 1-2-án** immáron 11. alkalommal rendeztük meg a **Kutatóközponti Tudományos Napokat**. A rendezvény lezárásaként tartott fogadás keretében *Pálinkás Gábor* az elhangzott előadások alapján, a felkért Tudományos Zsűri döntésének megfelelően - két kutatói díjat és öt fiatal kutatói díjat adott át az alábbiak szerint:

Kutatói díjban részesült:

Kálmán Alajos: Morfotrópia: kapcsolat a szerves kristályok izostrukturalitása és polimorfija között;
Kármánné Herr Franciska, Kálmán Erika, Andreas Schreiber, Joachim W. Schultze, Manuel M. Lohrengel: Elektrokémiai vizsgálatok vas polikristály szemcsehatáron – című előadásáért.

Fiatal kutatói díjban részesült:

Deák Andrea, Tárkányi Gábor: Termikusan indukált metil-vándorlással járó kristály-kristály átalakulások organoó(IV)-komplexek körében;
Groh Werner Péter, Iván Béla, Szesztay Andrásné, Tóth Kálmán: Új katalizátor rendszer vizsgálata izobutilén karbokationos polimerizációjában és alkalmazása kombinált polimerizációs eljárásokban;
Hollóné Sitkei Eszter, Tárkányi Gábor, Párkányi László, Besenyei Gábor: Sztérikus hatások megnyilvánulása palládiumkomplexek önszerveződésében;
Kovács Gergely: Az acetone légköri fotokémiája;
Vakulya Benedek, Varga Szilárd, Schubert Gábor, Pápai Imre, Soós Tibor: Kinin alapú organokatalizátor szintézise és mechanizmusának vizsgálata – című előadásáért.

A zsűri kiváló előadásukért **dicséretben** részesítette a következő kutatókat:

Lengyel György, Veres Zsuzsa, Vereczkey László, Jemnitz Katalin: ABC transzporterek gyógyszer-interakciókban játszott szerepének tanulmányozása primer hepatocytá szendvicskultúrában;
Mezey Péter, Domján Attila, Iván Béla, Ralf Thomann, Rolf Mülhaupt: Poli(N,N-dimetil-akrilamid)-*l*-poliizobutilén amfil polimer kotérhálók szerkezetének vizsgálata és nanoreaktorként történő alkalmazásuk;
Nagy Nóra Veronika, Plánkáné Szabó Terézia, Rockenbauer Antal, Peintler Gábor, Nagypál István, Korecz László: Réz(II)-oligoglicin komplexek szerkezeti változatossága:

mikrospeciáció és koordinációs módok meghatározása kétdimenziós ESR-spektroszkópiával;
Onyestyák György, Valyon József, Papp Katalin: Új, méhsejt szerkezetű zeolit/szén kompozit anyagok;
Nguyen Cong Tam, Zsigrai József: Uránminták korának gamma-spektroszkópiai meghatározása.

Egyéb rendezvények

- **2004. március 11-12-én** a **Bay Zoltán Alapítvány** rendezésében a **Hungarian – German Meeting in the Field of Material Research** címmel tartott konferencián a Kutatóközpont részéről az alábbi előadások hangzottak el:
Pálinkás Gábor: Cooperation possibilities in CRC HAS
Várhegyi Gábor: Cooperation possibilities in IMEC CRC HAS
- **2004. március 14-én** zajlott a **III. MediChem** konferencia, amely az 1/047 számú NKFP projekt zárórendezvénye volt. A konferencián a Kutatóközpontból a következő kutatók tartottak előadást: *Hajós György, Fügedi Péter, Kardos Julianna, Vidóczy Tamás, Simonyi Miklós, Biczók László, Jakus Judit, Szentmihályi Klára, Vereczkey László*.
- **2004. április 8.** Az **NMR-csoport** és a **Varian Inc.** közös rendezvényén az alábbi előadások hangzottak el:
Dr. Losonczy Judit (Varian Inc.): Korszerű NMR-mérési módszerek nagy mágneses térben
Dr. Sándor Péter: Eljárások többdimenziós NMR-mérések felgyorsítására
- A **2004. május 2-6.** között Tokajban megtartott **22nd Informal Meeting on Mass Spectrometry** konferencia főszervezője *Vékey Károly* volt.
- **2004. május 21-én** a **Magyar Szabadgyök-kutató Társaság** és az **MSD Centrum** szervezésében került sor a **Szabadgyökkutatás aktuális kérdései** című munkaértekezletre. A rendezvény szervezője *Dr. Szentmihályi Klára* és *Dr. Blázovics Anna* volt.
- **2004. szeptember 12-15.** között került megrendezésre a **21. European Colloquium on Heterocyclic Chemistry** konferencia, melynek főszervezője Hajós György volt.
- **2004. december 3.** Az **MTA Spektrokémiai Munkabizottság**, az **MTA Környezetkémiai Bizottság** és az **MTA Kémiai Kutatóközpont Anyag- és Környezetkémiai Intézete együttes tudományos ülésén** az alábbi előadások hangzottak el:
 Megnyitó: *Heltai György*, az MTA Spektrokémiai Munkabizottság elnöke
Szépvölgyi János: Az MTA KK AKI tevékenységének bemutatása
Mohai Miklós: Kvantitatív felületanalízis röntgen fotoelektron spektroszkópiával
Nemes László, Keszler Anna Mária: Lézerindukált szénplazmák spektroszkópiai vizsgálata
Keszler Anna Mária, Nemes László: Szén nanocsövek Raman-spektroszkópiai vizsgálata
Zorán Markovic, Mohai Ilona, Szépvölgyi János: Optical spectroscopy of RF thermal plasma is fullerene synthesis
Földes Enikő: Polietilén porok funkciócsoport-koncentrációjának mennyiségi meghatározása DRIFT-módszerrel

- **2005. január 27.** Az **Elméleti Szerveskémiai Munkabizottság ülésén** a Kutatóközpont részéről a következő előadások hangzottak el:
Hamza Andrea, Pápai Imre, Schubert Gábor, Soós Tibor, Szilágyi Erzsébet, Vakulya Benedek: Hidrogénhidak szerepe az organokatalízisben: elméleti tanulmányok
Lukovits István: Kekulé-határszerkezetek megszámlálása grafitban
Riedl Zsuzsanna, Palkó Roberta, Messmer András, Hajós György: Kéntartalmú ikerionok váratlan átalakulásai
- A **Magyar Innovációs Szövetség XV., 2003. évi rendes közgyűlésén** *Pálinkás Gábor* hozzászólásában a kutatóintézetek és az egyetemek pályázatok befogadása terén tapasztalt nehézségeiről, valamint a hazai kockázati tőke hiányáról beszélt. Mindkét probléma gátja az innováció felgyorsulásának.
- **2005. március 23-án** zajlott a **MediChem II.** projekt **programnyitó** ülése. A projekt a sikeresen zárult MediChem I. folytatása, vezetője *Szántay Csaba*, koordinátora *Hajós György*. A konferencián a Kutatóközpontból a következő kutatók tartottak előadást: *Maksay Gábor, Vereczkey László, Jemnitz Katalin, Hajós György.*

Előadások

- **2004. október 12.** Az **MTA Kémiai Tudományok Osztálya előadóülésén** hangzott el *Pavláth Attila* (az MTA külső tagja) „A műegyetem erkélyétől az ACS elnökségéig” című székfoglaló előadása.
- **2004. október 18.** *Szántay Csaba* „Gyógyszereink és a szimmetria” címmel a **Mindentudás Egyetemén** tartott előadást.
- **2004. november 5.** Az **MTA Kémiai Tudományok Osztálya a Magyar Tudomány Ünnepe**hez kapcsolódóan „A kémia feladatai a nanoszerkezetű anyagok kutatásában és a nanotechnológiában” címmel tudományos előadóülést tartott, melyen *Kálmán Erika* „Az önszerveződő nanoszerkezetek és ultravékony rétegek” címmel tartott előadást.
- **2004. november 15.** *Kálmán Erika* „A Delhi vasoszloptól a molekuláris építészetig – a kémia új perspektívája” címmel a **Mindentudás Egyetemén** tartott előadást.
- **2004. november 16.** Az **MTA Kémiai Tudományok Osztálya előadóülésén** *Pukánszky Béla* „A kerti széktől a F1 autóig: szerkezet és tulajdonság kapcsolata polimer rendszerekben” címmel tartott székfoglaló előadást.
- **2004. december 1.** *Nagy Ferenc:* Nanorétegek vastagságának becslése konverziós elekton Mössbauer-spektrum alapján (beszámoló az ELTE TTK Magkémia Tanszékén vendégkutatóként végzett munkáról)
- *Beck Mihály* **2004**-ben egyetemi- és PhD-hallgatók részére „A tudományos kutatás módszertani és etikai kérdései” címmel 10 előadásból álló speciálkollégiumot tartott.

TUDOMÁNYOS ÉRTEKEZÉSEK VITÁI**PhD – értekezések**

- **2004. október 6.** *Erdődi Gábor*: Poliizobutilén alapú elágazott szerkezetű polimerek
- **2004. szeptember 15.** *Lejtoviczné Egyed Orsolya*: Szerkezetfelderítés rezgési spektroszkópiái és NMR-módszerrel biológiai érdeklődésre számot tartó szerves vegyületekben
- **2004. október 22.** *Szakács Tibor*: A poli(vinil-klorid) termooxidatív láncszakadása és kémiai módosítása
- **2004. május 6.** *Tamási Viola*: Citokróm P450 enzimek in vitro és in vivo indukciójának vizsgálata regenerálódó májsejtekben
- **2004. november 16.** *Bajor Zoltán*: Oligonukleotid kimérák szintézise, termikus és enzimatiszta stabilitása
- **2004. szeptember 22.** *Vanyúr Rozália*: Fotoszenzibilizátorok felhalmozódásának nyomkövetése és mennyiségi szerkezet-hatás összefüggései
- **2004. december 7.** *Stadler Krisztián*: Szabadgyökök szerepe a kísérletes diabetes mellitus késői szövődményeinek kialakulásában patkányon
- **2005. január 4.** *Barabás Péter*: Foszfodiészteráz enzimgátló vegyületek hatása a sötét- és fényadaptált emlős retina fényválaszára
- **2005. február 10.** *Fónagy Tamás*: Jól definiált szerkezetű polimerek előállítása atomátadásos gyökös polimerizáció és egyéb módszerek kombinálásával
- **2005. február 17.** *István Krisztina*: A Raman és IR-spektroszkópia válogatott alkalmazásai a kromatográfiában
- **2005. április 1.** *Schlosser Gitta*: Molekuláris komplexek tömegspektrometriás vizsgálata
- **2005. május 26.** *Schubert Gábor*: A szén-dioxid kémiai átalakításának elméleti tanulmányozása

MTA – doktori értekezés

- **2004. december 10.** *Sági János*: Kémiailag módosított nukleotidok alkalmazása a nukleinsavak szerkezet-funkció összefüggéseinek kutatásában

KÜLFÖLDI ELŐADÓK

- **2003. október 1.** *Dr. S. R. Ahmad* (Centre for Applied Laser Spectroscopy, DEOS, RMCS, Cranfield University, Shrivenham, Swindon, Nagy-Britannia) Laser induced breakdown spectroscopy – an instrument for water analysis (LIWA)
- **2003. október 6.** *Prof. Hisasi Takenouti* (Laboratoire Interfacier et System Electrochimiques, UPR 15, CNRS, Párizs, Franciaország): Effect of the glass-transition temperature, T_g , on the protective effect of organic layer
- **2003. november 17.** A **Kémiai Kutatóközpont**, a **Magyar Kémikusok Egyesülete** és a **Novartis** közös rendezésében: *Prof. Dr. Beat Ernst* (Institute für Molekulare Pharmazie, Universität Basel, Svájc): Rational design and synthesis of lectin antagonists
- **2003. november 26.** *Prof. A. van Dorsselaer* (Université Louis Pasteur, Strasbourg, Franciaország): PROTEOMICS and mass spectrometry: how does it works and when can it be helpful for biologists?
- **2003. november 27.** *Prof. A. van Dorsselaer* (Université Louis Pasteur, Strasbourg, Franciaország): The study of non covalent interactions by mass spectrometry: application in chemistry and in biology
- **2003. november 27.** *Gérard Pépy* (Laboratoire Léon Brillouin, CEA-CNRS, CE. Saclay, Franciaország): Uniform nanochannels studied by small angle scattering
- **2003. december 12.** *Prof. Leonard Amaral* (Department of Micobacteriology, Institute of Hygiene and Tropical Medicine, New University of Lisabon, Portugália): Inducing reversible tetracycline resistance of *acrAB* intact and *acrAB* deleted mutant: role of proton gradient efflux pumps and porins
- **2003. december 16.** *Dr. Joerg Niebel* (Advion BioSciences Ltd, Wachenheim, Németország): The latest results achieved with the Advion ChipESI technology around protein-ligand and protein-protein interactions
The presentation of some metabolite ID based applications developed by Prof. G. Hopfgartner, University Geneva
- **2004. március 22.** *Prof. Richard Stephenson* (School of Chemical Sciences and Pharmacology, University of East Anglia, Norwich, Nagy-Britannia): Organometalcarbonyl bioprobes and sensors
- **2004. március 29.** *Prof. Michael Baer* (Soreq Nuclear Research Center, Izrael): Molecular fields: A theoretical treatment of the Born-Oppenheimer coupling terms
- **2004. május 12-én** a **KKKI**, a **Magyar Kémikusok Egyesülete** és a **Novartis** közös rendezésében: *Prof. Albert Padwa* (Emory University, Atlanta, USA): Utilization of thio fragments for the synthesis of biologically active nitrogen heterocycles

- **2004. május 20.** *Dr. Thomas Reichet* (Fraunhofer-Institute für Chemische Technologie, Pfinztal, Németország): Integrative polymer processing techniques – the way to product innovation
- **2004. augusztus 3.** *Prof. R. P. Gandhi* (University of Delhi, India): On stereoselectivities in cycloaddition reactions involving asymmetrically substituted allens
- **2004. szeptember 1.** *Prof. Gabor A. Somorjai* (University of California, Berkeley, USA) Frontiers of molecular surface chemistry. Nanoscience of catalyst design and polymer bio-implant interfaces
- **2004. október 7.** *Dr. Lisziewicz Julianna* (Research Institute for Genetic and Human Therapy, Washington DC, USA): Új típusú felületi DNS-készítmény (DermaVir) fejlesztése az AIDS gyógyítására
- **2004. október 27.** *Giuseppina Cacace* (Proteomic and Biomolecular Mass Spectrometry Centre, Institute of Food Science and Technology – C.N.R. Avellino, Olaszország): Electrophoresis in proteomics
- **2004. november 10.** A **Kutatóközpont, a Magyar Kémikusok Egyesülete** és a **NOVARTIS** közös rendezésében: *Prof. Karl-Heinz Altmann* (ETH, Zürich, Svájc): The chemistry and chemical biology of epothilones – Important lead structures for anticancer drug discovery;
Dr. Jürg Zimmermann (Novartis Pharma AG, Basel, Svájc): The discovery of gleevec – a new treatment for chronic myeloid leucemia (CLM)
- **2004. december 1.** *Prof. Gerhard Spiteller* (Organische Chemie, Universität Bayreuth, Németország): Lipid peroxidation (LPO) studied by mass spectrometry
- **2004. december 1.** *Dr. Sonja Nikolič* (Rudjer Boskovič Institute, Zágráb, Szlovénia): Graphical matrices in chemistry
- **2005. február 2.** *Dr. J. Sabine Becker* (Central Division of Analytical Chemistry, Research Centre Jülich, Németország): Progress in determination of long-lived radionuclides by mass spectrometry
- **2005. május 17.** *Prof. Ian S. Butler* (McGill University, Montreal, Kanada): Vibrational spectra of solids at high pressure
- **2005. május 19.** *Prof. Francois Diederich* (Chemistry and Applied Biosciences, ETH, Zürich, Svájc): Organic nanoscale chemistry: from switches with large molecular motions to gene transfection, and self-assembly on nanopatterned surfaces
- **2005. június 9.** *Prof. Oláh György* (University of Southern California, Locker Hydrocarbon Research Institute, Los Angeles, USA): Büszke vagyok kémikus létemre.

Oláh György Nobel-díjas kémikus nagy sikerű előadást tartott. A szép számú hallgatóság élvezettel figyelte a világhírű tudós előadását, ami az Amerikai Egyesült Államok egyik legmagasabb tudományos elismerésének megfelelő Priestley-érem átadásának alkalmából elhangzottakat is felelevenítette. Az előadó kiemelte a tudás megalapozásának fontosságát. Az

alapokat ő részben a Budapesti Piarista Gimnáziumban, részben a Budapesti Műszaki Egyetemen sajátította el. Szívesen emlékezett gimnáziumi fizikatanárára, Öveges Józsefre és egyetemi professzorára, Zemplén Gézára. Szép emlékeket őriz a hajdani Központi Kémiai Kutatóintézetéről is, még annak Hungária körúti telephelyéről. A szerves fluor- és bórvegyületek kémiájával még itthon kezdett el foglalkozni, s ez a munka vezetett el a „mágikus savak”-hoz, a karbokationokhoz, a Nobel-díjjal koronázott felfedezésekhez.

Oláh György élete a kémia, amit mindig nagy hivatástudattal és örömmel művelt és művel ma is. Úgy látja, hogy átmeneti háttérbe szorítás után a kémia ismét feljövőben van, alapvetően fontos szerepet tölt be a fizika, az élettudományok és az anyagtudományok, de sok más tudományterület összehangolásában.

A tüzelőanyagcellákkal foglalkozó munkáját elismerik, jelentős részben éppen az alternatív energiaforrások keresésével, a fosszilis alapanyagok (kőolaj, földgáz, szén) kiváltására, a metán, metanol, ill. a széndioxid, dimetiléter, etilén alapú kémia megteremtésére irányuló kutatásait díjazták a Priestley-éremmel.

Oláh György mindig szívesen látogat Magyarországra, igyekszik a hazai tudományos életet segíteni. Számos fiatal és idősebb kollégának segíti pályáját ösztöndíjas tanulmányutak révén, figyelemmel kíséri a hazai tudományos kutatások helyzetét.

Átfogó tudása, lényeglátó, logikus gondolkodása, humanizmusa szerénységgel párosul. Igazi, példaadó egyéniség, akit nagy öröm volt látni, hallgatni, tudva, hogy pályája ebből az országból, sőt ebből az intézetből indult.

ÉRTEKEZLETEK**Az MTA KK Igazgatótanácsának ülései****2003. október 27.***Napirend:*

1. A Kutatóközpont gazdálkodásának helyzete a 2003. III. negyedéves adatok tükrében
2. Állásfoglalás a Központ főigazgatói és igazgatói pályázataival kapcsolatosan
3. A Központ Szervezeti és Működési Szabályzatának tervezete
4. Egyebek

2004. április 13.*Napirend:*

1. Tájékoztató a Kutatóközpont 2003. évi gazdálkodásáról és a 2004. évi működési tervről
2. Az AKT-által elfogadott Kutatóközponti SzMSz-nek megfelelő szervezeti intézkedések, ill. szabályozások megvitatása
3. Tájékoztató a Kutatóközpont 2004. évi rendezvényeinek terveiről; javaslatok a Pro Arte Chemica díjaira
4. Egyebek

2004. december 13.*Napirend:*

1. A Kutatóközpont 2004. évi gazdálkodásának főbb jellemzői, várható adatai, eredményei
2. A Kutatóközpont gazdálkodásának 2005. évi várható körülményei
3. Egyebek

A Tudományos Osztályvezetői Tanács ülései**2004. április 5.***Napirend:*

1. Tájékoztató a Kémiai Intézet 2003. évi gazdálkodásáról és a 2004. évi működési tervről
2. Tájékoztató a Kutatóközpont 2004. évi rendezvényeiről
3. Egyebek

2004. december 3.*Napirend:*

1. A Kutatóközpont 2004. évi gazdálkodásának főbb jellemzői, várható adatai, eredményei
2. A Kutatóközpont gazdálkodásának 2005. évi várható körülményei
3. Egyebek

Kémiai Kutatóközpont Kémiai Intézetének tudományos vezetői értekezletei:**2003. október 29.***Napirend:*

1. A Kutatóközpont és a Kémiai Intézet gazdálkodásának helyzete a 2003. III. negyedéves adatok tükrében
2. A 2004. évre való felkészülés aktuális feladatai
3. Egyebek

Kémiai Kutatóközpont Biomolekuláris Kémiai Intézetének tudományos vezetői értekezletei:**2004. május 13.***Napirend:*

1. Tájékoztatás az Intézet gazdasági helyzetéről a 2004. első negyedévi adatok alapján
2. Feladatok a Kémiai Kutatóközpont új Szervezeti és Működési Szabályzatának elfogadása után

2004. szeptember 23.*Napirend:*

1. Tájékoztató az Intézet és osztályai gazdasági helyzetéről
2. Tájékoztatás az Intézet igazgatói pályázatának meghirdetéséről
3. Egyebek

Kémiai Kutatóközpont Felületkémiai és Katalízis Intézetének tudományos vezetői értekezletei:**2004. május 13.***Napirend:*

1. Tájékoztatás az Intézet gazdasági helyzetéről a 2004. első negyedévi adatok alapján
2. Feladatok a Kémiai Kutatóközpont új Szervezeti és Működési Szabályzatának elfogadása után

2004. szeptember 23*Napirend:*

1. Tájékoztató az Intézet és osztályai gazdasági helyzetéről
2. Tájékoztatás az Intézet igazgatói pályázatának meghirdetéséről
3. Egyebek

Kémiai Kutatóközpont Szerkezeti Kémiai Intézetének tudományos vezetői értekezletei:**2004. május 11.***Napirend:*

1. Tájékoztatás az Intézet gazdasági helyzetéről a 2004. első negyedévi adatok alapján
2. Feladatok a Kémiai Kutatóközpont új Szervezeti és Működési Szabályzatának elfogadása után

2004. szeptember 16.*Napirend:*

4. Tájékoztató az Intézet és osztályai gazdasági helyzetéről
5. Tájékoztatás az Intézet igazgatói pályázatának meghirdetéséről
6. Egyebek

Kutatói fórumok**2005. április 13.****Az MTA Kémiai Kutatóközpont Szerkezeti Kémiai Intézetének Kutatói Fóruma:***Napirend:*

1. Kubinyi Miklós ismerteti az Intézet igazgatói állásának elnyerésére benyújtott pályázatát.
2. A Fórum titkos szavazással történő állásfoglalása a pályázat ügyében.

A vélemény-nyilvánító szavazás végeredménye:

A Fórum tagjainak száma: 67,

jelenlévő, szavazásra jogosult kutatók száma:	43 (64,18 %)
szavazott:	43 (100 %)
érvényes:	43 (100 %)

Kubinyi Miklós pályázatát támogatta:	36 fő (83,72 %)
nem támogatta:	2 fő (4,65 %)
tartózkodott:	5 fő (11,63 %)

2005. április 13.**Az MTA Kémiai Kutatóközpont Felületkémiai és Katalízis Intézetének Kutatói Értekezlete:***Napirend:*

Pálinkás Gábor főigazgató tájékoztatót tart a kutatóintézet aktuális helyzetéről.

2005. április 14.**Az MTA Kémiai Kutatóközpont Biomolekuláris Kémiai Intézetének Kutatói Fóruma:***Napirend:*

1. Hajós György ismerteti az Intézet igazgatói állásának elnyerésére benyújtott pályázatát.
2. A Fórum titkos szavazással történő állásfoglalása a pályázat ügyében.

A vélemény-nyilvánító szavazás végeredménye:

A Fórum tagjainak száma: 67,

jelenlévő, szavazásra jogosult kutatók száma:	47 (70,15 %)
szavazott:	47 (100 %)
érvényes:	47 (100 %)

Hajós György pályázatát támogatta:	42 fő (89,36 %)
nem támogatta:	3 fő (6,38 %)
tartózkodott:	2 fő (4,26 %)

PUBLIKÁCIÓS ADATOK 2004.**A 2002-2004. évi publikációs pontok szervezeti egységenként**

Szervezeti egység száma, vezető neve		Pontszámok			
		2002	2003	2004	2002-2004
1.11.	Jablonkai I.	4,158	10,193	0,657	15,008
1.12.	Szammer J.	0,990	0,000	0,000	0,990
1.2.	Hajós Gy.	13,608	10,882	2,744	27,234
1.31.	Dörnyei G.	2,110	5,483	4,616	12,209
1.4.	Simonyi M.	24,588	33,054	23,883	81,525
1.5.	Kardos J.	14,234	17,606	19,153	50,993
1.61.	Vereczkey L.	12,424	6,721	5,564	24,709
1.62.	Jakus J.	14,825	11,056	9,216	35,097
1.8.	Fügedi P.	0,000	0,904	0,000	0,904
BKI		86,937	95,899	65,833	248,669
2.1.	Simándi L.	13,602	5,132	2,020	20,754
2.2.	Kálmán E.	9,484	11,115	11,753	32,352
2.3.	Margitfalvi J.	5,615	12,900	6,900	25,415
2.4.	Valyon J	25,563	16,566	12,296	54,425
2.5.	Guczi L.			3,314	3,314
FKI		54,264	45,713	36,283	136,260
3.11.	Rockenbauer A.	3,517	3,907	4,858	12,282
3.12.	Vidóczy T.	1,742	7,596	8,686	24,594
3.12.	Biczók L.	6,570			
3.13.	Gács I.-né	4,403	3,624	4,095	12,122
3.14.	Keresztury G.	5,426	2,720	4,565	12,711
3.2.	Dóbbé S.	1,748	5,017	8,757	15,522
3.31.	Kálmán A.	9,763	21,457	21,448	52,668
3.32., 3.33.	Radnai T., Grósz T.	5,424	6,702	7,488	19,614
3.4.	Vékey K.	10,378	27,857	17,178	55,413
3.5.	Pápai I.	17,354	23,216	25,789	66,359
SZKI		66,325	102,096	102,864	271,285
	Összesen:	207,526	243,708	204,980	656,214

Az adatok lezárva: 2005. június 12.

A 2003-ban 8, illetve ennél több független idézetet kapott cikkek

Ohtaki H., **Radnai T.**

Structure and dynamics of hydrated ions
 CHEMICAL REVIEWS, 93 (3) : 1157-1204 (1993)
 73 független idézet

Dongré A.R., Jones J.L., **Somogyi Á.**, Wysocki V.H.

Influence of peptide composition, gas-phase basicity, and chemical modification on fragmentation efficiency: evidence for the mobile proton model
 JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY, 118 : 8365-8374 (1996)
 21 független idézet

Antal M.J.J.R., **Várhegyi G.**

Cellulose pyrolysis kinetics: the current state of knowledge
 INDUSTRIAL & ENGINEERING CHEMISTRY RESEARCH, 34 : 703-717 (1995)
 20 független idézet

Ángyán J.G., Loos M., **Mayer I.**

Covalent bond orders and atomic valence indices in the topological theory of atoms in molecules
 JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY, 98 : 5244-5248 (1994)
 16 független idézet

Dongré A.R., **Somogyi Á.**, Wysocki V.H.

Surface-induced dissociation: an effective tool to probe structure, energetics and fragmentation mechanisms of protonated peptides
 JOURNAL OF MASS SPECTROMETRY, 31 : 339-350 (1996)
 12 független idézet

Vékey K., Czira G.

Distinction of amino acid enantiomers based on the basicity of their dimers
 ANALYTICAL CHEMISTRY, 69 : 1700-1705 (1997)
 11 független idézet

McCormack A.L., **Somogyi Á.**, Dongre A.R., Wysocki V.H.

Fragmentation of protonated peptides: Surface-induced dissociation conjunction with a quantum mechanical approach
 ANALYTICAL CHEMISTRY, 65 : 2859-2872 (1993)
 11 független idézet

Rockenbauer A., **Korecz L.**

Automatic computer simulations of ESR spectra
 APPLIED MAGNETIC RESONANCE, 10 : 29-43 (1996)
 10 független idézet

Steren C.A., van Willigen H., **Biczók L.**, Gupta N., Linschitz H.
 C60 as a photocatalyst of electron-transfer processes: reactions of triplet C60 with chloranil, perylene, and tritolyamine studied by flash photolysis and FT-EPR
 JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY, 100 : 8920-8926 (1996)
 10 független idézet

Drahoš L., Vékey K.
 How closely related are the effective and the real temperature
 JOURNAL OF MASS SPECTROMETRY, 34 : 79-84 (1999)
 9 független idézet

Pekker S., Salvétat J.P., **Jakab E.**, Bonard J.M., Forró L.
 Hydrogenation of carbon nanotubes and graphite in liquid ammonia
 JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 105 : 7938-7943 (2001)
 9 független idézet

Vértes A., **Irinyi G.**, Gijbels R.
 Hydrodynamic model of matrix-assisted laser-desorption mass-spectrometry
 ANALYTICAL CHEMISTRY, 65 (17) : 2389-2393 (1993)
 9 független idézet

Gehrke T., **Telegdi J.**, Thierry D., Sand W.
 Importance of extracellular polymeric substances from Thiobacillus ferrooxidans for bioleaching
 APPLIED AND ENVIRONMENTAL MICROBIOLOGY, 64 : 2743-2747 (1998)
 8 független idézet

Lendvay Gy., Viskolcz B.
 Ab initio studies of the isomerization and decomposition reactions of the 1-butoxy radical
 JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A, 102 : 10777-10786 (1998)
 8 független idézet

Olive G., Mercier A., Le Moigne F., **Rockenbauer A.**, Tordo P.
 2-Ethoxycarbonyl-2-methyl-3,4-dihydro-2H-pyrrole-1-oxide: Evaluation of the spin trapping properties
 FREE RADICAL BIOLOGY AND MEDICINE, 28 : 403-408 (2000)
 8 független idézet

2004. ÉVI NYERTES PÁLYÁZATOK

Kutatási pályázatok

- **Transzporter Explorer**
Témavezető: Kardos Julianna
Pályázat típusa, száma: GVOP 3.3.3.- 2004-05-0068/3.0
Elnyert összeg: 72 169 650 Ft
- **Uracil-DNS endonukleáz molekuláris biológiai alkalmazásai**
Témavezető: Sági Gyula
Pályázat típusa, száma: GVOP-3.1.1.-2004-05-0412/3.0
Elnyert összeg: 15 000 000 Ft
- **Hatóanyagtervezés népegészségügyileg kiemelten fontos megbetegedésekben szerepet játszó validált célmolekulák alapján**
Témavezető: Hajós György
Pályázat típusa, száma: NKFP 1A/005/2004
Elnyert összeg: 152 800 Ft
- **Daganatok metasztázisát gátló heparánáz inhibitorok**
Témavezető: Fügedi Péter
Pályázat típusa, száma: OMAA 52ÖU3
Elnyert összeg: 2 000 000 Ft
- **Katalitikus technológiák környezetterhelésének csökkentése új, hordozós nikkell-katalizátorok kifejlesztésével**
Témavezető: Valyon József
Pályázat típusa, száma: GVOP-3.1.1.-2004-05-0505/3.0
Elnyert összeg: 25 400 000 Ft
- **Új, szennyvíz- és iszapkezelésre alkalmas adalékanyag előállítása a rudabányai vasérc-dúsító meddőjének kémiai feldolgozásával**
Témavezető: Valyon József
Pályázat típusa, száma: GVOP-3.1.1.-2004-05-0276/3.0
Elnyert összeg: 37 800 000 Ft
- **Alumínium bázisú nanokompozit gyártástechnológiai**
Témavezető: Kálmán Erika
Pályázat típusa, száma: GVOP-3.1.1.-2004-05-0417/3.0
Elnyert összeg: 59 377 200 Ft
- **Nanoferrit**
Témavezető: Tolnai Gyula
Pályázat típusa, száma: NKFP 3A/004/2004
Elnyert összeg: 37 800 000 Ft
- **Funkcionált határfelületek kifejlesztése és alkalmazása specifikus biokémiai és kémiai rendszerekben**

Témavezető: Kálmán Erika
Pályázat típusa, száma: NKFP 3A/058/2004
Elnyert összeg: 42 800 000 Ft

- **Funkcionális szén nanocső fejlesztése**
Témavezető: Kármánné Herr Franciska
Pályázat típusa, száma: OM-00095/2004
Elnyert összeg: 4 000 000 Ft
- **Expanding the Durability of Stainless Steel Under Microbiological Conditions**
Témavezető: Telegdi Judit
Pályázat típusa, száma: EU-FP6 ECSC 7210
Elnyert összeg: 37 000 EUR - megközelítőleg 9 065 000 Ft
- **Hungarian Network of Excellent Centers on Nanosciences**
Témavezető: Kálmán Erika
Pályázat típusa, száma: EU-FP6 INCO-CT-2004-510358/HUNN
Elnyert összeg: 145 000 EUR - megközelítőleg 35 525 000 Ft
- **Polycond**
Témavezető: Kálmán Erika
Pályázat típusa, száma: EU-FP6 IP-515835-2/Polycond
Elnyert összeg: 280 181 EUR - megközelítőleg 68 644 345 Ft
- **Chiral Expression and Transfer at the Nanoscale**
Témavezető: Telegdi Judit
Pályázat típusa, száma: EU-FP6 MRTN-CT-2004-512161/CHEXTAN
Elnyert összeg: 204 606 EUR - megközelítőleg 50 128 470 Ft
- **Stratosphere-Climate Links with Emphasis on the UTLS-SCOUTO3**
Témavezető: Dóbbé Sándor
Pályázat típusa, száma: 004-505390-SCO
Elnyert összeg: 59 000 EUR - megközelítőleg 14 550 000 Ft
- **Veszélyes hulladékok plazmatechnológiás ártalmatlanításának hazai megalapozása**
Témavezető: Mohai Ilona
Pályázat típusa, száma: OM-00547/2004
Elnyert összeg: 39 960 000 Ft
- **Környezetvédelmi laboratórium akkreditálása**
Témavezető: Horváth Tibor
Pályázat típusa, száma: OMFB-00221/2004
Elnyert összeg: 4 230 000 Ft
- **Kombinált félüzemi eljárás kifejlesztése**
Témavezető: Mink György
Pályázat típusa, száma: OMFB-00318/2004
Elnyert összeg: 24 990 000 Ft

Műszerbeszerzést támogató pályázatok

- **Nagyértékű műszeregyüttesek zavar és túlfeszültség védelme, stabil működtetése**
Témavezető: Nyikos Lajos
Pályázat típusa, száma: GVOP-3.2.1.-2004-04-0063/3.0
Elnyert összeg: 9 282 000 Ft
- **Szerves vegyületek, fémkomplexek, peptidek és fehérjék elemi összetételének meghatározása elemanalizátorral**
Témavezető: Riedl Zsuzsa
Pályázat típusa, száma: GVOP-3.2.1.-2004-04-0311/3.0
Elnyert összeg: 11 700 000 Ft
- **Hystron Nanoindentátor Modernizációja (HysMod)i**
Témavezető: Nagy Péter
Pályázat típusa, száma: GVOP-3.2.1.-2004-04-0061/3.0
Elnyert összeg: 9 971 850 Ft
- **Mérőrendszer kialakítása katalitikus anyagtranszport-folyamatok komplex kinetikai vizsgálatára**
Témavezető: Valyon József
Pályázat típusa, száma: GVOP-3.2.1.-2004-04-0277/3.0
Elnyert összeg: 72 249 000 Ft
- **Biomolekulák funkcionális vizsgálata új típusú tömegspektrométerrel**
Témavezető: Vékey Károly
Pályázat típusa, száma: GVOP-3.2.1.-2004-04-0059/3.0
Elnyert összeg: 100 000 000 Ft
- **Lézerindukált kémiai folyamatok időfelbontásos spektroszkópiája**
Témavezető: Nemes László
Pályázat típusa, száma: GVOP-3.2.1.-2004-04-0059/3.0
Elnyert összeg: 12 600 000 Ft
- **Mágneses magrezonancia spektrométer beszerzése szilárd fázisú szerkezetvizsgálati célokra a felületkémiában**
Témavezető: Tárkányi Gábor
Pályázat típusa, száma: GVOP-3.2.1.-2004-04-0210/3.0
Elnyert összeg: 100 000 000 Ft
- **ENDOR spektrométer beszerzése**
Témavezető: Rockenbauer Antal
Pályázat típusa, száma: GVOP-3.2.1.-2004-04-0214/3.0
Elnyert összeg: 24 840 000 Ft
- **Korszerű orvos-diagnosztikai módszerek kidolgozása kétdimenziós multidetektoros infravörös mikroszkópiával**
Témavezető: Mink János
Pályázat típusa, száma: GVOP-3.2.1.-2004-04-0280/3.0

Elnyert összeg: 64 260 000 Ft

- **Korszerű fehérjeszerkezet (műszerbeszerzés)**

Témavezető: Czugler Mátyás

Pályázat típusa, száma: OM00222/2004

Elnyert összeg: 49 900 000 Ft

- **Egycsigás extruder / belső keverő beszerzése**

Témavezető: Pukánszky Béla

Pályázat típusa, száma: GVOP-3.2.1.-2004-04-0133/3.0

Elnyert összeg: 27 000 000 Ft

ÚJ KÖNYVEK

A Tiszának és környezetének állapota a 2000. évi rendkívüli vízszennyezések után: A Környezetvédelmi Minisztérium "Tiszai vízgyűjtő és környezeti állapota" című pályázatának (2000–2003) pályamunkáiból készült tanulmányok

szerk. Kálmán Erika, Csanády Andrásné

Bay Zoltán Alapítvány Anyagtudományi és Technológiai Intézete, 2003.

ATKINS, Peter: Atkins' Physical Chemistry

Oxford Univ. Press, 2002

BÁRÁNY Sándor: Polymerek Diszperz Rendszerekben

Akadémiai Kiadó, 2001

BATA Imre: Kombinatorikus Kémia

Akadémiai Kiadó, 2000

Biomaterials in Orthopedics

ed. Michael J. Yaszemski et al.

Marcel Dekker, 2003

BioNMR in Drug Research

ed. Oliver Zerbe

Wiley-VCH, 2003

Calcium and its Role in Biology

Helmut Sigel

Marcel Dekker, 1984

Chemoinformatics: Textbook

ed. Johann Gasteiger, Thomas Engel

Wiley-VCH, 2003

CLAYTON, Donald Delbert: Principles of Stellar Evolution and Nucleosynthesis: with a New Preface

McGraw-Hill, 1983

CRAMER, Christopher J.: Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models

Wiley, 2002

CSÁKVÁRI Béla: Az Elektronhiányos Cluster-rendszerek Kutatásának Újabb Irányzatai és Alkalmazásuk a Fullerénkutatásban

Akadémiai Kiadó, 2003

CSÁKVÁRI Béla: A P-mezőbeli Elemek Allotrop Szerkezeteinek Analógiája a Wade-féle Clusterelmélet Alapján

Akadémiai Kiadó, 2004

DASH, J.G.: Films on solid surfaces: The Physics and Chemistry of Physical Adsorption

Academic Press, 1975

Drug Metabolizing Enzymes : Cytochrome P450 and Other Enzymes in Drug Discovery and Development

ed.: Jae S. Lee, R. Scott Obach, Michael B. Fisher
Fontis Media ; Marcel Dekker, 2003

Encyclopedia of Nanoscience and Nanotechnology: Vol.1-10.

ed. Hari Singh Nalwa
American Scientific Publishers, 2004

Euro Ceramics VIII : Proceedings of the 8th Conference and Exhibition of the European Ceramic Society, Istanbul, Turkey, June 29-July 29, 2003 : eighth ECERS : Part 1-3.

ed. Hasan Mandal, Lütfi Övecoglu
Trans Tech Publications Ltd., 2004

FEHÉR Miklós: A Kvantumkémia Alapjai és Alkalmazásuk
Műszaki Kvk., 2002

FUHRHOP, Jürgen-Hinrich: Organic Synthesis : Concepts and Methods
Wiley-VCH, 2003

GERSTEN, Joel I.: The Physics and Chemistry of Materials
John Wiley and Sons, 2001

GOLDSCHMIDT, Arthur: BASF Handbook on Basics of Coating Technology
Vincentz Network, 2003

HANCSÓK Jenő: Korszerű Motor-és Sugárhajtómű Üzemanyagok : I. Motorbenzinek
Hancsók Jenő
Veszprémi Egy. K., 1997

HANCSÓK Jenő: Korszerű Motor-és Sugárhajtómű Üzemanyagok : II. Dízelgázolajok
Hancsók Jenő
Veszprémi Egy. K., 1999

HANCSÓK Jenő: Korszerű Motor-és Sugárhajtómű Üzemanyagok : III. Alternatív motorhajtóolajok
Hancsók Jenő
Veszprémi Egy. K., 2004

Handbook of Aqueous Solubility Data
ed. Samuel H. Yalkowsky, Yan He
CRC Press, 2003

Handbook of Zeolite Science and Technology
ed. Scott M. Auerbach
Marcel Dekker, 2003

HOMONNAY Zoltán: Perovszkitok és Zzármazékaik Mössbauer-spektroszkópiája
Akadémiai Kiadó, 2004

HORÁNYI György-LÁNG Győző: Perklórátzennyezés
Akadémiai Kiadó, 2004

ILISZ István: Nagyhatékonyságú Oxidációs Eljárások a Környezeti Kémiában
Akadémiai Kiadó, 2000

In-situ Spectroscopy of Catalysts
ed. Bert M. Weckhuysen
American Scientific Publishers, 2004

KALINOWSKI, Hans-Otto: NMR Spectroscopy of the Non-metallic Elements
John Wiley and Sons, 1997

KEHIAIAN, Henry V.: CRC Handbook of Thermophysical and Thermochemical Data
CRC Press, 1994

KESZEI Ernő: Femtokémia: A Pikoszekundumnál Rövidebb Reakciók Kinetikája
Akadémiai Kiadó, 2000

KURTZ, Steven M.: The UHMWPE handbook : Ultra-high Molecular Weight Polyethylene
in Total Joint Replacement
Academic Press, 2004

LUO, Yu-Ran: Handbook of Bond Dissociation Energies in Organic Compounds
CRC Press, 2003

MAYER, Istvan: Simple Theorems, Proofs, and Derivations in Quantum Chemistry
Kluwer Academic; Plenum, 2003

NAGY László: Biológiaiilag Aktív Ón(IV) Organikus Komplexek
Akadémiai Kiadó, 2003

NÖLTE, Joachim: ICP Emission Spectroscopy: A Practical Guide
Wiley-VCH, 2003

PEREZ, Nestor: Electrochemistry and Corrosion Science
Kluwer Academic, 2004

Rapid Cycle Real-time PCR: Methods and Applications: Genetics and Oncology
eds. Wolfgang Dietmaier, Carl Wittwer, Natarajan Sivasubramanian
Springer, 2002

SCHNEIDER, Hans-Jörg: Principles and Methods in Supramolecular Chemistry
Wiley, 2000

Springer Handbook of Nanotechnology
ed. Bharat Bhushan
Springer, 2004

Statisztikai Elemzés a STATISTICA Programmal
szerk. Kemény Sándor et al
Műegyetemi Kiadó, 2004

STERNE, Theodore Eugene: An Introduction to Celestial Mechanics
Interscience, 1960

TAYLOR, Maureen: Introduction to Glycobiology
Oxford Univ. Press, 2004

VESZPRÉMI Tamás: Karbének és Szililének Stabilitása és Stabilizálhatósága
Akadémiai Kiadó, 2001

ZHANG, Jin Z.: Self-Assembled Nanostructures
Kluwer Academic, 2003

SAJTÓSZEMLE**CHEMICAL & ENGINEERING NEWS**

2004. April 5.

Mitch Jacoby

ACS AWARDS**OLAH WINS 2005 PRIESTLEY MEDAL****Nobel Laureate's research driven by questions of future global energy**

George A. Olah, the Donald P. & Katherine B. Loker Distinguished Professor of Organic Chemistry at the University of Southern California (USC), has been named the 2005 Priestley Medalist. The annual award, which recognizes distinguished services to chemistry, is the American Chemical Society's highest honor.

Olah, who is director of USC's Loker Hydrocarbon Research Institute, is known throughout the chemistry community for his contributions to organic synthesis and mechanistic chemistry and most notably for his work in carbocation chemistry, for which he won the 1994 Nobel Prize in Chemistry.



"I'm very appreciative of the honor," Olah said at last week's ACS national meeting in Anaheim, Calif., where the announcement was made. The 76-year-old chemist is particularly pleased, he remarked, "because the award acknowledges work done over a long period of time."

Indeed, during the course of a chemistry career that's now in its sixth decade, Olah and coworkers have made numerous advances in fundamental and applied chemistry. The USC researcher is well known, for example, for developing a variety of superacids--combinations of Lewis and Brønsted acids such as HF-SbF₅--that are billions of times stronger than sulfuric acid. Using superacids as solvents for alkyl halides and in ion-generating reactions, Olah developed a technique to extend the lifetimes of carbocations and other typically short-lived ionic species so they could be probed directly using nuclear magnetic resonance spectroscopy, X-ray photoelectron spectroscopy, and other methods.

"The techniques pioneered by Olah for the direct spectroscopic observation of carbocations are now being applied in organometallic, synthetic organic, bioorganic, and industrial chemistry," remarks University of Utah chemistry professor Peter J. Stang. He adds that Olah's work was the inspiration that led to thousands of publications from numerous laboratories worldwide, "making the study of reactive intermediates one of the most active fields of investigation in all of chemistry in the last 40 years."

In addition to pioneering work with superacids, Olah is recognized for developing novel electrophiles, including doubly electron-deficient species that have played key roles in Friedel-Crafts alkylations and other reactions. And the USC scientist is credited with developing safe and environmentally benign procedures for preparing high-octane fuels.

For years, Olah's research program has been driven by questions regarding future global energy sources. Unlike some proponents of the hydrogen economy, Olah sees great advantages in using methanol--not hydrogen--to store and dispense energy.

Working toward his vision of a "methanol economy," Olah and coworkers at USC and the Jet Propulsion Laboratory in Pasadena, Calif., have developed a direct methanol fuel cell for generating electrical power from methanol without first producing hydrogen.

More than 50 years after beginning a professorship at Budapest Technical University in Hungary, Olah remains active and enthusiastic about chemistry research. "The work I'm doing now may be some of the most interesting and perhaps most significant work I've ever done," he said.

BLIKK EXTRA

2005. március 27.

Fizetett hirdetés jelent meg a Flavin7-ről. A szer gyártója sikeres együttműködést tart fent Mink Jánossal, aki a bőr- és hajdiagnosztikai módszer feltalálója. Ezzel a vizsgálati módszerrel néhány hajszál segítségével megmérhető, hogy mennyi káros anyag halmozódott fel a szervezetben, amiből következtetni lehet az esetleges daganatos megbetegedésre.

CHEMICAL & ENGINEERING NEWS

2004. October 18.

Celia Henry

NO FUSS, NO MUSS MASS SPEC**New technique allows direct mass spectrometry at ambient conditions**

A cikk a deszorpciós elektronspray ionizációval (desorption electrospray ionization (DESI)) folytatott kísérletekről számol be. A módszer kidolgozója Graham Cooks, az indianapolisi Prudue Egyetem professzora. A DESI alkalmazásával lehetőség nyílik különböző, egyszerű felületek – ruha, bőr – vizsgálatára, ezáltal óriási lehetőség kerül a törvényszéki nyomozás, a biztonságtechnika kezébe. Takáts Zoltán, aki Cooks professzornál post doktori ösztöndíját tölti, részvételével a legkülönbözőbb vegyületek vizsgálata folyik, beleértve peptideket és fehérjéket is. A kutatóknak sikerült a bőrfelszínen különböző szerves molekulákat kimutatni.

ÉLET ÉS TUDOMÁNY

2004. november 12.

Kerner István

Molekuláris építészet

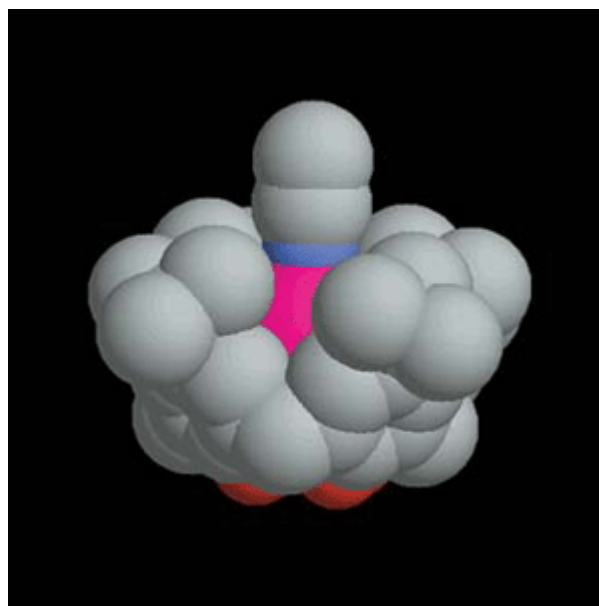
A mögöttünk hagyott században a vegyész a természetes anyagokat elkülönítette (izolálta), szerkezetüket meghatározta és - a kémiai szintézist szinte művészté fejlesztve - maga is szintetizálta. Századunkban a kémia új irányt vett; molekuláris halmazokat: szupramolekulákat tervezhetünk, s ezeket elemeiből összerakhatjuk. A "molekulamérnökség" kialakulásáról, eszközeiről és a benne rejlő lehetőségekről beszélgetünk Kálmán Erika vegyészprofesszorral.

Mi kellett ahhoz, hogy a molekuláris építészet talpra álljon, a laboratóriumi "rácsoválkozásból" gyakorlattá váljon?

A XX. század végén - az élet kémiai folyamataiból ellesztett algoritmusokat, megoldásokat hasznosítva - létrejött a kémia egy új területe: a szupramolekuláris kémia, a molekulák halmazainak kémiája, más néven a nanokémia. A nanokémiától egyenes út vezetett a molekuláris építészethez; módszerével nano méretű molekuláris eszközök és az élő anyag bizonyos tulajdonságaival felruházott komplex anyagok állíthatók elő. Ehhez, persze, számos dolog együttesére volt szükség. Az életfolyamatok kémiai alapjainak feltárásán kívül egyebek közt a molekuláris önszerveződés és alkalmazkodóképesség jelenségének a felismerésére.

Mi szükség az új "mérnökségre"? Hiszen bármely, a kémiai kötés szabályai szerint felrajzolt molekula szintetizálható.

Valóban. Ám úgy tűnik, hogy a hagyományos építési mód olykor már megközelíti lehetősége határait. Tudomásom szerint a két legnagyobb olyan molekula, amelynek atomjait kovalens kémiai kötés tartja össze, a Brevetoxin B és a Palytoxin. Mindkettő idegméreg. A Palytoxint bizonyos algafajták termelik, és hajdan a hawaii bennszülöttek a lándzsáik hegyét kenték be vele. Teljes szintézisét 1989-ben Y. Kishi, a Harvard Egyetem kémikusa valósította meg. A Brevetoxin B molekulát ugyancsak algafajták termelik; ezek elszaporodva vörösre és barnára festik az óceánok partjainál a víz felületét, s a halak tömeges pusztulását okozzák. A Brevetoxin B molekulát a Kaliforniai Egyetem kémikusa, K.C. Nicolau és munkatársai több mint százhusz lépésben, tizenkét év alatt szintetizálták, a munkával 1995-ben végeztek. Ez a kutatók kitartását és elszántságát dicséri, de egyszersmind jelzi, hogy a kovalens szintézissel való molekulaépítés egy bizonyos mérethatáron túl már nehezen járható út. Szerencsére, a természetben fellelhető példák segítségünkre vannak a molekulaépítés dimenzióinak növelésében.



Kalixarén vendégmolekulával

Mi jellemzi az élő anyag molekulahalmazait?

A rendezettség, a szervezettség, az önjavítás, a reprodukálás, a növekedés és az alkalmazkodás képessége - hogy csak a legfontosabbakat említsem. Persze, külön-külön e tulajdonságok egyike sem elégséges az élet megjelenéséhez, az élethez ezek együttes jelenléte - és alighanem sok minden más is - szükségeltetik.

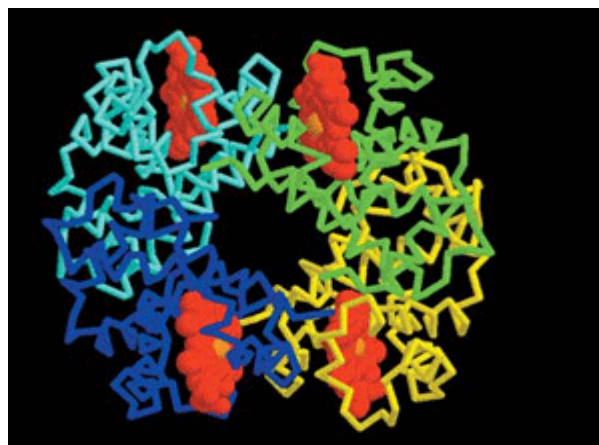
Hogyan jelenik meg mindez a molekulahalmazok szintjén?

A rendezettség mindig valamilyen szerkezetet jelent; a molekulák az élő anyagban nem véletlenszerűen, hanem feladatukhoz igazodóan helyezkednek el. Szervezettségen azokat a mechanizmusokat, algoritmusokat értem, amelyek meghatározzák a halmaz tulajdonságait. Általában jellemző a biológiai szupramolekulákra, hogy üregeket – zsebeket - tartalmaznak, s hogy az üregek váza, alakja és mérete flexibilis. Nyílásaikban és belső felületükön oxigén-, nitrogén- vagy kénatomok

helyezkednek el, ezek mind erősen vonzódnak a fémionokhoz és más molekulák (hidroxidjainak vagy aminjainak) hidrogénjeihez. (Ez az alapja annak, hogy bizonyos molekulák felismerik egymást.)

A zsebes szupramolekulák igen fontos jellemzője, hogy gazdaként viselkednek, vendégmolekulákat fogadnak. A biológiai szupramolekulák közül az egyik legnagyobb zsebe alighanem a ferritinnek van, ez vasat tárol a májban és a lépben. A mintegy 8 nanométer átmérőjű üregét huszonnégy ellipszoiddá csavarodott, egymással nem kovalens kötéssel kapcsolódó fehérjelánc alkotja. Egy-egy fehérjemolekula mintegy 4500 vasatomot képes tárolni. A biológiai szupramolekulák önszerveződéssel alakulnak ki, s meghibásodásuk esetén eredeti állapotuk visszaállítására töreksenek (önjavítóképesek). A baktériumok, a sejtek, de a náluk egyszerűbb szervezetek is reprodukálják magukat: létrehozzák pontos másaikat. Ez az a tulajdonság, amely a leginkább próbára teszi a molekuláris építészeti kutatókat, művelőket. Bizonyos kémiai reakciók terméke visszacsatolással gyorsítja azt a reakciót, amely őt magát létrehozta. Számos kísérlet folyik ma is- az autokatalízis jelenségére alapozva- reprodukcióra képes molekulahalmazok előállítására.

Az élő anyag az örökölt információ alapján, a molekuláiban rögzített minta szerint növekszik, fejlődik. Válaszol környezetére ingereire (például megváltoztatja szerkezetét), s egyre jobban alkalmazkodik környezetéhez...



A négy polipeptidlánc mindegyike egy-egy hemmolekulát (porfirinmolekulát) tartalmaz

Vajon létrehozhat-e az ember valaha is élő anyagot szintetikus módszerekkel?

Ez izgalmas kérdés, nehéz rá válaszolni. Véleményem szerint a szupramolekuláris kémia fejlődése valószínűleg elvezet az élet eredetének megértéséhez. Az említett tulajdonságok egyikével, másikával rendelkező anyagokat előállíthatunk, s ez az emberiséget egy újabb technikai forradalom küszöbéhez vezetheti. Az úgynevezett intelligens anyagok fejlesztése területén már eddig is számos eredmény született.

Az élő anyag molekuláris szervezettségének vizsgálata során megismert szerkezetek előállítása 1967-ben a klasszikus - kovalens kémiai kötésekkel eredményező - szintézis módszereivel indult meg. Charles Pedersen, az amerikai du Pont cég vegyésze egy szintézis melléktermékeként egy tizennyolc oldalú, hat oxigénatomot és két benzolgyűrűt tartalmazó molekulát nyert, ezt aztán később koronaéternek nevezte el. Pedersen azt tapasztalta, hogy a benzolban egyébként nem oldódó káliumpermanganát a koronaéter benzolos oldatában lila színnel oldódik. A jelenséget úgy értelmezte, hogy a káliumion "beesett a molekula centrumába", vagyis gazda-vendég kapcsolat alakult ki a koronaéter-molekula és a káliumion között. Később Pedersen olyan molekulákat is előállított, amelyek nátrium-, kálium- és céziumionok befogadására alkalmasak.

Jean-Marie Lehnnek és munkatársainak sikerült a koronaéterek háromdimenziós analógjait szintetizálni; ionmegkötő képessége tízezerszer jobb, mint a koronaétereké. A szupramolekulák- koronaéter-, a podand-, a kriptand- és szféradmolekulák- előállításában elért eredményeiért Pedersen, Lehn és Cram 1987-ben megosztott Nobel-díjat kapott.

Sok más nagymolekulát is szintetizáltak; konténertípusú gazdamolekulák a porfirinek, a ciklodextrinek és kalixarénmolekulák is. Különösen érdekes a porfirin; ez a csaknem sík szerkezetű molekula negatív töltésű vendégmolekula, például fluoridion megjelenésekor kádformát vesz fel.

Az út a kicsitől a nagy felé - az atomoktól a komplex anyagi rendszerekig, a naprendszerekig, a galaxisokig, az élő és gondolkodó anyagig - az anyag önszerveződésén keresztül vezet. A molekuláris építkezés technológiáját is az önszerveződésre kell alapoznunk.

ÉLET ÉS TUDOMÁNY

2004. október 13.

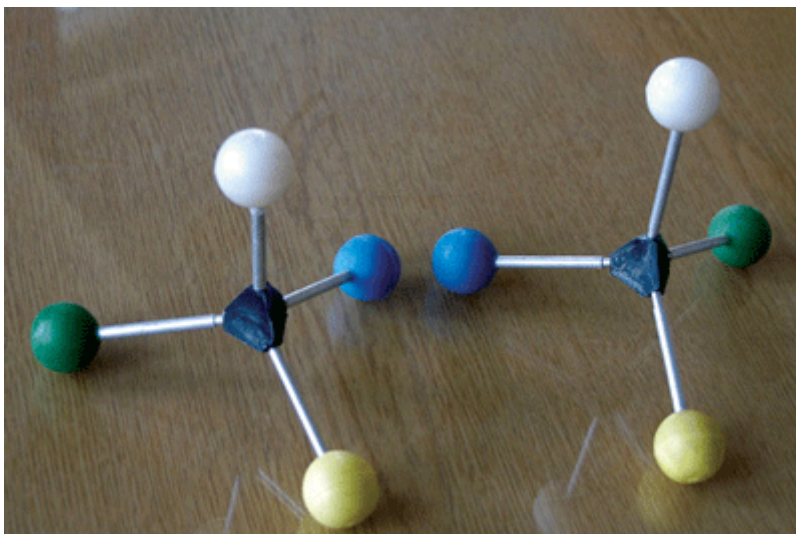
Kerner Tibor

Környezetkímélő gyógyszerkémia

Gyógyszereink jókora része a természet ajándéka. Némelyikhez gyógynövényből főzött teában jutunk hozzá, a gyógynövényből kivont szert többnyire az orvos rendeli. Olykor azonban csak az "ötlet" származik a természettől, a produktum a vegyészt dicséri. A vegyészek a gyógynövényben lévő és hatásosnak bizonyult alkaloidot elkülönítik (izolálják), szerkezetét feltárják, laboratóriumban szintetizálják, végül pedig a szintézist ipari méretűvé nagyítják. A szerves kémia művelői itt, ebben a folyamatban - miközben az ember egészségéért, olykor az életéért munkálkodnak - növényeket és állatokat mentenek (menthetnek) meg, a szó szoros értelmében, a kipusztulástól. Hogyan? - egyebek között erről beszélgetünk Szántay Csaba akadémikussal, a szerves kémia - a királis molekulák aszimmetrikus szintézise - "nagymesterével".

Királis molekula! Kutatási területének egyik kulcsfogalma. Mivel jellemezhetjük?

Maga a kifejezés a görög kheir, kéz jelentésű szóból származik. Jelzőként arra utal, hogy két molekula úgy viszonyul egymáshoz, mint a jobb kezünk a bal kezünkhöz, vagy másképp fogalmazva: mint kép a tükörképéhez. A természetben számos ilyen, tükörképével fedésbe nem hozható (királis) tárgy fordul elő, s ilyeneket maga az ember is létrehoz (ilyen például a jobb- és a balmenetes csavar). Persze, vannak olyan tárgyak is, ilyen például a gömb és a kocka, amelyeknek a tükörképe nem különbözik magától a tárgytól, vele fedésbe hozható. Az ilyen tárgyakra, molekulákra azt mondjuk, hogy akirálisak.



De visszatérve a kérdésére, a királis molekulák kétféle alakban létezhetnek, úgy mint kép, és úgy mint a vele fedésbe nem hozható tükörkép. Az egymással tükörképi viszonyban álló két molekula energiataralma és minden egyéb tulajdonsága tökéletesen azonos, kivéve a síkban poláros fényvel szemben tanúsított megnyilvánulásukat: a fény síkját az egyik jobbra, a másik balra forgatja, de a forgatás mértéke már tökéletesen azonos. És ami talán a legfontosabb: a kép- és a tükörkép-molekula - hasonló tulajdonságú molekulákkal kölcsönhatásba lépve - különféleképpen viselkedik, más-más hatást vált ki.

Miért fontosak számunkra ezek a "kétarcú" molekulák?

Az élő szervezetben a királis molekulák uralkodnak; a fehérjék, a fehérjéket alkotó aminosavak, a cukrok, az enzimek stb. mind-mind királis molekulák. És a kép-tükörkép párosból - máig sem tudjuk pontosan megmagyarázni, hogy ez miért van így - 99 százalékban csak az egyik forma fordul elő.

A királis molekulák világában a kép és a tükörkép biológiai hatása - említettem - nagyon nagy mértékben különbözhet egymástól. Szervezetünk ugyanakkor a molekulának a két változatát

gyakran nagyon "látványosan" megkülönbözteti. Például a limonén - ez egy természetes anyag - citromízű és -illatú, a tükörképe narancsízű és -illatú, az aszpartán édes, tükörképi párja pedig keserű. De így van ez a királis gyógyszermolekulák esetében is; a párosból többnyire csak az egyik jó nekünk, a másik hatástalan a szervezetre, olykor egyenesen halálos mérég.

Mondok egy példát! Az ötvenes évek egyik gyógyszere volt a Contergan (Thalidomide), ezt nyugtatóként hozták forgalomba Németországban. Azok a nők, akik terhességük alatt ezt a gyógyszert szedték, előfordult, hogy kéz vagy láb nélküli, de szellemileg ép gyereket hoztak a világra. Bebizonyosodott, hogy a Contergan a bűnös. A vizsgálatok során kiderült, hogy e gyógyszer gyártásakor keletkező molekulapár közül csak az egyik hatásos fájdalomcsillapító, a másik súlyosan károsítja a magzatot. Az eset óta minden gyógyszerjelöltet kötelező megvizsgálni terhes állatokon, megállapítani, hogy a szer okozhat-e a magzat fejlődésében rendellenességet. A Contergant ma ismét használják gyógyszerként, de szülőképes korú nők nem szedhetik, noha a gyógyszer ma már a hatóanyag-molekulának csak a "jó" változatát tartalmazza.

A gyógyszergyártók a tragikus Contergan-ügyet megelőzően a királis gyógyszermolekulákat, a kép és a tükörkép 1:1 arányú keverékeként hozták forgalomba, noha pontosan tudták, a két változat biológiai hatása különböző lehet. Az ügy ráirányította a figyelmet arra, hogy a királis molekula két változatának elkülönítése elodázhatatlan feladat. A gyógyszeriparban szigorú szabályokat léptettek életbe. Ma már a királis molekulákat minden esetben szét kell választani képre és tükörképre. Ezeket külön-külön meg kell vizsgálni, s csak a hatékony változatot szabad forgalmazni.

Elképzelhető, hogy hagyományos eljárással a kép és tükörkép 1:1 arányú keverékét állítjuk elő, aztán a két változatot elválasztjuk egymástól. Csakhogy ez borzasztó drága megoldás. A szerves kémiai kutatás egyik fontos feladata, hogy olyan eljárásokat dolgozzon ki, amelyben a kép és a tükörkép nem egyenlő arányban képződik. Az igazán jó megoldás az, amikor legnagyobb részt - optimális esetben - kizárólag a "jó" változat keletkezik. Ez aszimmetrikus szintézissel oldható meg.

NÉPSZABADSÁG

2004. május 15.

Ötvös Zoltán

Megkövezett szennyvíz Költségcsökkentő magyar találmány

A szennyvíztisztítók hadászati jelentőségét a hétköznapi ember nehezen látja át, a NATO globálisan gondolkodó szakemberei viszont ezen a területen is otthonosan mozognak. Egyébként miért adtak volna közel ötvenmillió forintnak megfelelő eurót egy magyar-amerikai konzorciumnak egy speciális technológia kidolgozására, kipróbálására?

Egy 1998-ban meghirdetett NATO-programra - Tudomány a békéért - a világ minden tájáról 2500 jelentkezés érkezett, a szigorú ítések végül 38 pályázatot támogattak - ebből kettőnek magyar tagjai is voltak. Az egyik nyertes az amerikai Floridai Egyetem és a magyar Élő Bolygó Kft. lett. A kettős meglehetősen jól dolgozott, hiszen eljárásuk már szabadalommal védett, itthon 12 kisebb szennyvíztelep alkalmazta, illetve alkalmazza a megoldást.

A ZeoRap névre keresztelt eljárás speciálisan előkezelt zeolit használatán alapszik, amelyet a tisztítandó szennyvízbe adagolnak. Az újfajta anyagnak köszönhetően átlagosan harminc százalékkal javul a kezelt víz minősége, illetve a telep kapacitása 30 százalékkal nő bármilyen beruházás nélkül. A zeolitot igen kis mennyiségben kell adagolni: ezerliternyi szennyvízhez alig 30 grammnyi, három forintba kerülő fehér port szórunk. Ez a beadagolás nem jelent költségnövekedést, mert a zeolitnak köszönhetően 5-6 százalékkal kevesebb áram, illetve az iszapkezelésnél alkalmazott drága vegyszerből is kevesebb kell.

Az eljárás alapanyaga, a zeolit nevű pórusokkal átjárt, szivacsos szerkezetű alumínium-szilikát ásvány, hazánkban Tokaj-Hegyalján fordul elő, kitermelhető mennyiségét 300 millió tonnára becsülik. Tavaly 40 ezer tonnányi zeolitot bányásztak a térségben, ami - ha az eljárás általános lesz - 60 ezer tonnára növekedhet, de a készletek még így is több ezer évre biztosítanak a hazai szennyvíztelepek tisztítását. Az már más lapra tartozik, hogy a világörökség részének választott tokaji kultúrtáj felszínének megbolygatásához, érintsen az bármilyen kis részt is, mit szólnak az UNESCO illetékesei, vagy éppen a szőlőben-borban utazó gazdálkodók. A szabadalmat ismertető e heti tájékoztatón *Kalló Dénes*, az MTA Kémiai Kutatóközpont zeolitikus kutatója elmondta: egyetlen köbcentiméternyi zeolitban található mikropórusok teljes hossza a Nap-Föld távolsággal egyenlő. Ezen a nagy fajlagos felületen köti meg a zeolit a szennyezéseket.

Zeolittal egyébként már a nyolcvanas években is próbálkoztak, de akkor több hétig is eltartott, mire a kőzet lyukacsában megtelepedtek a szerves anyag lebontását végző jótékony baktériumok. A kutatók szabadalmaztatott megoldása révén - a ledarált zeolithoz szerves makromolekulákat kapcsolnak - így a mikrobák megtelepedése több napról néhány másodpercre csökkent. A gyorsabban szaporodó baktériumoknak köszönhetően a szennyező anyagok lebontási sebessége is nő. Legalább ilyen fontos, hogy csökken a tisztított szennyvíz ammónium- és szervesnitrogén-tartalma, azaz javul a kezelt víz minősége. Hasonlóan érdemi eredmény, hogy az utóülepítőből elfolyó tisztított szennyvízzel kevesebb lebegőanyag távozik.

Tizenkét kisebb szennyvíztisztító kedvező tapasztalatai alapján a fejlesztők most a nagyobbak érdeklődésében bíznak. A jelentkezést talán ösztönzi, hogy például a Duna Menti Regionális Vízmű Rt. szobi telepén a zeolittal egymillió forint megtakarítást értek el. Pedig a szobi aprócska telep, napi kapacitása alig ezer köbméter. A zeolitot ráadásul csak az egyik, ötszáz köbméteres kapacitású tisztítósoron alkalmazták. Így viszont egyértelműen kiderültek az előnyök, hiszen a zeolittal, illetve anélkül ugyanannyi szennyvizet kezeltek.