



Kutatóközponti Krónika

2011.

36. évfolyam

Kémiai Kutatóközpont

Magyar Tudományos Akadémia

Kémiai Kutatóközpont
Magyar Tudományos Akadémia

Főigazgató: Pálinkás Gábor

Cím: H-1025 Budapest, Pusztaszeri út 59-67.

Levélcím: 1525 Budapest, Pf. 17.

Telefon: +36 1 438 1100

E-mail: ttk@ttk.mta.hu

URL: <http://www.ttk.mta.hu>

MTA KK Kutatóközponti Krónika 2011

Felelős kiadó: Szépvölgyi János

Felelős szerkesztő: Tóth Ágnes

Szerkesztő: Sávolyi Krisztina

ISSN: 2062-4077

Példányszám: 20

Nyomdai munka: MTA TTK Reprográfiai műhely

Tartalom

Előszó	4
Kitüntetések, díjak, elismerések	5
Kémiai Nobel-díj 2011	12
In memoriam	20
Új nagyműszerek a Kémiai Kutatóközpontban	21
Rendezvények	32
Konferenciák	32
Kutatóközponti szemináriumok	41
Külföldi előadók a Kémiai Kutatóközpontban	45
Kálmán Erika Doktori Konferencia	47
Kutatóközponti Tudományos Napok	51
További rendezvények	57
Jelentős megújulás az MTA kutatóhálózatában	61
Kutatói Fórum az Akadémián	64
Kutatói Fórum a Kémiai Kutatóközpontban	69
Tudományos értekezések vitái	76
Publikációs adatok	78
Sajtószemle	89

ELŐSZÓ

Az ENSZ határozata alapján 2011 a Kémia Nemzetközi Éve volt. Az Akadémia elnöke, a nemzeti erőforrás miniszter, valamint a kémikus szakma számos jeles képviselői hívták fel a figyelmet a tudományág fontosságára és hasznosságára, továbbfejlődésének szükségességére, valamint a természettudományos oktatásra.

A rendezvénysorozathoz kapcsolódó konferenciák és a kémiát népszerűsítő előadások szervezésében és előadójaként is részt vettek az MTA Kémiai Kutatóközpont kutatói.

A Kutatóközponti Krónika beszámol a Kutatóközpont 2011. évi szakmai és közéleti szerepléséről, az újabb sikeres műszerpark fejlesztésekről, valamint a vörösiszap-katasztrófa következményeiről és tapasztalatairól is. A kiadvány ismerteti az MTA-Q2 beruházási program helyzetét, illetve tájékoztat a Kutatóközpont átszervezéséről, mely az akadémiai kutatóhálózat jelentős megújítási folyamatának részeként hozzájárulhat Magyarországnak versenyképességének fokozásához.

A sajtószemle rovat – a korábbi évek gyakorlatát követve – teljes terjedelemben közli a Központ kutatóiról, eredményeiről megjelent cikkeket, tudósításokat.

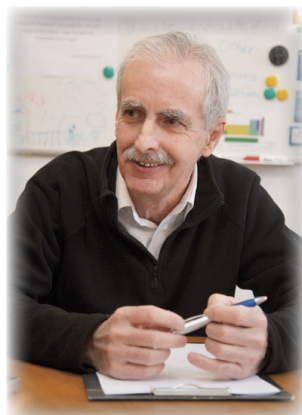
2012. május

Szerkesztőbizottság

KITÜNTETÉSEK, DÍJAK, ELISMERÉSEK

Magyar Köztársaság Belügyminisztérium Érdemérem

A vörösiszap-katasztrófa évfordulóján, 2011. október 4-én **Szépvölgyi János** (AKI igazgató) érdemérmet vett át Pintér Sándor belügyminisztertől. A kitüntetéssel a Kormányzati Koordinációs Bizottság Tudományos Tanácsának tagjaként, a vörösiszap okozta környezeti ártalom felmérésében, a károk megszüntetésének tudományos megalapozásában és a közvélemény hiteles tájékoztatásában végzett kimagasló teljesítményét ismerték el.



Gábor Dénes-életműdíj

A magyar tudományos kutatási eredmények nemzetközi ismertségét és tekintélyét egyaránt növelő életművéért járó, 2011-ben alapított, a Nobel-díjas fizikusról, az MTA egykori tiszteleti tagjáról elnevezett életműdíjat tudományos eredményei elismeréseként elsőként **Szántay Csaba** akadémikus vehette át az Országház Főrendiházi termében 2011. december 15-én. A vegyészmérnök, egyetemi tanár, a Magyar Feltalálók Egyesületének elnöke az értékes biológiai tulajdonságokkal rendelkező természetes szerves anyagok szerkezetfelderítése és szintézise során elért eredményeiért, illetve a szervezetünkben fontos szerepet játszó prosztanoidok, valamint a környezetbarát növényvédő szerek csoportjába tartozó rovarhormonok (feromonok) kémiájának tanulmányozása során elért eredményeiért kapta meg az életműdíjat. *Szántay Csaba* nevéhez kutatásai mellett 232 megadott ipari szabadalom és magas számú és színvonalú publikációs tevékenység fűződik.



Széchenyi Nagydíj

2011. március 14-én, **Oláh György** Nobel-díjas kémikus, az MTA tiszteleti tagja Széchenyi Nagydíjat kapott, amit 2011. szeptember 8-án, California Államban vette át Pálinkás Józseftől, az MTA elnökétől a díjat.



A világszerte számon tartott és nagyra becsült tudós kémiai kutatásaiért és eredményeiért, azoknak a ma már klasszikusnak számító tanulmányokban és könyvekben való közzétételéért, a kémiai tudományok fejlesztése, eredményessége,

a kutatási eredmények gyakorlati hasznosítása érdekében végzett tudományos munkásságáért, az új tudósnemzedékek számára példaképpül szolgáló életpályáért részesült az elismerésben. *„1954-ben felajánlották, hogy csatlakozzak a Magyar Tudományos Akadémia Központi Kémiai Kutató Intézetéhez, melyet újonnan hoztak létre. Alapíthattam egy szerves kémiai kutatócsoportot, ezt ideiglenesen egy ipari kutatóintézet laboratóriumában helyezték el. Csoportommal, amelynek akkorra már feleségem is tagja volt, ki tudtuk szélesíteni munkánkat, és a lehető legjobban kihasználtuk a lehetőségeket.”* – emlékezett vissza magyarországi kutatómunkájának kezdetére az mta.hu-nak korábban nyilatkozva a tudós, aki 1956 végén hagyta el az országot. Oláh György professzort az MTA 1990-ben választotta meg tiszteleti tagnak. Kutatási sikereinek csúcsa az 1994-ben odaítélt Nobel-díj. A kémikus az utóbbi években többször is ellátogatott Budapestre.

Bruckner Győző-díj



A Richter Gedeon Rt. és az Akadémia által alapított, negyven éven aluli kutatóknak kiadható, Bruckner Győző díjat vehette át 2011. november 17-én, **Drahos László** (SZKI tudományos főmunkatárs) kiemelkedő eredményeiért Görög Sándor akadémikustól.

Pungor Ernő-díj

Pungor Ernő kémikus akadémikus, a hazai és nemzetközi tudományos élet kiemelkedő alakja emlékére alapított Pungor Ernő-díjat **Tárkányi Gábor** (SzKI főmunkatárs) vehette át Pálinkás Józseftől, az MTA elnökétől, Görög Sándor akadémikustól, valamint Pungor Andrástól, a díjat alapító család képviselőjétől a kémiai kicserélődést mutató rendszerek dinamikus NMR-spektroszkópiával történő vizsgálata terén elért kiváló eredményeiért.



Akadémiai Ifjúsági Díj



2011. március 2-án **Varga Szilárd** (BKI tudományos segédmunkatárs) az akadémiai tudományos kutatóhelyen dolgozó 35 év alatti fiatal kutatók szakmai munkájának ösztönzésére és a kiemelkedő tudományos eredmények elismerésére kiírt Akadémia Ifjúsági Díjban részesült a *Paradigma-váltás a katalizátorfejlesztés területén: organokatalízis* című pályamunkájáért.

Cholnoky Eszter-díj



A gyógyszerkínétika és metabolizmus terén nyújtott kimagasló, iskolateremtő munkájának elismeréséül a Magyar Toxikológusok Társaság vezetősége 2011. október 13-án a Cholnoky Eszter díjat **Vereczkey Lászlónak** (BKI tudományos tanácsadó) ítélte oda.

Kisfaludy Lajos-díj

Erős Gábor (BKI tudományos segédmunkatárs) 2011. június 28-án Kisfaludy Lajos-díjban részesült.

A díj célja az eredeti gyógyszerek kutatása és az ahhoz kapcsolódó tudományterületek fejlődésének elősegítése, támogatása, különös tekintettel a Richter Gedeon Rt.-ben folytatott tudományos kutatásokkal, a gyógyszerkutatás és a fejlesztés területére.

A díjat az *Expanding the Scope of Metal-Free Catalytic Hydrogenation through Frustrated Lewis Pair Design* (Gábor Erős, Hasan Mehdi, Imre Pápai, Tibor András Rokob, Péter Király, Gábor, Tárkányi, Tibor Soós: *Angewandte Chemie Int. Ed.* 49 (2010) 6559-6563) cikkben összefoglalt kutatási tevékenységért kapta.



Clauder Ottó Emlékérem



A X. Clauder Ottó Emlékverseny I. díját, a Clauder Emlékéremet **Turiák Lilla** (SzKI tudományos segédmunkatárs) és Ozohanics Olivér (SzKI tudományos segédmunkatárs) *Glükoprotein analízis a tömegspektrometriában* című előadásával nyerte el 2011. október 14-én.

Hot Paper cikkminősítés



A Molecular BioSystems szerkesztője (Francesca Burgoyne) értesítette az MTA Enzimológiai Intézetének és a Kémiai Kutatóközpont Biomolekuláris Kémiai Intézetének kutatóit (Varga Andrea, Laurent Chaloin, **Sági Gyula** (BKI tudományos főmunkatárs), **Sendula Róbert** (BKI tudományos segédmunkatárs), Gráczer Éva, Liliom Károly, Závodszy Péter, Corinne Lionne és Vas Mária), hogy a folyóiratban a francia szerzőkkel közösen publikált *Nucleotide promiscuity of 3-phosphoglycerate kinase is in focus: implications for the design of better anti-HIV analogues* című cikk 'hot paper' (azaz erősen idézett cikk) minősítést ért el. A közlemény adatai: Molecular BioSystems, 2011, 7, 1863-1873 DOI: 10.1039/C1MB05051F.

Címzetes egyetemi tanári cím



Héberger Károlynak (KK tudományos tanácsadó) a BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar dékánja 2011. június 28-án a Kari Tanács határozata alapján *címzetes egyetemi tanári* címet adományozott az egyetem érdekében kifejtett kiemelkedő tevékenységéért. Még ebben az évben, július elsején a Journal of Chemometrics (John Wiley&Sons Ltd.) *Tanácsadó Testületi tagjává* is felkérték, valamint a Journal of Analytical Methods in Chemistry (korábbi neve: Journal of Automated Methods and Management in Chemistry) *folyóirat szerkesztőbizottsági tagjává* választotta 2011 novemberében.

Ifjúsági Nemzetközi Konferencia Pályázat



Farkas Arnold Péter (NKI tudományos munkatárs) az Ifjúsági Nemzetközi Konferencia Pályázat 2011. év őszi fordulójának nyertese. Az MTA a kezelésére bízott magánalapítvány felhasználásával és saját forrásból létrehozott pályázat kiírásával támogatja az irányítása alatt álló intézmények jelentős tudományos eredményt elért fiatal kutatóinak nemzetközi tudományos konferenciákon való részvételét.

Oktatási tevékenység elismerése

2011. április 27-29-én Pécsen rendezték a Kémiai és Vegyipari Oszágos Tudományos Diákköri Konferenciát (OTDK), amelyen az AKI Polimer Kémiai és Anyagtudományi Osztályán diákköri munkájukat végző - **Iván Béla** (AKI tudományos tanácsadó) irányítása mellett - egyetemi hallgatók sikeresen szerepeltek, és közülük a következők részesültek díjazásban:

I. díj: Osváth Zsófia (Témavezetők: **Iván Béla, Kali Gergely**)

II. díj: Pásztor Szabolcs (Témavezetők: **Iván Béla, Kali Gergely**)

III. díj: Galát Márk (Témavezetők: **Iván Béla, Szarka Györgyi**)



Érsek Gábor (AKI Kíváncsi Kémikus nyári iskola résztvevő 2009-ben) I. évf. kémia BSc hallgató, az ELTE TTK Kémiai Intézet 2011. december 3-án tartott Kémiai Tudományos Diákköri Konferenciáján a Polimer Kémia és Anyagtudományi Osztályon végzett kutatásairól. *Poliizobutilén és poli(di(etilén oxid) metil éter-metakrilát) alapú amfifil kotérhálók előállítására és vizsgálata* címmel benyújtott dolgozatával Junior díj elismerésben részesült (Témavezetők: Szabó Ákos, **Iván Béla**).

Frontiers of Knowledge Award in the Basic Sciences elismerés



Somorjai A. Gábor az MTA tiszteleti tagja, az MTA KK Külső Tanácsadó Testületének korábbi elnöke, illetve jelenlegi tagja nyerte el 2011. január 26-án a BBVA Alapítvány **Frontiers of Knowledge Award in the Basic Sciences** elnevezésű elismerését.

A díjat a felületi kémia és a katalízis mikroszkopikus és molekuláris szinten zajló folyamatainak megismeréséért tett úttörő kísérleti és elméleti hozzájárulásáért ítélte oda a bíráló bizottság Somorjai professzor számára.

National Medal of Science

A **National Medal of Science** elnevezésű, legmagasabb fokozatú állami tudományos kitüntetést adományozzák az Amerikai Egyesült Államokban **Peter J. Stang** magyar származású vegyészprofesszornak, az MTA KK Külső Tanácsadó Testület tagjának. A díjat Barack Obama elnök adta át a Fehér Házban 2011. szeptember 27-én.

A tudóst korábban egy szakmai rangsorban a világ 100 legfontosabb vegyésze között a 69. helyen említették.



Kémiai Nobel-díj 2011

a kvázikristályok felfedezéséért - és az állhatatosságért

2009 után, 2011-ben ismét krisztallográfiai munkáért ítelték oda a kémiai Nobel-díjat. A rövid hivatalos indoklás szerint a „kváziperiodikus kristályok felfedezéséért”, mely paradigmaváltást hozott a szilárd fázisban az atomok és molekulák elrendeződéséről alkotott elképzelésről. A díjat **Daniel Shechtman** kapta, az anyagtudományok Philip Tobias professzora, a Technion – Izraeli Műszaki Egyetem (Israel Institute of Technology, Haifa) Anyagmérnöki Karának 70 éves professzora.



A kváziperiodikus kristályok felfedezése hozta magával, hogy a Nemzetközi Krisztallográfiai Unió (IUCr) megváltoztatta a kristály definícióját. A korábbi meghatározás helyett, mely szerint a kristályt felépítő atomok a kristályban három dimenzióban ismétlődő mintázat szerint rendeződnek el, azaz a periodicitás szükséges velejárója a rendnek, 1992 óta a sokkal tágabb értelmű definíció van érvényben, mely kimondja, hogy kristály alatt értünk bármely szilárd anyagot, mely alapvetően diszkrét diffrakciós képet mutat, továbbá aperiodikus alatt értünk bármely kristályt, melyben a három dimenziós rács periodicitása hiányzik [1].

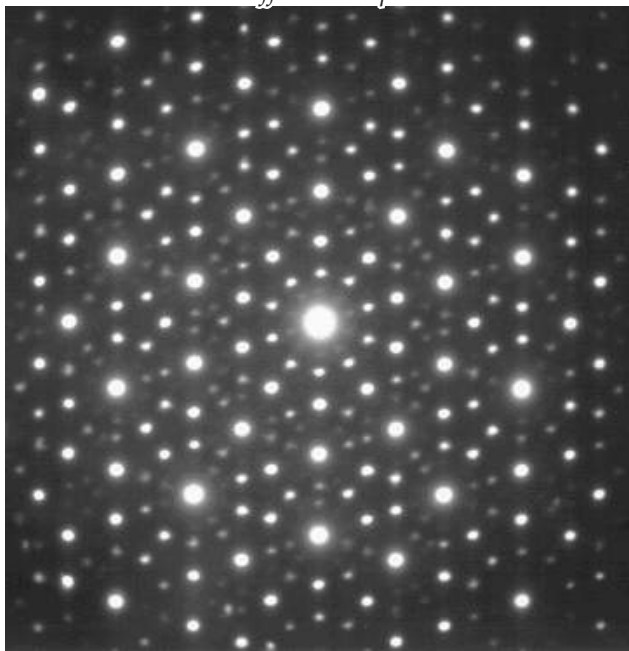


Daniel Shechtman

„Ilyen állat nincs” kiáltott fel Daniel Shechtman 1982. április 8-a reggelén az USA Szabványügyi Hivatala laboratóriumában, amikor meglátta a gyorshűtéssel előállított alumínium-mangán ötvözet (Mn 25%) elektrondiffrakciós képének tízfogású szimmetriáját. Megszámolta egyik, majd másik irányból is. A kísérletet megismételve ugyanarra az eredményre jutott. Szerette

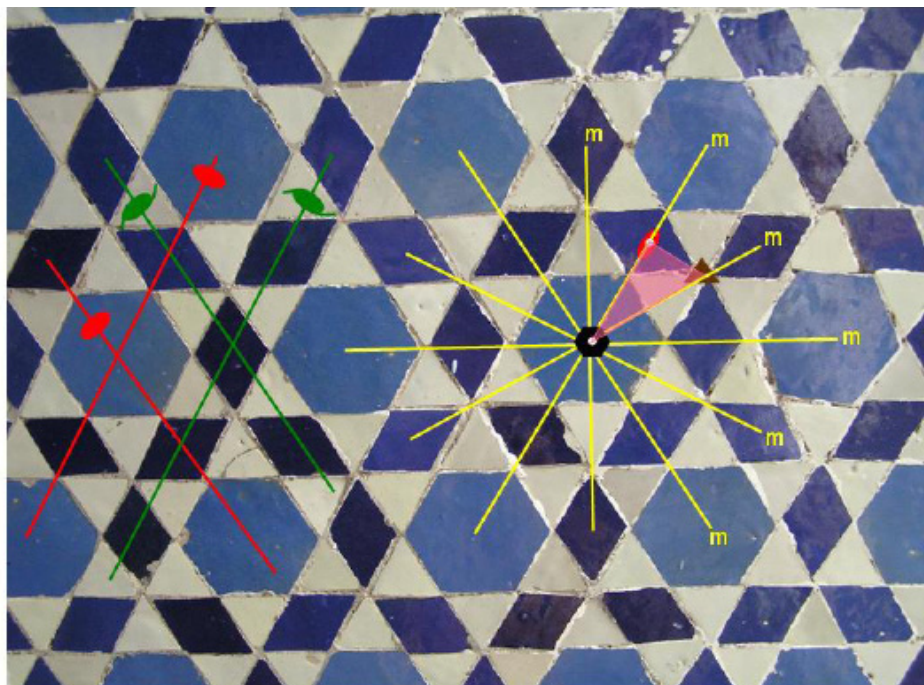
*Tízfogású szimmetriával bíró elektronmikroszkópos
diffrakciós kép*

volna megosztani a váratlan, hihetetlennek tűnő felfedezést valakivel, de nem talált egy kollégát sem a folyosón. Viszszament az elektronmikroszkóphoz és a nap folyamán egy sor kísérletet végzett el. Néhány nap alatt a teljes kísérleti munkát befejezte. Az eredmények közzététele azonban még jó két évet váratott magára.



Daniel Shechtman felismerése pontosan 70 évvel azután történt, hogy Max von Laue elvégezte az első diffrakciós kísérletet, bizonyítva egyúttal a sugárzás elektromágneses hullámtermészetét, és az anyag atomi rácsszerkezetét. Az ezalatt az idő alatt kialakult klaszszikus krisztallográfia szerint a kristályokban előforduló szimmetria műveletek, mint a szimmetriacentrumra vagy tükörsíkra történő tükrözés, a forgatás és ezek kombinációi szabályos, rendezett, periodikusan ismétlődő mintázatot adnak [2]. A kristályrácsokban a megengedett szimmetriaelemek kombinációjával a síkban 17, a térben 230 féle mintázat állítható elő. A hetven év alatt feltárt kb. 50 000 kristályszerkezet [3] mind periodikus volt. Az ezeken az elveken nyugvó, leggyakrabban röntgen sugárzást felhasználó egykristálydiffrakció módszerével megismerhetjük szilárd fázisban az anyagok szerkezetét, atomi felbontású képet kapunk arról, hogyan épülnek fel a szervetlen és szerves vegyületek, fehérjék, vírusok (ionokból, atomokból, molekulákból, makromolekulákból); és megtudjuk, hogyan illeszkednek a kristályban a szimmetriák által egymáshoz rendelt egységek. Mára több mint félmillió anyag

szerkezetét ismerjük [3]. Az atomi, molekuláris, molekulák közötti szubmikroszkópikus tulajdonságok kapcsolatba hozhatók az anyag makroszkópikus, fizikai, kémiai és biológiai tulajdonságaival. Ezen ismeretek birtokában lehetővé válik megkívánt fizikai-kémiai tulajdonságú anyagok előállítás. A máig fejlődő és virágzó klasszikus egykristálydiffrakció interdiszciplináris tudományág matematikai, fizikai, kémiai, biológiai és anyagtudományi ismereteket igényel és folyamatosan bővíti azokat.

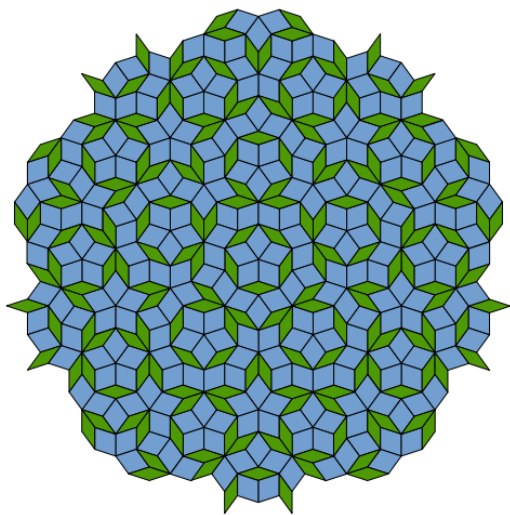


Síkbeli periodikus mintázat. A szabályos háromszögekből, rombuszokból és hatszögekből kirakott csempe eltolással ismétlődő ritmusa könnyen felismerhető. További megtalálható szimmetriák 1. a lap síkjára merőlegesen: szimmetriacentrum (fehér kör), kétfogású tengely (piros ovális), háromfogású tengely (barna háromszög), hatfogású tengely (fekete hatszög) és tükörsík (sárga vonal) 2. a lap síkjában: kétfogású tengely (piros ovális és vonal) és kétfogású csavartengely, mely a kétfogású tengely és a szimmetriacentrum kombinációjaként áll elő (zöld ovális és vonal). Rózsaszínnel kiemelve az a legkisebb mintarész látható (aszimmetrikus egység), melyből a teljes mintázatot kirakhatók.

1982-ben senki nem várt új felfedezést, senki nem keresett újat a kristallográfiai szimmetriák területén. A korábbi elképzelések szerint a kristályokban megengedett forgási szimmetriák az 1, 2, 3, 4

és 6 fogású tengely, az ötfogású és a hatnál magasabb szimmetria tiltott a periodikus rendszerekben. Ez azt jelentené, hogy a Daniel Shechtman által megfigyelt ikozaéderes szimmetria nem létezhetne. Az aperiodikus kristályokban azonban az atomi elrendeződés szabályos, rendezett, matematikai szabályokkal leírható, mégsem ismétli önmagát a végtelenben sem.

A kvázikristályok felismerését és értelmezését több, egymástól függetlenül történt esemény szálainak összefonódása tette lehetővé. Az 1970-es évek közepén a matematikus Roger Penrose-nak sikerült aperiodikus mozaikot kiraknia [4]; olyan mintázatot, mely sosem ismétli önmagát, ráadásul úgy, hogy csak két különböző rombusz alakú építőelemet használt, egy vastagabbat és egy vékonyabbat. A szórakozásból megoldott matematikai feladványnak fontos gyakorlati alkalmazása lett a krisztallográfiában. 1982-ben Alan L. Mackay elméleti diffrakciós mintázatot állított elő. Atomokat jelképező lyukakat ejtett a Penrose mintázat metszéspontjain. A modellt lézerfényvel megvilágítva tízfogású szimmetriát mutató diffrakciós képet kapott. 1982-ben Daniel Shechtman elektronmikroszkópján tízfogású szimmetriájú diffrakciós képet detektált. Ez szemben állt az akkori felfogás szerint a természet törvényeivel, mert feltételezték, hogy minden kristály periodikus. Shechtman azonban biztos

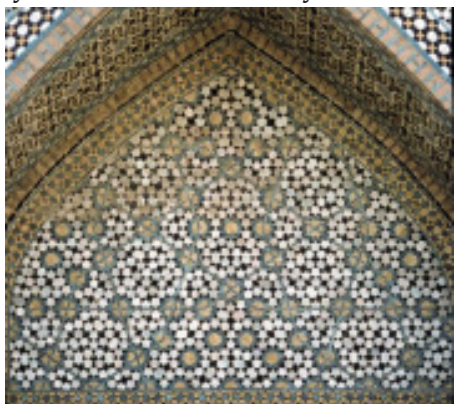


Penrose csempézet

volt benne, hogy a felvétel jó, és nem egy szabályos kristály hibáival, „ikerkristállyal” áll szemben (ikerkristály: két vagy több mindig bizonyos meghatározott sík szerint összenőtt kristálya egyazon anyagnak). Shechtman és Mackay nem tudtak egymás eredményeiről. Az szerencse volt, hogy Shechtman ráakadt az ikozaéderes kristályra, azonban felismerte jelentőségét és attól fogva tudatosan igyekezett az új,

különös eredmények valódiságáról meggyőzni a tudós társadalmat. 1984-ben Paul Steinhardt és Dov Levine kapcsolta össze Mackay modelljét és Shechtman diffrakciós képét, felismerve, hogy az aperiodikus mozaik segítségével lehet megmagyarázni a sajátos diffrakciós képet.

A tudomány, a művészet és a vallás találkozása már évszázadokkal korábban megvalósult: a szabályos mintázatok, melyek nem ismétlődnek, már a középkori arab művészek lenyűgöző mozaikjain megjelentek, például a spanyolországi Alhambrában vagy az iráni Darb-ilmam szentélyben. Évszázadokon keresztül próbálkoztak már azzal, hogy szabályos ötszögekből alakítsanak ki hézagok és átfedések nélkül sík- és térbeli felületeket. Albrecht Dürer élete vége felé szenvedélyesen foglalkozott arányelméleti és geometriai kérdésekkel, 1525-ben jelent meg *A mérés tankönyve*, 1558-ban pedig az *Arányelmélet* című értekezése. Azonban az aperiodicitás természetben való előfordulásának felismerése még sokáig váratott magára.



Az 1450 körül épült iráni Darb-i Imam szentély kváziperiodikus, szabályos, de sosem ismétlődő díszítése. A transláció, azaz a periodikusság hiánya felismerhető az ötfogású szimmetriával bíró mozaik mintázaton



Marokkói középkori szabályosan ismétlődő csempe mintázat rombuszból és négyzetből

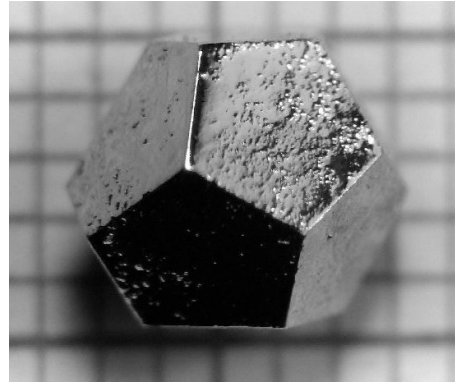
Az öt, illetve tízfogású szimmetria a tudomány 1982-es állása szerint nem volt megengedett, a természet szabályai ellen valónak találták. Ugyanakkor létezett, de el kellett hitetni a világgal, hogy valóban létezik. A klasszikus krisztallográfia szabályai az emberi osztályozás szabályai, nem a természet törvényei voltak.



A. Dürer (1471-1528) *Melankólia* című képe

laborvezetőtől kapott egy kristallográfiai tankönyvet, hogy olvassa el, abból megérti, hogy lehetetlen, amit állít. A könyvet ismerte, ebből tanulta a röntgendiffrakciót, vizsgázott belőle az egyetemen, sőt később ebből tanított. Biztos volt benne, hogy transzmissziós elektronmikroszkópos felvételeivel bizonyítani tudja, hogy ez most valami új, amit talált. A Szabványügyi Hivatalból eltanácsolták. Miután visszatért a Technionra Ilan Blech-hel együtt kerestek olyan térbeli szerkezeteket, ikozaédes modelleket építettek, melyek Fourier transzformáltja megegyezik a kapott diffrakciós képpel. A tapasztalatokat összefoglaló kéziratot a *Journal of Applied Physics* folyóirathoz küldték be 1984 nyarán. A szerkesztő azt postafordultával visszaküldte mondván, hogy ez nem érdekli a fizikusokat. Ezután a lerövidített kéziratot, mely ezúttal a modellt nem, csak az elektronmikroszkópos eredményeket tartalmazta a *Physical Review Letters*-hez küldték be. A

Daniel Shechtman 1981-ben érkezett az USA Szabványügyi Hivatalába, hogy vendégkutatóként két évet töltsön ott. Olyan ötvözeteket vizsgált, melyek kereskedelmi szempontból hasznosak lehetnek, ugyanakkor munkájához meglehetősen szabadságot biztosítottak. Az újonnan észlelt aperiodikus kristályról készült diffrakciós képet megmutatta kollégáinak. Mindenki rácshibás, ikerkristályokra gondolt, és nem tartották különösebben érdekesnek. A



*Ho-Mg-Zn ikozaédes kvázikristály
dodekaedron formájában*

cikk novemberben megjelent [5]. A kéziratot még publikálása előtt több kutatónak megmutatták, hogy megvitassák. Az eljutott Paul Steinhardthoz és doktoránsához, Dov Levine-hoz. Ők ismerték fel a kapcsolatot a mért ötfogású diffrakciós kép és Mackaynek a Penrose csempézetéről készült elméleti Fourier transzformáltja között. Cikkük még az év végén megjelent [6]. A közlemények fordulatot hoztak a krisztallográfiában és az anyagtudományban. Előkerültek mások mérései, melyeket így már értelmezni tudtak. A kváziperiodikus kristályok kutatásába hirtelen sokan belefogtak. Élete végéig szkeptikus maradt azonban az aperiodikus kristályok iránt Linus Pauling (1901-1994), a modern szerkezeti kémia és molekuláris biológia megalapozója (1954 kémiai Nobel-díj, 1962 Nobel Békédíj). Időről időre találkoztak Shechtmannel, megvitatták a véleményüket, de Pauling álláspontját fenntartotta, hogy az ikozaédeses kvázikristályok köbös kristályok ikrei. A periodikus kristályokban megtalálható szimmetria szabályok természetesen érvényesek, de nem minden kristály periodikus. Ennek a ténynek a tudós társadalommal való elfogadtatásáért vívott állhatatos harcot Daniel Shechtman.

Ma már a világ számos laboratóriumában folyik kvázikristály kutatás [7]: Franciaországban, Németországban, Oroszországban, Hollandiában, a Cseh Köztársaságban, Spanyolországban, Svédországban, Svájcban, USA-ban, Mexikóban, Ausztráliában, Kínában és Japánban. Felfedezésük óta százával állították elő a kvázikristályokat - ezek mind fémek - ötvözetek fagyasztásával, gázfázisból lecsapással, elektrolízissel, szilárd fázisú kémiai reakcióval. A kváziperiodikus kristályok előtt sokrétű felhasználási lehetőségek állnak. A legkeményebb rozsdamentes acél állítható elő belőle, bár törekenyebb, alkalmazható például borotvapenge, orvosi műszerek, operációhoz használható eszközök bevonására. Rossz hő és elektromos vezetők. Hő- és kopásálló bevonatok, valamint nem tapadó felület kialakítására alkalmasak. Felhasználhatók repülőgép turbinalapát és dizelmotor bevonataként. 2009-ben találták meg az első természetben előforduló kvázikristályt, az ikozahedritet, Kelet-Oroszországban a Katirka folyóban, mely egy alumínium, réz és vas- tartalmú ásvány.

Alan L. Mackay az eseményekben gazdag 1982. évben tartott előadást Magyarországon az ötfogású szimmetriáról, ahol a szimulált

diffrakciós képet bemutatta [8]. Ekkor még nem tudott Shechtman kísérletéről. Shechtman ugyanekkor már a kísérleti megfigyelés birtokában volt, de nem tudott Makay szimulált diffraktogramjáról. Daniel Shechtman 1995-ben járt Budapesten és tartott előadást a magyar krisztallográfusoknak. Érdekes megemlíteni, hogy az 1980-as évek két Nobel-díjjal is jutalmazott kiemelkedő felfedezése a kváziperiodikus kristályok (1982) és a fullerének (1984) is az ötös szimmetriához kapcsolódik.

Daniel Shechtmant megkérdezték a Nobel-díj odaítélése után, milyen életre szóló tanulságot tud levonni munkásságából: „*Ha kutató vagy és hiszel az eredményeidben, akkor harcolj értük, és harcolj az igazságért. Hallgass meg másokat, de harcolj, és higgy az eredményekben!*”

2014 a Krisztallográfia Nemzetközi Éve lesz.

Hivatkozások:

1. International Union of Crystallography, Report of the Executive Committee for 1991 *Acta Cryst. A* 48 (1992) 922-946.
2. International Tables for X-ray Crystallography, A.J.C. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht 1992.
3. The Cambridge Structural Database: F.H. Allen, *Acta Cryst. B* 58 (2002) 380-388.
4. Gardner M: Extraordinary Nonperiodic Tiling that Enriches the Theory of Tiles, *Scientific American*, 236 (1977) 110.
5. D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias, J.W. Cahn: Metallic Phase with Long Range Orientational Order and no Translational Symmetry. *Phys. Rev. Lett.* 53(20) (1984) 1951-1956.
6. D. Levine, P.J. Steinhardt: Quasicrystals: A New Class of Ordered Structures, *Phys. Rev. Lett.* 53 (1984) 2477-2480.
7. European Crystallographic Association. Homepage of the Special Interest Group on Aperiodic Crystals: sig3.ecanews.org
8. Hargittai István és Hargittai Magdolna: Szimmetriák a felfedezésben Tudomány – Egyetem, Vince Kiadó 2003.

**Forrás: Kémiai Panoráma 8. szám, 2012. évfolyam 1. szám
Bombicz Petra**

IN MEMORIAM

Mink György (1942-2011) vegyészmérnök, a kémiai tudományok kandidátusa 2011. július 16-án elhunyt.

Pajer Károly (1928-2011) vegyészmérnök 2011. december 27-én elhunyt.

Vértes Attila (1934–2011) Széchenyi-díjas vegyész, az ELTE nyugalmazott egyetemi tanára, emeritus professzor, az MTA rendes tagja 2011. december 31-én elhunyt.



ÚJ NAGYMŰSZEREK A KÉMIAI KUTATÓKÖZPONTBAN

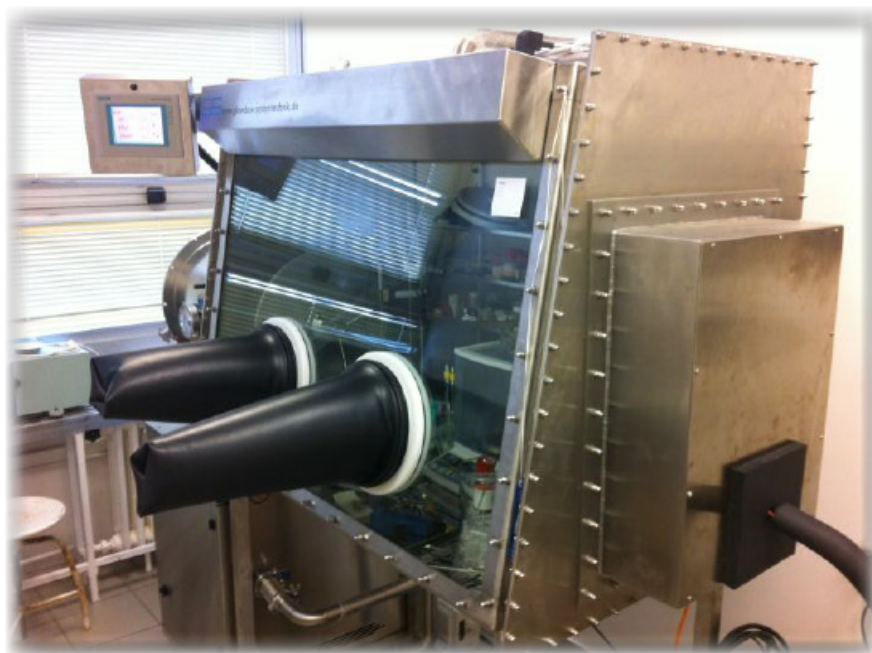
Microplate Reader spektrofotométer

A BKI Farmakobiokémiai Osztály **Metabolizmus Laboratórium** műszerparkja **Molecular Devices M5 Multi-Mode Microplate Reader** műszerrel bővült. A pályázaton elnyert berendezést a hepatotoxikus folyamatok vizsgálatában alkalmazott, az utóbbi években kifejlesztett fluorimetria, lumineszcencia és abszorbancia mérésen alapuló gyors és nagy érzékenyséű tesztek alkalmazásához szerezték be. A laboratórium a gyógyszereknek és nano mérettartományba eső anyagoknak hatásait vizsgálják patkány és humán hepatocita kultúrában. A spektrofotométerrel a toxicitás markereinek mérését, valamint sejtfunkció változásának meghatározását (ATP szintmérés, oxidált vagy redukált glutation szint meghatározása, életképesség mérési tesztek, red-ox státuszmérés, urea és albumin szekréció stb.) végzik el.



Inert manipulátor

A BKI Szintetikus Szerveskémiai Osztály **Organokatalízis Laboratóriuma** a Lendület program keretében elnyert **Glove Box manipulátor** berendezéssel bővült. A berendezés révén lehetővé vált, hogy a szintetikus vegyészek jól definiált inert körülmények között dolgozzanak, mivel a berendezés mind oxigén-szenzorral, mind a levegő páratartalmát pontosan mérni képes berendezéssel felszerelt. A hozzá tartozó adszorberek segítségével pedig a zsiliprendszeren keresztül esetleg bekerülő víz, illetve oxigén távolítható el.



Folyadékromatográf

Az AKI Környezetkémiai Osztály **Légkörkémiai Csoportja** az **Agilent Technologies 1200 Series** típusjelzésű **HPLC** készülékkel gazdagodott (MTA infrastruktúrafejlesztési keret). A berendezés a legkorszerűbb technikai megoldást alkalmazó szivattyúrendszerrel működik, maximálisan akár négyféle folyadékot is képes az automata mintaadagolóba és az elválasztó oszlopra juttatni. Az adagoló 100 minta befogadására alkalmas, az elválasztást végző oszlop termosztálható. A kutatók a készüléket az illékony szerves összetevők (pl. formaldehid) gáz-folyadék megoszlásának légköri aeroszolokban történő tanulmányozására használják. A folyadékromatográffal a gamma-valerolakton (GVL) termikus és fotokémiai átalakulása során keletkező termékek analízisét végzik a kutatók. A GVL egy ígéretes, biomasszából előállítható úgynevezett második-generációs bio-üzemanyag és megújuló alapanyag a szerves vegyipar számára. A berendezés további üzemeltetése, lehetővé teszi szerves légköri összetevők (pl. aldehidek és ketonok) meghatározását is helyszíni légkörkémiai mérésekkel.



Foszforeszcencia-egység

A SzKI Lézerspektroszkópai Laboratóriuma 2011-ben az MTA infrastruktúrafejlesztési keretéből kapott támogatást a 2009-ben vásárolt spektrofluoriméter fejlesztéséhez. Ezzel az Edinburgh Instruments FLS 920 típusú, lumineszcencia élettartam-mérésre is alkalmas készülék mérési lehetőségei jelentősen kibővültek.

Az egységgel az eddig elérhető időfelbontásos fluoreszcencia spektroszkópia mellett, a hosszabb élettartamú foszforeszkáló minták (szilárd anyagok, oldatok) időfelbontásos foszforeszcencia spektroszkópai vizsgálata is lehetővé vált. A fejlesztés egyik eleme a lumineszcencia gerjesztésére szolgáló, rövid impulzusszélességű, intenzív xenon villanólámpa. A már meglévő fotoelektronsokszorozó-detektor elektronikája is bővült, így lehetővé vált a kapuzásos detektálási technika alkalmazása is. A detektálási technikával a mintáról szóródó gerjesztő fény és a ns élettartamú fluoreszcencia kizárható, így ezek mellett is mérhetők kis intenzitású foszforeszcencia jelek. A spektrumfelvételen kívül az $1\mu\text{s}$ és 1s közötti tartományba eső foszforeszcencia-élettartam mérése is kivitelezhető.



Automata titráló berendezés

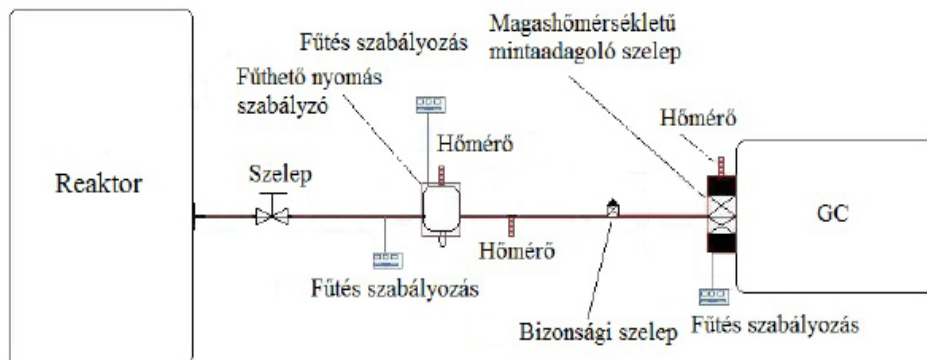
Az NKI Mikro- és Mezopórusos Anyagok Osztály **Szintézis Laboratóriuma** 2011-ben egy újonnan beszerzett **Titroline 50 Alpha Plus** (Bartelt GmbH) **automata titrálót** helyezett üzembe, amivel az ammónia TPD (temperature programmed desorption) méréseket automatizálták. Az adatok a korábbi kézi felírás helyett digitális formában rögzíthetők és közvetlenül az adatfeldolgozó szoftverbe továbbíthatók. A készülék alkalmas bonyolultabb titrálási feladatok végrehajtására is.



Magas hőmérsékletű, nagy nyomású automata mintaadagoló

Az NKI Mikro- és Mezopórusos Anyagok Osztály **Szintézis Laboratóriuma** egy **magas hőmérsékletű, nagy nyomású automata mintadagolót** (LAB-Comp Kft.) helyezett üzembe. A mintaadagolót egy nagynyomású (100 bar) katalitikus készülék és 2010-ben vásárolt gázkromatográf (Shimadzu, GC-2010 Plus AT) berendezés közé építették be (lásd ábra).

Az új mérőrendszer alkalmazásával a kutatómunka hatékonysága jelentősen megnő. A kutatók gázkromatográfal on-line kapcsolatban álló, nagynyomású átáramlásos mikroreaktort egy olyan projekt keretében is alkalmazzák, amelynek célja az állati eredetű, pirolízisolaj viszonylag magas, kb. 10 m/m% nitrogén tartalmának ammóniává, szén és hidrogén tartalmának cseppfolyós motorhajtóanyaggá alakítása katalitikus hidrogenitrogénezési (HDN) reakcióban. A munka során különféle HDN-katalizátorokat állítanak elő, és az új katalizátorokat, valamint a HDN-reakciót modellreaktánsok alkalmazásával tanulmányozzák. Az on-line kapcsolatot számítógéppel vezérelt automata üzemmódra építették ki.



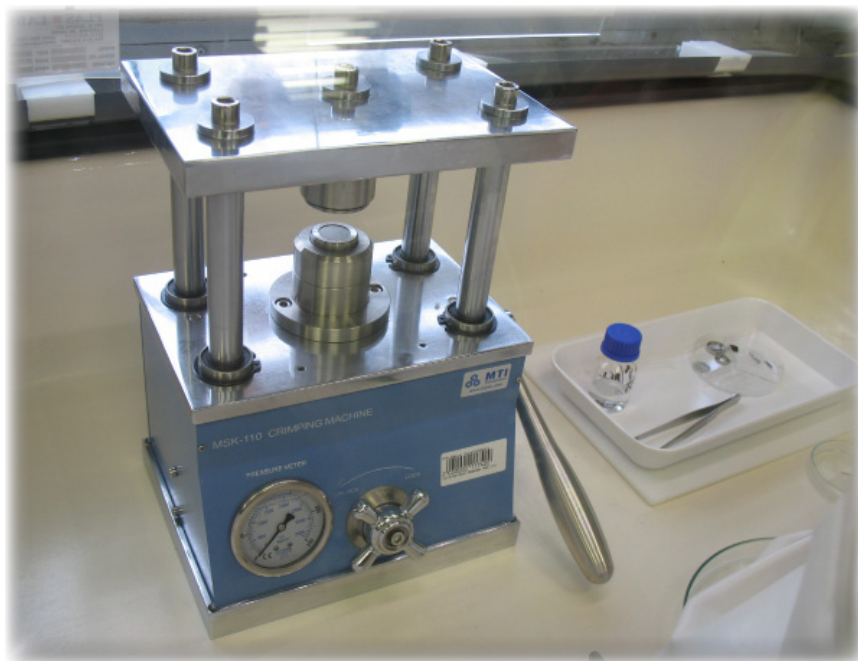
Automata olvadáspontmérő

A BKI Szerves Analitikai Laboratóriuma egy SRS OptiMelt típusú **automata olvadáspontmérő** berendezéssel bővült. A műszer széles hőmérséklettartományban (10-400 °C között), automata üzemmódban alkalmas olvadáspont meghatározására. A készülék három kapilláris egyidejű befogadására alkalmas, kerámiaszigetelésű alumínium fűtőkamrával és a gyors visszahűtéshez beépített ventilátorral rendelkezik. A mintakapillárisokat nagy fényerejű fehér LED-ek világítják meg. A készülék számítógéphez kapcsolható, MeltView szoftverrel vezérelhető, így a hőmérséklet és időadatok, valamint az olvadás folyamatáról készített digitális képsorozatok tárolhatók. A képsorozatok a későbbiekben filmként visszanezhetőek vagy önálló képekként elmenthetők más programban való feldolgozás érdekében.



MSK-110 típusú hidraulikus prés gép

Az NKI Felületmódosítás és Nanoszerkezetek Osztály **Alkalmazott Elektrokémiai Laboratóriuma** alapkutatói célú, laboratóriumi méretű zárt szuperkondenzátor cellák kialakítására alkalmas rendszert alakított ki (FP7-N2P projektfeltétel). A rendszer részeként a szuperkondenzátorok zárt, laposelemben történő összeszereléséhez MSK-110 típusú hidraulikus prés gépet szereztek be (MTI Corporation), melynek présfeje alkalmas CR20XX típusú laposelemek zárására. Kis súlya (25 kg) és mérete (30 x 19 x 31 cm) miatt kiválóan használható glove-boxban. A présfej cserélhető, így további beruházással más geometriájú cellaházak zárására is alkalmassá tehető. A préseléshez kifejthető maximális nyomás 8 tonna.



Nagyérzékenységű, többsatornás bipotenciosztát

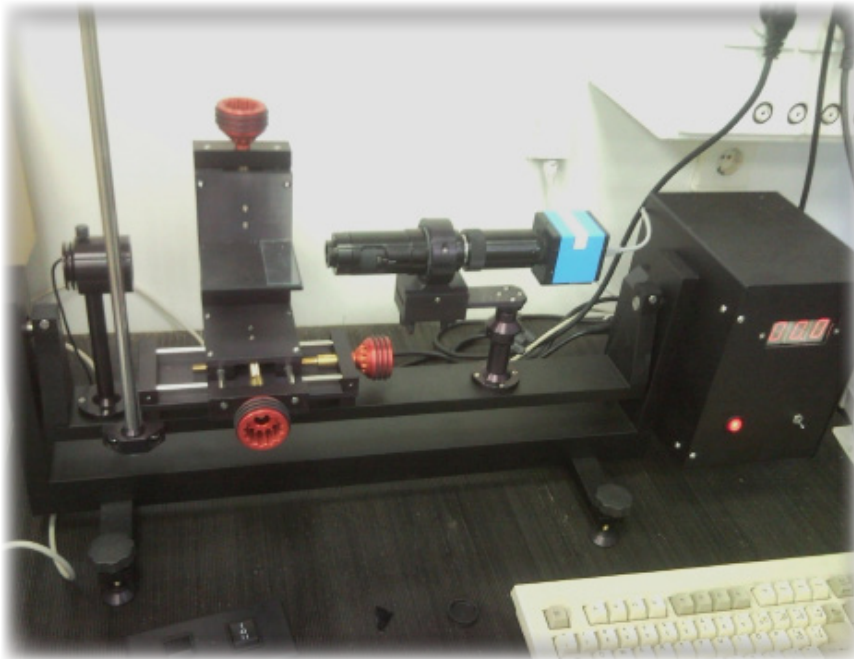
Az NKI Felületmódosítás és Nanoszerkezetek Osztály **Alkalmazott Elektrokémiai Laboratóriuma** nagyérzékenységű, többsatornás bipotenciosztát berendezést fejlesztettek ki az *Exploring cellular dynamics at nanoscale* című projekt keretében. A mérőegység több párhuzamosan folyó elektrokémiai folyamat egyidejű detektálására alkalmas. A műszer az őssejtek dopaminergikus sejtekké történő differenciálódásának nyomonkövetésére szolgál oly módon, hogy a sejttenyészetben belüli lokális sajátosságok is megfigyelhetővé válnak a párhuzamos mérésekre szolgáló elektródrendszer segítségével.



Statikus kontaktszög mérőegység

Az NKI Felületmódosítás és Nanoszerkezetek Osztály **Alkalmazott Elektrokémiai Laboratóriuma** statikus kontaktszög mérőegységet fejlesztett ki az intézet műszaki csoportjával közösen.

A felületkémiában szükséges alapvető felületenergetikai információkat szolgáltatató műszer a statikus kontaktszögmérés mellett többféle sebességgel megvalósítható dinamikus kontaktszögmérésre is alkalmas, amit a 90° -ig dönthető tárgyasztal és a peremszögváltozást nyomonkövető CCD (charge-coupled device) kamera biztosít. A kiértékelés egy számítógépes programmal végezhető el.



ChemBioOffice Ultra szoftver

A **BKI** beszerezte a szintetikus szerves kémiai laboratóriumok és a szerves vegyületek szerkezetét kutató laboratóriumok által naponta használt **ChemBioOffice Ultra szoftvert**.

A szoftver a megfelelő minőségű ábrák készítését teszi lehetővé, valamint az ábrázolt szerkezeti képletek alapján a vegyület analitikai adatait és várható NMR-spektrumait is kiszámítja, ezáltal lényegesen hozzájárul a mérési adatok ellenőrzéséhez is. Ezenkívül a szoftver lehetővé teszi alacsonyabb szintű fél-kvantitatív kvantumkémiai és molekulamechanikai számítások elvégzését, valamint a szerkezeteknek a számított energiatartalom alapján végzett optimalizálását és térbeli ábrázolását is, amely a térbeli kölcsönhatások értelmezésénél nélkülözhetetlen.

RENDEZVÉNYEK

Konferenciák

Magyar Tudomány Ünnepe 2011



“A mi világunk kémiája” szimpózium

A Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem (BME) Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kara által 2011. november 25-én rendezett szimpóziumon szóbeli és poszter előadásokat mutattak be öt intézmény (MTA Kémiai Kutatóközpont, BME, Eötvös Loránd Tudományegyetem, MTA Enzimológiai Intézet és MTA Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Kutatóintézet) szakmai képviselői.

A központ kutatói közül előadást tartott:

- **Kardos Julianna:** Új célfehérjék és fehérje célpontok: neuroprotekción és toxicitás
- **Soós Tibor:** Paradigmaváltás a katalízis területén: organokatalízis
- **Czugler Mátyás:** Számít a méret: egy szerkezetmeghatározás kémiája

Konferencia a vörösiszap-katasztrófa következményeiről és tapasztalatairól

A Polgári Védelem Világnapja alkalmából a Belügyminisztérium (BM) Országos Katasztrófavédelmi Főigazgatóság (OKF) és az Akadémia 2011. március 1-én szakmai konferenciát szervezett az MTA székházban.

Az OKF és az MTA a hosszú távú kármegelőzés és a lakosság biztonságának megteremtése érdekében együttműködési megállapodást kötött, aminek értelmében a két intézmény naprakész információkkal, szakértői háttérrel biztosítja a lakosság élet- és vagyonvédelmét.

Az újjáépítés a terv szerint halad

Kontrát Károly, a BM parlamenti államtitkára a konferencia nyitóelőadásában kiemelte, hogy korábban nem tapasztalt nemzeti összefogás jött létre a katasztrófa után, és abban bízik, hogy ez az egység az újjáépítés után a hétköznapi életben is megmarad. Felidézte, hogy a zagyarázó X-es kazettájának gátszakadása után rövid idő alatt mintegy egymillió köbméternyi vörösiszap és lúgos víz öntötte el a Veszprém megyei Kolontár, Devecser és Somlóvásárhely mélyebben fekvő részeit. A katasztrófa következtében tíz ember vesztette életét, másfél százan megsérültek, és több száz ház vált lakhatatlanná, több mint tíz négyzetkilométernyi területet öntött el a vörösiszap.

A kormány azonnali és hatékony intézkedéseket hozott. A katasztrófa után a kormány veszélyhelyzetet hirdetett ki, ezt az Országgyűlés kétszer is meghosszabbította, így a rendelkezés 2011. március végéig érvényben volt. Létrehozták az újjáépítési és a humanitárius központot, a kármen-





tő alapot, állami felügyelet alá vonták a timföldgyárat, félmilliárd forint értékben védőgátakat építettek, megvédték a folyókat, és már megkezdődött a károsultak új lakásainak építése.

A katasztrófa sújtotta térség újjáépítése, reha-

bilitációja elindult, így reális az esély arra, hogy a katasztrófát átélt települések és családok helyzete néhány hónapon belül véglegesen rendeződjön, megoldódjon. A kormány határozatokat fogadott el, amelyek alapján a károk felmérésére, ezt követően pedig a károk megtérítésére nyílt lehetőség.

Az államtitkár kitért arra, hogy a vörösiszap-katasztrófa után a védekezés több mint 3 milliárd Ft-ba került, az érintett települések mintegy 1,1 milliárd Ft-ot igényeltek a vis maior alapból.

A katasztrófavédelmi szervek jól és szakszerűen reagáltak, látták el feladatukat, és mindent megtettek az emberi élet és a javak mentése érdekében. Véleménye szerint lassan normalizálódik a helyzet a katasztrófa sújtotta térségben, és visszatérhet az élet a megszokott kerékvágásba mindhárom településen, a felelősöket pedig büntető-eljárás keretében már keresik.

A forgatókönyvet nekünk kellett írni

Bakondi György, országos katasztrófavédelmi főigazgató, katasztrófavédelmi biztos előadásában a katasztrófavédelem és a tudomány hatékony együttműködésének példajaként a tavaly októberi vörösiszapömlés utáni helyzetet említette, amikor az Akadémia tudósai a halálos áldozatokkal, több száz sérülttel és sok milliárd forintos anyagi kárral járó katasztrófa után alig 24 óra alatt, gyorsjelentéseket készítettek a helyszínen, hogy választ adjanak a miértekre és hogyanokra. A kormánybiztos szerint a katasztrófa sújtotta térségben élők két nagyon fontos üzenetet, így reményt kaptak: a

világ és a magyar nemzet egyaránt azt üzentte: *“ne féljeteK, segítünk”*, míg a miniszterelnök parlamenti felszólalása reményt adott az embereknek, hogy megtalálják a katasztrófa felelőseit, és a kárfelszámolás után lesz újjáépítés, és egyetlen károsultat sem hagy magára a kormány. A mentés és a stabilizálás olyan helyzetben, olyan katasztrófa után történt, amelyre senki nem volt felkészülve a világon. A vízügyi szakemberek és tudósok gyors megoldásokat találtak, hogy elkerülhető legyen egy újabb tragédia. Ha gátszakadás éjjel történik, sokkal több áldozat és sérült lehetett volna.

A tudomány bebizonyította, hogy az emberekért dolgozik

Pálinkás József elnök elmondta, hogy az MTA tagjai és kutatóintézeteinek munkatársai rendelkezésre állnak, ha segítségre van szükség. A kutatók tudományos eredményeikkel és megszerzett tudásukkal adják vissza a nemzetnek azt a támogatást, amelyet tanulmányaikhoz és munkájukhoz kaptak. Az elnök emlékeztetett a BM Országos Katasztrófavédelmi főigazgatójának a tragédiát követő kérésére, amelynek nyomán az MTA felkért szakértői már másnap a vörösiszap-katasztrófa helyszínére érkeztek, és néhány óra alatt készítettek el az első hiteles, tudományos igényű összefoglalót a helyzetről. Köszönetet mondott a kárfelmérésben és a mintavételekben részt vett tudóscsoport tagjainak. *„Kizárólag a tudomány szigorú módszereinek maradéktalan tiszteletben tartásával lehetünk képesek a minden alapot nélkülöző rémhírek cáfolatára.”* – fogalmazott az MTA elnök. A katasztrófák megelőzésének fontosságát hangsúlyozva arra figyelmeztetett, hogy a veszélyes tevékenységeket végzők szemléletében ne a profit, az anyagi előny, hanem az emberek biztonsága legyen a legfontosabb. Felhívta a figyelmet a tudományos élet és a gyakorlati szakemberek közötti együttmű-



ködés fontosságára is. Az elnök elmondta, hogy a most kötött megállapodás természeti és ipari katasztrófák esetén azt a célt szolgálja, hogy a szakemberek a lehető leggyorsabban tudjanak reagálni, s így a kár a lehető legkisebb legyen.

A tudományos előadások középpontjában a vörösiszap tárolásának és hasznosításának módjai, kiömlésének következményei, a kockázatkezelés tapasztalatai, az egészségkárosító hatások és a trauma pszichés terhelésének kezelése állt. Az előadók – vegyészek, talajtani, műszaki, katasztrófavédelmi és ökológiai szakemberek, orvos és pszichológus professzor – a lakosság és a környezet tudományosan megalapozott, átfogó megfigyelésének szükségességét emelték ki.

Száraztechnológia: nincs többé a vörösiszap - áradat veszély

Szépvolgyi János a Kormányzati Koordinációs Bizottság Tudományos Tanácsának tagja, az MTA KK AKI igazgatója a vörösiszap tulajdonságairól és tárolásának lehetőség módjairól szólva arra hívta fel a figyelmet, hogy a szárazanyag-tartalom növelésével az iszap kisebb helyet foglal el és alacsonyabbak a környezeti kockázatok is. A professzor bejelentette, hogy 2011. február utolsó napján Ajkán bevezették a száraztárolást.

Megoldások a környezet helyreállítására

Anton Attila, az MTA Talajtani Kutatóintézetének igazgatója hangsúlyozta előadásában, hogy a talaj állapotában nem következtek be visszafordíthatatlan károk és mérési eredményeket bemutatva bizonyította, hogy a nehézfém koncentrációja nem haladta meg a határértéket. A tájrehabilitációs szakmai konzorcium energianövények termesztését minősítette a legjobb megoldásnak a külterületek hasznosítására.

A felszíni vizek állapotáról a konferencián elhangzott, hogy a Marcal eredeti élővilágának visszaállítása egyszerű kotrással nem biztosítható. Az előadók komplex folyómeder-rekonstrukciót javasolnak a biodiverzitás újrateremtéséhez.

A lakosság egészségi állapotát nyomon követik

Schaff Zsuzsa, a Semmelweis Egyetem adjunktusa, az MTA egészségügyi szakértője úgy foglalta össze a tragédia utáni orvosi vizsgálatok legfontosabb megállapítását, hogy az elsődleges hatásokat nem számítva nincsen olyan eredmény, amely arra utalna, hogy a vörösiszap maradandó egészségkárosító hatást okozott volna. Az akadémikus hozzátette, hogy a vörösiszap egészségkárosító hatásainak kiküszöbölésére elengedhetetlen a Devecser és Kolontár környéki lakosság egészségi állapotának legalább évente történő ellenőrzése, figyelemmel a tüdő, a máj, a vese és a vérképző szervek működésére.

Csépe Valéria, az MTA főtitkárhelyettese arra figyelmeztetett, hogy a katasztrófa közvetlen hatásain túl legalább három évig kell számolni a pszichés utóhatásokkal. A krízisintervenció és az utógondozás folyamatát áttekintő előadásában különösen fontosnak nevezte a pontos és hatékony kommunikációt a lakosság és a külvilág felé egyaránt. Az akadémikus a feladatok között említette egy a helyszínre telepített és legalább két-három évig működő egészségügyi és szociális ellátó intézmény létrehozását. Hangsúlyozta, hogy így a katasztrófa által sújtott térségben biztosítható az ott élők szakszerű orvosi és pszichológiai ellátása.

Németh Tamás, az MTA főtitkára az érték, az érzelem és az értelem hármasa közötti egyensúly megőrzését nevezte a nehézségek idején szükséges nemzeti összefogás egyik alapvető követelményének. A tragédia tanulságait összegezve a közös érdekek megtalálását szorgalmazta. Az akadémikus a katasztrófa-helyzetek elkerülése érdekében a megelőzés fontosságát, bajban pedig a pontos és őszinte kommunikáció jelentőségét hangsúlyozta.

A konferencia idején, ünnepélyes keretek között írta alá Pálincás József és Bakondi György azt az együttműködési megállapodást, amelyet a katasztrófák elleni védekezés feladatainak eredményes megoldása és az összefogás hatékony szervezeti keretének biztosítása érdekében kötött a két intézmény. Hasonló dokumentumban egyezett meg a földrengésekből adódó katasztrófa- és veszélyhely-

zetek kezelésével kapcsolatos feladatokról az MTA Geodéziai és Geofizikai Kutatóintézet (GGKI) az Országos Katasztrófavédelmi Főigazgatósággal. A keretegyezményt **Hoffmann Imre** a BM OKF főigazgató-helyettese és **Závoti József**, az MTA GGKI igazgatója látta el kézjegyével.

A konferencián elhangzott előadások:

- Hoffmann Imre**: A vörösiszap-katasztrófa következményeinek kezelése, az újjáépítés koordinációja
- Németh Tamás**: Vörösiszap katasztrófa: következmények és tapasztalatok
- Szépölgyi János**: Vörösiszap-tulajdonságok, tárolás, hasznosítás
- Padisák Judit**: A felszíni vizek terhelése rövid és hosszabb időtávon
- Anton Attila**: Az elsődleges környezeti kockázatbecslést megalapozó talajvizsgálatok
- Gyuricza Csaba**: Energianövény termelési rendszer kialakítása a vörösiszap katasztrófa után
- Hoffer András**: A vörösiszap kipurzából származó szállópor (PM10) tulajdonságai és potenciális egészségügyi hatásai
- Tóth Ferenc**: A vörösiszap katasztrófa kockázatkezelési tapasztalatai
- Csonki István**: vízminőségi kárelhárítási munkák a vízfolyásokon és a gátakon
- Schaff Zsuzsa**: A vörösiszap egészségkárosító hatásai
- Csépe Valéria**: Pszichoszociális ellátás – krízisintervenció és utógondozás

3rd Nanosentry Conference

A BKI Neurokémiai Osztály szervezésében 2011. május 12-én rendezték a **3rd Nanosentry Conference** elnevezésű szakmai konferenciát.

Conferentia Chemometrica CC 2011

A többváltozós adatelemzéssel foglalkozó szakemberek immár 32. alkalommal találkoztak, ezúttal, Sümegen 2011. szeptember 18-21 között. Mint az utóbbi években mindig, nemzetközi konferenciát szerveztek **Conferentia Chemometrica CC 2011** néven. A rendezvény fórumként szolgált a különböző szakterületeken (analitikai kémia, fizikai kémia, statisztika, QSAR, korrelációs elemzés stb.) tevékenykedő kemometrikusok közötti információcseréhez. A szervezők a Magyar Kémikusok Egyesületének Kemometriai Szakcsoportja és az MTA Kemometriai és Automatikus Elemzési Munkabizottsága voltak.

Héberger Károly tudományos tanácsadó a rendezvény elnöke és a konferencia anyagából kiadott különszám (Journal of Chemometrics, Vol. 26, issue 3-4)

<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/cem.v26.3-4/issuetoc> szerkesztője is volt.



Kémia és Képzőművészet című képzőművészeti kiállítás a Kutatóközpontban

Maksay Gábor (BKI tudományos tanácsadó) szervezésében közel 100 képpel nyílt kiállítás 2011. január 11-én. Saját gyűjtésű és az Akadémia által kölcsönzött kémiai témájú képzőművészeti alkotások és a természet csodáinak képi megjelenítéseit tartalmazó kiállítást 2011. január 31-ig tekinthették meg az érdeklődő munkatársak és a vendégek a Kémiai Kutatóközpontban.



Fiatalkutatók Előadójelentése

Tóth Eszter az SZKI tudományos munkatársa előadást tartott *A kázzás módszer alkalmazása farmakokinetikai vizsgálatokban* címmel 2011. december 2-án.

*Kutatóközponti szemináriumok***Anyag- és Környezetkémiai Intézet szemináriumi**

2011. január 21.

Bozi János: Halogén- és nitrogéntartalmú szintetikus polimerek környezetre ártalmas hőbomlástermékei. Műanyag-hulladékok veszélyes pirolízistermékeinek kémiai átalakítása (PhD-házivédés)

2011. február 15.

Tóth András, Kereszturi Klára, Mohai Miklós, Bertóti Imre, Szépvölgyi János: Polietilén-tereftalát felületmódosítása hélium plazmaimmerziós ionimplantációval

2011. március 22.

Fodor Csaba: Poli(N-vinil-imidazol)-1-poli(tetrahidrofurán) amfil kotérhálók, fémkomplexeik és antimikrobiális nanohibridjeik

Szanka István: Funkciós csillag és hiperelágazásos polimerek előállítása kvázielő atomátadásos gyökös polimerizációval

2011. április 19.

Zügner Gábor László: Az éghajlatváltozás és a légkör kémiájának kapcsolata: elemi kémiai és fotokémiai reakciók kinetikai vizsgálata

2011. április 20.

Szabó Sándor: Poli(dimetil-sziloxan) alapú nanofázis szerkezetű polimer kotérhálók: Alkohol szuperabszorbensektől hőérzékeny intelligens anyagokig

2011. május 10.

Fodorné Kardos Andrea, Feczkó Tivadar: Mikrokapszulázási eljárások: szférikus agglomeráció, mágneses illetve fotokrom nanorészecskék előállítása emulziós módszerekkel

Tóth Judit, Szentmarjay Tibor, Plutzer Csaba, Gyenis János: Hidrokolloid szárítása mechanikus gejzír szárítóban

2011. június 14.

Szabó Emese: Atmospheric kinetics and photochemistry of oxygenated volatile compounds

2011. szeptember 20.

Szarka Györgyi, Iván Béla: A poli(vinil-klorid) degradatív átalakítása

Verebélyi Klára, Iván Béla: A benzotrifluoridban mint polimerizációs közegben rejlő lehetőségek

2011. október 18.

Pataki Piroska, Tátraaljai Dóra, Pukánszky Béla: Alignin potenciális alkalmazási lehetőségei műanyagokban

Kenyő Csaba, Péter Zsófia, Renner Károly, Pukánszky Béla: Polimer gázáteresztésének módosítása: kölcsönhatás és szerkezet

Keledi Gergely, Sudár András, Christoph Burgstaller, Renner Károly, Pukánszky Béla: Deformációs és törésmechanizmus háromkomponensű PP/elasztomer/fa kompozitokban

2011. november 3.

Kali Gergely: Fehérje alapú katalizátorok alkalmazása atomátadásos gyökös polimerizációban, avagy hogyan polimerizáljunk saját vérünkkel

Biomolekuláris Kémiai Intézet szemináriumai

2011. február 14.

Kékesi Orsolya: Szerves nanohordozók neurotoxicitásának vizsgálata

Sendula Róbert: Új L-nukleozidok mint potenciális antivirális és tumorgátló szerek szintézise

2011. február 28.

Jemnitz Katalin: Hepatobiliáris transzporterek és gyógyszerek intrerakcióinak vizsgálata

Siegl Zoltán: A „Metal-Organic Framework” vegyületcsalád bemutatása

2011. március 28.

Pál Ildikó: Kardiomiociták aktivitásának jellemzése elektrofiziológiai és gyors képkövető módszerekkel

Szakács Gergely: Új megközelítés a multidrog rezisztens tumorok terápiájára: az MDR-szelektív vegyületek felfedező kutatása

2011. április 11.

Monostory Katalin: Transzplantált betegek immunszuppresszív terápiájának módosítása a cyclosporin metabolizmusa alapján

Takács Daniella: Potenciális multidrog rezisztenciát gátló fentiazin származékok vizsgálata baktériumokon

2011. május 9.

Domonkos Celesztina: Kétmagvú átmenetifém-komplexek előállítása, szerkezetvizsgálata és in vitro biológiai hatása

Daragics Katalin: Ortogonális védőcsoport-stratégia *Neisseria meningitidis* lipopoliszacharidok előállítására

Csíki Zsuzsanna: Potenciális heparánáz inhibitorok szintézise

2011. november 7.

Radák Zsolt (Semmelweis Egyetem Sporttudományi Kutatóintézet): Oxidatív sérülés: sérülés vagy fiziológiai jel?

Kócsi Dániel: 2-amino piridinek új típusú előállítására

2011. december 5.

Dobi Zoltán: Azulénnvázas vegyületek szintézise

Jakus Judit: Terápiarezisztenciáért felelős faktorok vizsgálata dagados megbetegedések fotodinamikus kezelésében

Nanokémiai és Katalízis Intézet szemináriumai

2011. március 3.

Rosenbergerné Mihályi Magdolna: Zeolitmembránok szintézise, jellemzése és alkalmazása

2011. március 10.

Szabó Tamás: Mikrokapszulák készítése és alkalmazása öngyógyító és lassan kioldódó folyamatokhoz

2011. április 21.

Tálas Emília: A sebesség növekedés eredete az Orito-reakcióban

2011. május 19.

Keresztes Zsófia: Nanostruktúrált felületek alkalmazása biológiai jelenségek elektrokémiai vizsgálatára

2011. június 9.

Solt Hanna: Nitrogén-oxidok szelektív katalitikus redukciója metánnal indium tartalmú zeolitokon

2011. szeptember 22.

Lónyi Ferenc: Pirolízis olaj vízgőzös reformálására alkalmas katalizátor kifejlesztése

Edward Someus (Terra Humana Kft.): Innovatív Bioenergetikai és környezetvédelmi eljárás és prototípus-fejlesztés

2011. október 27.

Wacha András: Faanyagokból előállított aktív szenek szerkezetvizsgálata kisszögű röntgenszórással

Szerkezeti Kémiai Intézet szemináriumai

2011. június 23.

Tőke Orsolya: Belső molekuláris mozgások és funkcionális szerepük a human epesav-kötő fehérjében

2011. szeptember 7.

Tunyogi Tünde: Arany(I)-tartalmú szupramolekulák előállítása és szerkezeti jellemzése

2011. szeptember 27.

Palló Anna: Az IPMDH fehérje krisztallográfiás vizsgálata a berlini szinkrotronnál

2011. október 25.

Klencsár Zoltán: $Mn_xZn_{1-x}Fe_2O_4$ nanorészecskék szerkezetvizsgálata EPR/FMR spektroszkópiával és más módszerekkel

Külföldi előadók a Kémiai Kutatóközpontban

2011. február 28.

Alessia Bacchi (University of Parma, Italy): Water vapour uptake and extrusion by a crystalline metallorganic solid based on half-sandwich Ru(II)-building-blocks

2011. március 24.

Joachim Ulrich (Martin Luther-University, Halle-Wittenberg) (MTA KK, Chinoin/Sanofi-Aventis, Egis Nyrt. és Richter Gedeon Nyrt. közös rendezése): Technical crystallization day

2011. április 18.

Petri Pihko (Department of Chemistry, University of Jyväskylä, Finland): From Co-catalysts to dual catalysts: Efficiency and selectivity in organocatalysis

2011. április 19.

Ravi X. Fernandes (University of Aachen, Germany): Elementary reaction kinetics of fuel autoignition

2011. május 30.

Darren J. Dixon (Department of Chemistry, Chemistry Research Laboratory, University of Oxford, UK): Catalysis and cascades in complex alkaloid natural product synthesis

Ian Lewis (Novartis Pharma AG, Basel, Switzerland): SOM230: A new therapeutic modality for cushing's disease

2011. május 31.

Gerald Kada (Agilent Technologies): Applications of electrochemical scanning probe microscopy from Agilent Technologies

Gerald Kada (Agilent Technologies): Kelvin probe and scanning microwave microscopy on semiconductors and organic thin films

2011. június 6.

Bharat C. Dixit (V.P. & R.P.T.P. Science College, Vallabh Vidyanagar, Gujarat, India): Quinazolinone derivatives

2011. június 22.

Laura B. Gutierrez (Instituto de Investigaciones en Catálisis y Petroquímica, Madrid, España): Continuous synthesis of Au/SiO₂ nanoparticles using a microreactor

2011. augusztus 9.

Ákos Vértes (George Washington University, Washington, USA): Single cell analysis by mass spectrometry

2011. augusztus 30.

Dorota Gryko (Institute of Organic Chemistry Polish Academy of Sciences): Selective functionalizations of vitamin B12 as a route to NO-free activators of guanylyl cyclase (sGC)

2011. szeptember 8.

Joseph P. Kennedy (Institute of Polymer Science, University of Akron, Akron, USA): Novel polyurethanes with unparalleled combination of properties: Medical and premium applications

2011. szeptember 26.

Mária Bruma (Institute of Macromolecular Chemistry, Iasi, Romania): Progress in heterocyclic polymers and high performance materials based on them

2011. október 20.

Alexander Stadler (Anton Paar Hungary Kft, Veszprém): News and developments in microwave chemistry I-II.

Petra Kotnik (Anton Paar Hungary Kft, Veszprém): Special instruments for material characterisation I.: Zeta-potential measurement

Petra Kotnik (Anton Paar Hungary Kft, Veszprém): Special instruments for material characterisation II.: X-ray accessories

Kálmán Erika Doktori Konferencia

Az elhangzott előadások:

2011. május 26.:

Köszöntő és konferencia-névadás (Valyon József NKI igazgató)

A Dokisuli elnevezésű előadássorozatot *Kálmán Erika Doktori Konferencia* elnevezésre változtatta a Kutatóközpont Kálmán Erika professzor asszony iskolateremtő tevékenységének emlékére.

Paszternák András, Pilbáth Aranka: Az EMBER, aki kutatót faragott belőlünk – Dr. Kálmán Erika témavezetőnk emlékére

Biomolekuláris Kémiai Intézet előadásai

Szabó Mónika: Hepatobiliáris uptake transzporterek vizsgálata humán és patkány májsejteken

Balog József András: Új izokinolin-származékok szintézise palládium-katalizált reakciókkal

Molnár Laura: Szerves hidridek alkalmazása SET-reakciókban

Horváth Dániel Vajk: Triszubsztituált benzolszármazékok szintézise organokatalitikusan

Domonkos Celesztina: Kétmagvú átmenetifém-komplexek szerkezetvizsgálata és in vitro biológiai hatása

Kékesi Orsolya: Putreszcinből képződő γ -amino-vajsav szerepe a neuronok aktivitásának szabályozásában

Takács Daniella: Fentiazinszármazékok szintézise és vizsgálata baktériumokon

A szekcióelnök **Vereczkey László**, a BKI Farmakobiokémiai Osztályának vezetője volt.

Nanokémiai és Katalízis Intézet előadásai

Harnos Szabolcs: Oktánsav szelektív hidrogénezése oktilalkohollá amorfizált zeolit hordozós Cu és CuIn katalizátorokon

Szijjártó Gábor: Hidrogén előállítása bioetanol reformálásával nemesfém-mentes Ni/MgAl₂O₄ alapú katalizátorokon

Firkala Tamás: Aromás merkaptovegyületek viselkedése SERS-spektroszkópiában

Kék Ildikó: Szénnanocsó alapú szuperkondenzátorok

Mohos Miklós: Biológiai szenzorok kialakítása félvezető felületek módosításával

A szekcióelnök **Kiss János**, a Szegedi Tudományegyetem Természettudományi és Informatikai Kar Kémiai Tanszékcsoportjának professzora és az MTA NKI Reakciókinetikai Csoportjának munkatársa volt.

Szerkezeti Kémiai Intézet előadásai

Gyömöre Ádám: Ferrocénium származékok tervezése, szintézise, szerkezetvizsgálata

Holczbauer Tamás: Tiokarbamid organokatalizátorok átmenetifém-komplexeinek szerkezete

Szabó Máté: Drotaverin szolvátok kristályszerkezete

Pál Krisztina: Kumarinok fluoreszcenciájának vizsgálata

Jobbágy Csaba: Oldószermentes mechanokémiai eljárás többfemes arany(I)cianidok előállítására

Mizsei Réka: Merocianinok konformációs vizsgálata NMR-spektroszkópiával

Horváth Gergő: A ligandumkötődés dinamikai sajátosságainak NMR-spektroszkópiai vizsgálata a humán epesavkötő fehérjében

A szekcióelnök **Faigl Ferenc**, a BME Vegyészmérnöki és Biokémiai Kar Szerves Kémia és Technológia Tanszékének egyetemi tanára volt.

2011. május 27.

Anyag- és Környezetkémiai Intézet előadásai

Horváth Zsuzsanna: A kristályszerkezet és a merevség összefüggése polipropilénben: a gyakorlatban elérhető modulus korlátai

Zügner Gábor László: Impulzuslézer-fotolízis gázfázisú elemi reakciók kinetikai vizsgálatára

Szabó Emese: Légkörkémi folyamatok laboratóriumi kutatása szmog kamra berendezésben

Farkas Mária: Gyorsáramlásos módszer gázfázisú elemi reakciók kinetikai kutatására

Kenyó Csaba: Funkcionális töltőanyagok polimerrendszerekben

Soltész Amália: Multifunkciós ojtásos csillag kopolimerek előállítása és felhasználása

Kasza György: Multifunkciós hiperelágazásos poliglicerolok szintézise

Szanka István: Multifunkciós csillag és hiperelágazásos polimerek szintézise és reakcióik

Szabó Ákos: Poliizobutilén és poli(poli(etilén-oxid)-metakrilát) szegmensekből felépített különleges polimerrendszerek előállítása

Fodor Csaba: Poli(N-vinil-imidazol) alapú, nanoszerkezetű amfilifil polimer kotérhálók és gélek

Szarka Györgyi: Újrahasznosításra alkalmas poli(vinil-klorid) előállítása degradatív módosítással

Verebélyi Klára: Benzotrifluorid alkalmazása polimerizációs reakciók közegeként

Kutatóközponti Tudományos Napok

Az MTA Kémiai Kutatóközpont 2011. november 22-24-én, 16. alkalommal rendezte meg a Kutatóközponti Tudományos Napok című előadássorozatot. A megnyitót **Pálinkás Gábor**, a Kutatóközpont főigazgatója tartotta, ezt követte **Tőke Orsolya** *Szerkezet, dinamika és funkció összefüggései a lipidkötő fehérjékben* című plenáris előadása. A három napos tudományos ülésen összesen 39 előadás hangzott el tematikailag négy szekcióba csoportosítva (szerkezeti kémiai; biomolekuláris kémiai; nanokémiai és katalíziskutatási; anyag- és környezetkémiai). A 35. életév alatti előadók száma összesen 19 fő volt.

Szerkezeti kémiai szekció

- **Mayer István**, Pedro Salvador, Bakó Imre, Stirling András: Vannak-e atompályák a molekulákban?
- **Tárkányi Gábor**, Király Péter: Asszociátumok szerepe a Takemoto-katalizátor működésében
- **Király Péter**, Tárkányi Gábor: 1H-19F és 1H-2H kettősrezonancia NMR-módszerek
- **Domján Attila**, Mezey Péter, Varga Jenő: Nanofázis-szeperált kotérhálók fázishatárának vizsgálata szilárd fázisú NMR-módszerekkel
- Drahos László, Ozohanics Olivér, Turiák Lilla, Mercedes de Frutos, **Vékey Károly**: Glikozilációs mintázatok meghatározása és ezek biokémiai jelentősége
- **Palló Anna**, Gráczer Éva, Angelo Merli, Závodszy Péter, Vas Mária, Manfred S. Weiss: Az izopropilmalát dehidrogenáz aktív enzimet mintázó kvaterner komplexének szerkezete
- **Miskolczy Zsombor**, Biczók László: Fotokromizmus kukurbit[8]uril makrociklus üregében
- **Varga Olívia**, Kubinyi Miklós, Vidóczy Tamás, Baranyai Péter, Kállay Mihály, Károlyházy Gyula: Spiropiránok fémkomplexeinek egyensúlyi és kinetikai jellemzése
- **Klencsár Zoltán**, Korecz László, Sajó István, Osán János, Németh Péter, Kuzmann Ernő, Mészáros Sándor, Tolnai Gyula: Az EPR/FMR spektroszkópia alkalmazása mágneses

nanorészecskék vizsgálatára

- **Korecz László**, Bóta Attila, Varga Zoltán: Rézionok és foszfolipid vezikulák kölcsönhatásának vizsgálata ESR-spektroszkópiával
- **Kristyán Sándor**: Korrelációs energia és bázis készlet hiba becslése Hartree Fock-SCF számításokban léptékmódosítással (finom szabályozással) az SCF-algoritmus alatt néhány programsor beírásával és analitikus integrálással, de a számítási idő és merevlemez szükséglet növelése nélkül
- **Bombicz Petra**: Kalixarén szabászat

Biomolekuláris kémiai szekció

- **Héja László**, Kékesi Orsolya, Szabó Pál, Nyitrai Gabriella, Kardos Julianna: Putresciből képződő gliális GABA szerepe az idegsejtek aktivitásának szabályozásában
- **Pál Ildikó**, Nyitrai Gabriella, Kardos Julianna: Új módszer idegi sejtek aktivitásfüggő optikai jelének jellemzésére
- **Simon Ágnes**, Bencsura Ákos, Kardos Julianna: Gamma-aminovajsav transzporter funkció modellezése
- **Horváth Dániel Vajk**, Ferenczi-Palkó Roberta, Soós Tibor: Tri- és tetraszubsztituált benzolszármazékok organokatalitikus szintézise
- **Fegyverneki Dániel**, Soós Tibor: Szelektív hidroszililezési módszer fejlesztése
- **Héberger Károly**: Mintázatfelismerés és osztályozás az élelmiszerkémiaiában

Nanokémiai és katalíziskutatási szekció

- **Pilbáth Aranka**, Szabó Tamás, Telegdi Judit, Nyikos Lajos: Öngyógyító bevonatok vizsgálata pásztázó elektrokémiai mikroszkóppal
- Badari Andrea Cecília, **Kollár Márton**, Pölczmann György, Valyon József: Cseppfolyós motorhajtóanyag és kenőolaj alapanyag előállítása Fischer-Tropsch viasz katalitikus hidrokonzverziójával
- **Barthos Róbert**, Valyon József: A Wacker-reakció

- heterogenizálása Pd/V₂O₅ katalizátorokon
- **Onyestyák György**, Harnos Szabolcs, Kalló Dénes: Új In,Ni/Al₂O₃ katalizátor biomassza eredetű karbonsavak szelektív hidrogénezésére alkoholokká
 - **Keszthelyi Tamás**, Holló Gábor: Kétdimenziós lipid szerveződések előállítása, jellemzése és biomembrán modellként történő alkalmazása
 - **Karácsony Zsuzsanna**, Mihály Judith, Bóta Attila: A Tris puffer-rendszer hatása a DPPC/víz modellmembrán szerkezetére
 - **Kremmer Tibor**, Bóta Attila, Varga Zoltán, Wacha András, Mihály Judith, Szigyártó Imola Csilla, Pálmai Marcell, Illyés János, Forrai Erika: A hialuronsav vizsgálata
 - **Szigyártó Imola Csilla**, Szabó László, Simándi László: Mangántartalmú komplex enzimutánzó tulajdonságainak vizsgálata
 - **Szijasztóné Majrik Katalin**, Tompos András: Metanol fotokatalitikus reformálása átmeneti fémekkel módosított TiO₂ katalizátorokon
 - **Gubán Dorottya**, Tompos András: PEM tüzelőanyag-cellák CO-toleráns anód elektrokatalizátorainak tervezése
 - **Pásztai Zoltán**, Hakkel Orsolya, Keszthelyi Tamás, Tompos András, Gucci László: Szén-monoxid és víz kölcsönhatása ionbombázással módosított Au(111) felületen
 - **Firkala Tamás**, Vajna Balázs, Farkas István: Ezüst nanorészecskék alkalmazása felületerősített Raman-térképezésben

Anyag- és környezetkémiai szekció

- **Mohai Miklós**, Bertóti Imre: Nanocsövek felületén lévő rétegek vastagságának meghatározása XPS-intenzitásokból
- **Bozi János**, Blaszó Marianne: Nitrogéntartalmú polimerek katalitikus hőbomlása zeolitok jelenlétében
- **Farkas Mária**, Illés Ádám, Petri Balázs, Dóbbé Sándor: A levulinsav-etilészter és a γ -valerolakton reakciókinetikai és fotokémiai vizsgálata

- **Fodor Csaba**, Kali Gergely, Domján Attila, Németh Péter, Bánfi Renáta, Zihné Perényi Katalin, Ralf Thomann, Yi Thomann, Rolf Mülhaupt, Iván Béla: Nanoszerkezetű polimer kotérhálók és nanohibridjeik
- **Verebélyi Klára**, Iván Béla: A benzotrifluorid mint új, alternatív polimerizációs reakcióközeg
- **Szanka István**, Iván Béla: Funkciós csillag és hiperelágazásos polimerek előállítására kváziélő atomátadásos gyökös polimerizációval
- **Demeter Attila**: Mérések és kérdések: a kvantumhasznosítási tényezők meghatározásának aktuális problémái
- **Fekete Erika**, Csiszár Emília: Inverz gázkromatográfia alkalmazása cellulóz alapú szubsztrátumok felületi tulajdonságainak jellemzésében
- **Tátraaljai Dóra**, Kirschweng Balázs, Kovács János, Földes Enikő, Pukánszky Béla: A kurkumin hatása a polietilén feldolgozási stabilitására

A zsűri felkért elnöke **Pokol György** (dékán, BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar), tagjai pedig **Beck Mihály** (az MTA rendes tagja), **Gráf László** (az MTA rendes tagja), **Huszthy Péter** (egyetemi tanár, tanszékvezető-helyettes, BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék), **Medzihradszky Kálmán** (az MTA rendes tagja), **Nyulászi László** (egyetemi tanár, tudományos dékánhelyettes, BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék és **Szántay Csaba** (az MTA rendes tagja) volt.

A tudományos rendezvényen elhangzott előadások alapján a zsűri két kutatói díjat, három fiatal kutatói díjat, egy külön dicséretet, valamint egy kiváló poszter díjat javasolt és további két posztert pedig külön dicséretben részesített.

Kutatói díjban részesült:**Bombicz Petra, a**

Bombicz Petra: *Kalixarén szabászat,*

Vékey Károly, a

Drahos László, Ozohanics Olivér, Turiák Lilla, Mercedes de Frutos, Vékey Károly szerzők által jegyzett *Glikozilációs mintázatok meghatározása és ezek biokémiai jelentősége* című előadásaiért.

Fiatal kutatói díjban részesült**Horváth Dániel Vajk, a**

Horváth Dániel Vajk, Ferenczi-Palkó Roberta, Soós Tibor: *Triés tetraszubsztituált benzolszármazékok organokatalitikus szintézise,*

Karácsony Zsuzsanna, a

Karácsony Zsuzsanna, Mihály Judith, Bóta Attila: *A Tris puffrendszer hatása a DPPC/víz modellmembrán szerkezetére és*

Tátraaljai Dóra, a

Tátraaljai Dóra, Kirschweng Balázs, Kovács János, Földes Enikő, Pukánszky Béla: *A kurkumin hatása a polietilén feldolgozási stabilitására* című előadásáért.

Külön dicséretben részesült**Illés Ádám és Petri Balázs, a**

Farkas Mária, Illés Ádám, Petri Balázs és Dóbé Sándor szerzők által bemutatott *A levulinsav-etilészter és a γ -valerolakton reakciókinetikai és fotokémiai vizsgálata* című előadásukért.

A Kutatóközpont 2011. évi poszter kiállításán szereplő poszterek közül **Kiváló Poszter díjban** részesült az alábbi poszter:

Szabó L. Sándor, Iván Béla: *Hőmérséklet-érzékeny, intelligens amfifil polimer kotérhálók,* amit az MKE 1. Nemzeti Konferencián mutattak be (Sopron, 2011. május 22-25).

Külön dicséretben részesültek a következő posztterek:

Stirling András, Pápai Imre: *H₂CO₃ forms via HCO₃⁻ in water* (XV. International Workshop On Computational Physics and Materials Science: Total energy and force methods, Trieste, Italy, 2011. január 13-15.)

Szabó Mónika, Veres Zsuzsa, Vereczkey László, Jemnitz Katalin: *Bozentán és ciklosporin-A hatása a taurokolát hepatobiliáris transzportjára patkány és humán hepatocitákban* (TOX 2011 Konferencia, Sümeg, 2011. október 12-14.)

A tudományos napok lezárásaként tartott fogadáson adta át **Pálinkás Gábor** főigazgató a Kutatóközpont érdekében hosszú időn keresztül végzett munkájuk és kiemelkedő tudományos eredményeik elismeréseképpen a **2011. évi Pro Arte Chemica** érmeket: **Lengyel Béla**, az MTA doktora, **Vereczkey László**, az MTA doktora és **Vinkler Péter**, az MTA doktora részére.



További rendezvények

Arrhenius Szeminárium (2011. január 27.)

Vitaindító előadás:

Lendvay György: Reakciósebességek hőmérsékletfüggése - az Arrhenius-formula és értelmezése

Hozzászólás a Kutatóközpont részéről:

Mayer István: Az Arrhenius-egyenlet algebrájáról

Hajós György: Kemoszelektivitást eredményező termodinamikailag és kinetikailag kontrollált reakciók

Felkért hozzászólók:

Pálinkás Gábor, Simon István, Závodszy Péter

Meghívott résztvevők:

Gráf László, **Kardos Julianna**, Perczel András, Reményi Attila, **Simonyi Miklós**, Tőke Orsolya

Az **NKI Felületmódosítás és Nanoszerkezetek Osztálya** az Agilent Technologies hivatalos magyarországi képviselőjével (Kromat Kft.) közös szemináriumot rendezett 2011. május 31-én. Új alkalmazások a pásztázó tűszondás mikroszkópia területén témakörben.

Paszternák András, **Keresztes Zsófia**, **Nyikos Lajos:** A „Pico” pásztázó tűszondás mikroszkóp egy évtizede az MTA Kémiai Kutatóközpontban - eredmények és tapasztalatok

2011. december 9-én átadták az ELTE TTK új lézerlaboratóriumát

A lézerlaboratórium az ELTE TTK és az MTA KK AKI által létrehozott, közös üzemeltetésű Környezeti Kémiai-Fizikai Laboratóriumában működik. A laboratórium megnyitása alkalmából a Kutatóközpont részéről az alábbi előadás hangzott el:

Dóbé Sándor, **Demeter Attila** (AKI): Elemi kémiai reakciók, fotokémiai és fotofizikai folyamatok kutatása

MTA Fizikai-Kémiai és Szervetlen Kémiai Bizottság, Reakciókinetikai és Fotokémiai Munkabizottságának előadónál 2011. május 5-én és 6-án az alábbi előadások hangzottak el:

- **Miskolczi Zsombor, Megyesi Mónika, Biczók László, Helmut Görner** (MTA KK, Max Planck Institute for Bioinorganic Chemistry): Biológiai fontosságú vegyületek hatása a flavoproteinek alkaloid fluoreszcenciás sajátságaira
- **Nagy Tibor, Lendvai György** (MTA KK): Egy bimolekulás kémiai reakció mechanikája - a metán és a hidrogénatom reakciója
- **Szabó Péter, Lendvai György** (MTA KK): Elektrongerjesztett molekuláris oxigén reakciója hidrogénatommal. Kváziklasszikus trajektóriaszámítások
- **Zügner Gábor László** (MTA KK): Az éghajlatváltozás és a légkör kémiai állapotának kapcsolata: elemi kémiai és fotokémiai reakciók kinetikai vizsgálata
- **Pál Krisztina, Baranyai Péter, Bitter István, Gottfried Grabner, Hégyes Bence, Hessz Dóra, Kállay Mihály, Gottfried Köhler,**
- **Kubinyi Miklós és Vidóczy Tamás** (MTA KK, BME, University of Vienna): Szabadon rotáló 7-amino-kumarinok gerjesztett állapotának dezaktiválódási csatornái

A **Magyar Égéstudományi Bizottság** 2011. június 9-én tartotta az újjáalakuló ülését.

Az **MTA Termoanalitikai Munkabizottság újjáalakuló ülése** Az MKE Termoanalitikai Szakcsoport és az MTA Termoanalitikai Munkabizottság közös szervezésében rendezett szakmai ülésén a Kutatóközpont részéről az alábbi előadás hangzott el 2011. december 7-én:

Várhegyi Gábor, Pekkerné Jakab Emma, Sebestyén Zoltán, Bobály Balázs (AKI): Modelllezés, kiértékelés és jóslás a termikus analízisben.

MTA Kémiai Tudományok Osztályának, Analitikai Kémiai Bizottság, Elválasztástudományi Munkabizottságának előadóülésén 2011. december 13-án a kutatóközpontból **Drahos László** (SZKI) előadást tartott, melynek címe *Atherosclerosis biomarkerek vizsgálata nanoHPLC-MS/MS technikával* volt.

Kapuy Ede emlékelőadásra 2011. december 8-án került sor az ELTE Kémiai Intézetében. A *Kémiai információk kinyerése hullámfüggvényekből* című előadást **Mayer István** tartotta meg.

A 2011. április 16-án vetített Delta tudományos magazinban **Iván Béla** tudományos tanácsadó és **Verebélyi Klára** tudományos segédmunkatárs az AKI által kidolgozott környezetbarát polisztirol eljárásáról számolt be.

AKI Kíváncsi Kémikus nyári kutatótábor

2011-ben harmadszor került megrendezésre az *AKI Kíváncsi Kémikus* nyári tábor 2011. június 26 és július 2 között a Kémiai Kutatóközpontban. A Kutatóközpont vezető kutatóiból alakult Bíráló Bizottság alaposan tanulmányozta, körültekintően értékelte a beérkezett pályázatokat, és meghozta felelősségteljes döntését. Ennek eredményeképpen 25 diáknak adták meg a lehetőséget arra, hogy a kiírt 13 modern kutatási téma valamelyikén dolgozhatott. A fiatalok kutatásairól miniszimpózium keretén belül adtak számot. A miniszimpóziumot megnyitotta **Valyon József**, NKI igazgató.

Nanokémiai és Katalízis szekció

vezette: **Tompos András**, tudományos főmunkatárs

Ignác Gergő és Varga Márton: Családi házak energiaellátására alkalmas hidrogén tüzelőanyag-cellák

Nagyházi Márton és Sóvári Dénes: Korszerű üzemanyag-adalékok előállítás

Fazekas Zsolt és Turjányi Attila: Hogyan épül fel a sejtmembrán?

Biomolekularis Kemiai szekcio

vezette: **Vereczkey Laszlo**, BKI tudomanyos tanacsado

Egyedi Vivien es Schranc Almos: A voros verfestek es a level-zold kozos alapvaza a porfirin

Borsi-Lakatos Boglarca es Zubor Andras: Hogyan keszul az aszpirin?

Fekete Dorottya es Ferenc Katalin: Gyogyszertranszport majsejtekben

Szerkezeti Kemiai szekcio

vezette: **Deak Andrea**, SzKI tudomanyos fomuunkatars

Pocs Aniko Bernadett, Rutkai Zsofia Reka: Szines jelzoanyagok az anyagtudomanyban

Takacs Balint: A viz, a metanol es keverekuk folyadekszerkezete

Imre Sandor, Sulyok-Eiler Mate: Tervezzunk es epitsunk kristalyokat!

Anyag- es Kornyezetkemiai szekcio

vezette: **Demeter Attila**, AKI tudomanyos tanacsado

Berez Zoltan Szabolcs, Szentendre Zsolt: Uj tipusu biouzemanyagok kutatasa

Szanto Anna: Milyen muanyagok alkotjak a mobiltelefon egyes alkatreszeit?

Albert Katalin, Bajcsi Aron, Boros Adam: A sokoldalú makromolekulák

Palfi Dora, Páncsics Nikolett: Az-e a DNS, amit lerajzolunk?

A miniszimpozium zárasaként **Palinkás Gabor** főigazgató értékelte az előadásokat.



BME Szent-Györgyi Albert Szakkollégium látogatása (2011. március 25.). **Vinkler Péter** tudományos tanácsadó bevezetője után az alábbi előadások hangoztak el:

Nyikos Lajos: Nanoszerkezetek

Bóta Attila: Nanorészecskék gyógyászati és diagnosztikai célokra

Szegedi Ágnes: Nanopórusos szilikátok

Kereszturi Klára: Plazmák anyagtudományi alkalmazásai

Iván Béla: Különleges nanoszerkezetű polimerek, mint új anyagi rendszerek

Mészáros Gábor: Nanokontaktusok – egyedi molekulák elektromos tulajdonságainak vizsgálata

Az előadásokat az alábbi laborok megtekintése követte: STM-AFM laboratórium, SEM, TEM Elektronmikroszkópiai laboratórium, SAXS laboratórium, Felületkémiai laboratórium, Plazmakémiai laboratórium

Jelentős megújulás az MTA kutatóhálózatában

Pálinkás József az MTA elnöke, az Akadémia idei májusi közgyűlésén bejelentette a kutatóhálózat megújításának szükségességét: *„A kutatóhálózat jelenlegi állapotában nem tartható fenn. Infrastruktúrája rohamosan értéktelenedik, utánpótlása nem biztosított, szerkezete nem felel meg a tudományos kutatások modern követelményeinek.”*

A közgyűlés után azonnal megkezdődött a tervezési és egyeztetési folyamat a kutatóintézet-hálózat szétaprózottságát megszüntető, a szakmaiságot, a fenntarthatóságot és a versenyképességet szem előtt tartó, a kutatási műhelyek autonómiáját megőrző új szerkezet létrehozásáról.

Az elnök a közgyűlést követően 2011. május 18-án az



Akadémiai Kutatóhálózat Vezetőinek Tanácsa (AKVT), azaz valamennyi intézet igazgatója elé terjesztette javaslatát a kutatóhálózat megújítására. A javaslatot ismertette az Akadémia Elnökségével és az Akadémiai Kutatóintézetek Tanácsával (AKT) is. Ezzel párhuzamosan a főtitkár és a főtitkárhelyettes tárgyalásokat folytatott a kutatóintézetek igazgatóival. Az egyeztetések eredményeként kialakult a kutatóhálózat új szerkezetére vonatkozó stratégiai javaslat, amelyet az MTA elnöke tudományterületenként újra egyeztetett az intézetek igazgatóival. Az egyeztetésen az igazgatók támogatták a megújítási javaslatot, és az ezt megerősítő nyilatkozat aláírásával vállalták, hogy aktívan közreműködnek a megújítási koncepció megvalósításában. Az egyeztetési folyamatban kialakult stratégiai tervet az AKT 2011. június 27-i ülésén megtárgyalta és egyhangúlag elfogadta. Az Akadémia Elnökségének tagjai 2011. június 28-i ülésükön szintén egyhangúlag támogatták a tervezetet, és felhatalmazták az elnököt, hogy indítsa el az átalakítás szakmai, jogi, pénzügyi adminisztratív előkészítéséhez szükséges tárgyalásokat és közigazgatási egyeztetéseket, és mindezek nyomán készíttesse el a 2011. december 5-i közgyűlés elé terjesztendő határozati javaslatot.

A kutatóhálózat megújítása szerves folytatása annak az elnöki programnak, amely az Akadémiai törvény módosításával kezdődött, a jelentős hazai és nemzetközi elismerést kiváltó – kiemelkedő fiatal kutatók hazahozatalát és itthon tartását célzó – Lendület programmal és az intézethálózat infrastrukturális megújítási modelljének első beruházásaként elindított **MTA-Q2** programmal folytatódott. Már korábban nyilvánvalóvá vált, hogy a kis intézetek nem tudják biztosítani a megfelelő kutatási feltételeket, a szakmai előmenetelt, és fokozottan kiszolgáltatottak a hazai és nemzetközi pályázati rendszer útvesszőinek és változásainak. Tartalékok és átcsoportosítható pénzeszközök hiányában a pályázatokhoz szükséges önrészt sem tudják vállalni. A kutatásra rendelkezésre álló anyagi eszközök felhasználása nem elég hatékony, a szétaprózott intézethálózatban a rendelkezésre álló források a kívánatosnál nagyobb arányban fordítódnak adminisztrációra.

A nagyobb gazdasági hatékonysággal működtethető megújult intézményekben az adminisztratív és vezetői szintek csökkentésével kevesebb lesz a kutatáshoz kapcsolódó adminisztratív teher. A kutató-

hálózat megújítását a fenntarthatósági szempontok mellett szakmai érvek is alátámasztják, hiszen a nagyobb egységekben könnyebbé válik a tudományterületek közötti együttműködés, az összetett kutatási feladatok megoldása és nagyobb kutatási programok indítása, továbbá a társadalmi és gazdasági elvárásoknak való megfelelés.

A tervek szerint a jelenlegi 40 intézményből (38 kutatóintézetből és 2 kutatóközpontból) álló intézethálózat egy 15 költségvetési szervből (várhatóan 6 kutatóintézetből és 9 kutatóközpontból) álló hálózattá alakul. A kutatóhálózat megújításával párhuzamosan az MTA elnöke csökkenteni kívánja a nem kutatóintézeti körbe tartozó költségvetési szervek számát is, a jelenlegi 18 költségvetési szervből 8 jön létre. Az Akadémia költségvetési szerveinek teljes száma így a jelenlegi 58-ról 23-ra csökken.

A teljes intézményhálózat átalakítása várhatóan mintegy 500 millió Ft-os megtakarítást eredményez. Az új, hatékonyabb intézményrendszer megteremti továbbá annak lehetőségét, hogy a kutatás és fejlesztés finanszírozásának növelése mellett elkötelezett kormány a fejlesztési forrásokat koncentráltan és hatékonyan fordíthassa a magyarországi felfedező- és célzott kutatásokra és innovációra. Az intézmények alkalmasabbá válnak a gazdasági szféra kutatási és innovációs megbízásainak fogadására is.

Az MTA kutatóhálózatának megújítása tervezetten, lendületesen, az érintettek és a döntéshozó testületek támogatása mellett történik. A megújulás nyomán 2012. januárjától szakmai és igazgatási szempontból is hatékonyabban működő, a társadalmi és gazdasági elvárásoknak megfelelő, a nemzetközi kutatási térben is számottevő kutatóhálózat szolgálhatja a közjót és járulhat hozzá Magyarország versenyképességéhez.

Forrás: mta.hu, 2011. június 29.

Kutatói Fórum az Akadémián

az akadémiai intézethálózat megújításáról

A Magyar Tudományos Akadémia elnöke azzal a céllal hívta össze az MTA 2012. január elsejétől megalakítani tervezett, 9 kutatóközpontot alkotó intézetek kutatóit, munkatársait, hogy az intézethálózat megújításának szempontjairól, folyamatáról és a változással megnyíló lehetőségekről hiteles tájékoztatást, a felmerülő kérdésekre pontos válaszokat adjon.

A 2011. szeptember 19-i kutatói fórum első volt azoknak a találkozóknak a sorában, amelyeken **Pálinkás József** tájékoztatta az érintetteket a szerkezeti megújítás tervének részleteiről, az új kutatóközpontok kialakításának tervezett lépéseiről.

A tervezett új struktúrában az MTA Bölcsészettudományi Kutatóközpontját alkotó hét intézet (Filozófiai, Régészeti, Történettudományi, Irodalomtudományi, Művészettörténeti, Néprajzi, Zenetudományi Intézetek, valamint a Társadalomkutató Központ) kutatói előtt tartott elnöki tájékoztatóban Pálinkás József leszögezte, hogy a fórumok célja az, hogy a kutatói közösségek felismerjék a megújítás szükségességét, kövessék és részvételükkel együttműködően alakítsák a folyamatot, a maguk helyén és eszközeivel hozzájárulva az intézethálózat hatékonyabb működését eredményező változásokhoz.

Az elnöki áttekintés három tekintetben bontotta ki a megújító folyamatot és annak részleteit. Elsőként a kutatóintézet-hálózat átalakításának koncepcionális és stratégiai vonatkozásairól szólt, kitérve annak szükségszerűségére és integráns helyére az új Akadémiai Törvény megalkotása, a szerves átalakítást eredményező Lendület pályázati minta és az intézményhálózat infrastrukturális megújításának gördülő modelljeként ismeretes **MTA-Q2** projekt sorában.

Pálinkás József ezt követően részletesen feltárta azokat az összetett okokat, amelyek az intézethálózat megújítását elkerülhetetlenné teszik, így a szétaprózottságot, a kutatási témaváltásokat megnehezítő, rugalmatlan intézményi struktúrát, a kutatási kapacitások megosztottságát és nem egyenletes eredményességét, a párhuzamosságokat és aránytalanságokat. Kitért arra, hogy mindezek együttes jelenléte

a jelenlegi szerkezetben a kutatóhálózat elsorvadásához, megszüntetéséhez vezet. Az elnök példákkel illusztrálta, hogy a megújításnak sem rövid sem hosszútávon nem lehet alternatívája a jelenlegi rendszer fenntartása, annak működési és finanszírozási ellehetetlenülése miatt, ezért a bekövetkező változással járó nehézségeket is ebből a szempontból kell újraértékelni. Nyilvánvalóvá tette, hogy a megújítás szándéka nem személyes törekvés, és sikerességének biztosítéka, ha a megújítás szükségessége az érintettek meggyőződésévé válik. A létrejövő új hálózatról szólva az elnök hangsúlyozta, hogy a megújult rendszerben a kutatók és az intézetek egyaránt megőrzik tudományos autonómiájukat, növelhetik kutatói hatékonyságukat és tervezhetik tudományos pályájukat. Kiemelte, hogy az új központokban a kutatás céljai és szempontjai lesznek a legfontosabbak, az adminisztráció ennek érdekében és ezt szolgálva alakul át, egyúttal rámutatott, hogy az ésszerűsítés nyomán a kutatási egységek rugalmasabban működhetnek. Ugyanakkor azt is elmondta, hogy a kutatóközpontok intézetei számára nem a tudományági megítélésre való hivatkozás, hanem a tudományterületen elért mérhető tudományos teljesítmény, a kutatói eredményesség és a kiválóság teremthet biztos, hosszú távú tudományos kilátásokat.

Az Akadémia elnöke biztosította a jelenlévő kutatókat arról, hogy a decemberi közgyűlési döntést követően a megújult struktúrában létrejövő központok kiszámítható költségvetési keretekkel kezdhetik el működésüket 2012-ben, és megközelítőleg két év áll majd rendelkezésükre, hogy az új egységekben való hatékony működésük belső feltételrendszerét tovább finomítsák.

Kérdésekre válaszolva Pálinkás József kitért arra, hogy az idei elvonásokból és nem a megújítási programból következő öt százalékos létszámleépítést követően további megvonások nem várhatóak, és a strukturális megújítás első lépésével megtakarítható mintegy félmilliárd forint a kutatóhálózatban a kutatásra fordítható forrásokat növeli. Egyértelművé tette, hogy a megújuló rendszerben intézeti szinten is a kutatás és működés hatékonyságát és prioritásait figyelembe vevő stratégiai tervezésre, gondolkodásra lesz szükség.

Az informatikai és folyóirat-kiadási, valamint könyvtár-elérhetőségre vonatkozó felvetések kapcsán megismételte a megújítás kutatási

eredményességre és intézeti tudományos autonómiára vonatkozó elvét. A kutatásvezetők szerepének kiemelésével egyúttal nyomatékosította az intézményi hatékonyság és a kutatói kiválóság, műhelyformálás fontosságát. Az elnök elmondta, a rugalmasabb,



változásra nyitottabb szerkezetek jövője beláthatóbb és ígéretesebb, mint a változásra képteleneké. A megújítás stratégiája így válhat a kutatóintézeti hatékonyság perspektivikus biztosítékává.

A fórum végén **Németh Tamás** főtitkár és **Csépe Valéria** főtitkárhelyettes kiemelték és megerősítették a megújítás szükségszerűségének, megtervezettségének, körülményeinek és folyamatos egyeztetéseinek legfontosabb lépéseit.

Pálinkás József a fórumot lezárva aktív részvételre, együttműködésre és az intézetigazgatókkal, elnöki biztosokkal és a kutatótársakkal való kommunikációra bízta a megjelenteket.

A következő kutatói fórumra 2011. szeptember 23-án az MTA Természettudományi Kutatóközpontját alkotó intézetek kutatóival került sor.

Az intézethálózat megújításával létrejövő **MTA Természettudományi Kutatóközpont** feladata multidiszciplináris természettudományi kutatások az enzimológia, szintetikus kémia, molekuláris farmakológia, anyag- és környezetkémia, műszaki fizika és anyagtudomány, valamint a kognitív idegtudományok és a pszichológia területén. Az **MTA-Q2** épületébe költöző Kémiai Kutatóközpont, az MTA Enzimológiai Intézete, az MTA MFA és a kognitív idegtudományi kutatásokkal is foglalkozó Pszichológiai Intézet munkatársait szeptember 23-án kutatói fórumon tájékoztatta a megújítás folyamatáról az MTA elnöke.

Pálinkás József emlékeztette a zsúfolásig megtelt Díszteremben összegyűlt, jelenleg négy különböző helyen és intézetben dolgozó kutatókat az Akadémia kutatóhálózatának széttöredezetségére és

rugalmatlanságára. A 46 intézet vezetői egyre több megoldhatatlan feladattal szembesülnek: a csökkenő források túl nagy részét emésztik fel az adminisztratív költségek, túl kevés a fiatal, ígéretes kutató, elavultak a rendelkezésre álló műszerek, hiábavaló törekvés az alapellátáshoz tartozói feladatok meghatározása és a stratégia kialakítása. *„A jövőnek dolgozunk, azon kutatók és intézeteik érdekeit tartjuk szem előtt, akik és amelyek az ország versenyképességének zálogai. A legjobb szerkezet és szervezeti keret létrehozását tűztük magunk elé, amely a szakmai megújulás bázisát jelentheti, hogy értéket teremtsünk a jövő nemzedék számára a kutatásokba fektetett összeg hatékonyabb gazdasági-társadalmi megtérülésére. Nem véletlen, hogy mind a társadalom felelősen gondolkodó tagjai, mind a döntéshozók részéről óriási várakozás és érdeklődés kíséri az Akadémián zajló megújítási folyamatot.”* – mutatott rá az intézményhálózat átalakításának példamutató erejére az MTA elnöke, arra biztatva a megjelent kutatókat, hogy éljenek az új intézményi keretek teremtette lehetőségekkel.

„Egy akadémiai kutatóhálózat célja a kiválóságok kinevelése és megtartása. Azoknak a fiataloknak kötelezzük el most magunkat, akik a nehéz gazdasági helyzetben is kitartanak a kutatói pálya mellett.” – szólalt fel a megújítás mellett az MTA Enzimológiai Intézetének igazgatóhelyettese. **Vértessy Beáta** tarthatatlannak minősítette a jelenlegi helyzetet, amikor a kutatócsoport-vezetők adminisztratív feladatok tömegével kénytelenek törődni. A kutatóközpontoktól azt várjuk, hogy azokban a kutatásoké legyen a főszerep – tette hozzá a kutatók nevében az Enzimológiai Intézet igazgatóhelyettese.

Az egyetemek és akadémiai intézetek hosszú távú együttműködéséről érdeklődő kutatói kérdésre válaszolva az elnök kifejtette, hogy egy főhivatású kutatóhálózatban intézményesen is biztosítani szükséges, hogy a kiemelkedő tehetségek egyetemi környezetben nehezen vagy egyáltalán nem megteremthető feltételek mellett végezhessék nagy kockázatú felfedező kutatásaikat és vehessenek részt jelentős technológiai fejlesztésekben. Egyúttal rámutatott az akadémiai kutatóintézetek és egyetemek hosszú távú, kölcsönös előnyökön alapuló stratégiai együttműködésének szükségességére.

Bakó Imre, a KK munkatársa a világos kutatói követelmények felállítását sürgette. Az elnök válaszában a 2012-től új szervezeti keretek között megvalósítható *„finomhangolás”* egyik kiemelt feladatáknak

nevezte meg a magas szintű kutatói követelményrendszer bevezetését és érvényesítését, az egyes kutatási témák nemzetközi versenyképességének szigorú értékelését.

Több felszólaló aggodalmát fejezte ki az elapadt kutatási pályázati pénzek miatt. Az elnök egyetértett azzal, hogy kormányzati szinten még mindig várat magára az új, központi pályázati rendszer kidolgozása. Pálinkás József – minden kérdésre egyenként válaszolva – a források a legeredményesebb területeken történő összpontosítása mellett érvelt, a Lendület Fiatal Kutatói Programban jól bevált elosztási elvek alapján. Az elnök azt is várja a tervezett megújulástól, hogy a kutatóközpontok a nemzetközi pályázatokon erőteljesebb konzorciumvezetői szerepvállalásra lesznek képesek. A tervek szerint 2012-től kezdődik az évek óta szükséges kutatási infrastruktúra megújítása a korszerűsített rendszerben. Az elnök ezzel összefüggésben a nyilvános kutatói fórumon is szorgalmazta, hogy az Új Széchenyi Tervben jelenjen meg a kutatások infrastrukturális feltételeinek megújítását célzó programelem.

Forrás: <http://mta.hu>

Kutatói Fórum a Kutatóközpontban

2011. szeptember 8-án a Közalkalmazotti Tanács és a TUDOSZ vezetői kérésére **Pálinkás Gábor** főigazgató tájékoztatót tartott az alábbi témakörökben.

A Q2 beruházás jelenlegi helyzete

A 2011. nyarán elhangzott főigazgatói tájékoztatóhoz képest néhány technikai változás történt. A Közbeszerzési Tanács a kivitelezésre vonatkozó, a Q1 és Q2 épület műszaki kapcsolódása (közös trafóház) miatt értelemszerűnek tűnő meghívásos tendert megállította, ezért 2011. augusztus 30-tól kétlépcsős, nyilvános pályázat került kiírásra. Az építkezés a jelenlegi helyzet szerint október elején elkezdődhet. Az alap megerősítési és visszabontási munkák télen is folyhatnak, így mindössze 3-4 hónapos csúszásra lehet számítani, a tervek szerint az épület 2013. végére készül el, a költözés 2014-ben zajlik le. Az elkövetkezendőkben a IV. épület halljában mintalabor és ülőszoba felállítására kerül sor, ahol a Q2-be tervezett berendezés lesz megtekinthető.

A Kémiai Kutatóközpont átszervezése

Az Igazgatótanács javaslatára a Kémiai Kutatóközpont intézeteiből három intézet (Molekuláris Farmakológiai Intézet, Szintetikus Kémiai Intézet és Anyagtudományi Intézet - az elnevezések még nem véglegesek) kialakítása van folyamatban. A döntések után a főigazgató ismét kutatóközponti tájékoztatót tart. A belső átszervezés nem érint állásokat. A KT felkérte az Igazgatóságot, hogy amikor a készülő szervezeti és működési szabályzatok már rendelkezésre állnak, tegye lehetővé a betekintést és véleményezést a KT számára. Ezek az intézetek a 2012. január 1-től létező Természettudományi Kutatóközpont (elnevezés még nem végleges) részeként működnek majd. Ez utóbbi intézmény a Kémiai Kutatóközpont jogutódja lesz, amelybe az egyéb társult intézetek is integrálódnak.

Létszám és a működőképesség kérdése

Az MTA elnöke 5%-os létszámcsökkentést írt elő az intézetekre, amit a Kutatóközpont a nyugdíjazásokkal és a szerződéses dolgozók szerződéseinek felülvizsgálatával már gyakorlatilag végrehajtott. Ez évben mintegy 40 fővel csökkent a közalkalmazotti létszám. A Kutatóközpontból távozókat állását nem töltötték be. Az intézetházakban a gazdasági és pénzügyi osztályokon viszont az Akadémia az új kutatási központok létrehozásával jelentősebb (30-50%) létszámcsökkentés irányzott elő. A Kémiai Kutatóközpont gazdasági nehézséggel küzd, a tartalékok kerülnek felhasználásra, a forráshiány miatt létszámstop van érvényben.

A KT tagjai: Bakó Imre, Jemnitz Katalin, Korecz László, Lejtoviczné Egyed Orsolya, Mezeiné Seres Ágota, Tálás Emília, Telegdi Lászlóné.

A Lángész Projekt keretében intézetlátogatások a Kutatóközpontban

2011. év tavaszán az NKI Felületmódosítás és Nanoszerkezetek Osztálya „*Utazás a nanotechnológia világába*” című programot szervezett középiskolás diákok számára. A programon résztvevő fővárosi iskolák: Bláthy Ottó Titusz Informatikai Szakközépiskola és Gimnázium, Szinyei Merse Pál Gimnázium, Petőfi Sándor Gimnázium, Széchenyi István Gimnázium voltak.

A vendégek először a „*Nanomozaik*” című foglalkozáson vettek részt, mely az informális oktatás módszereinek segítségével hangolta rá a fiatalokat az intézetben folyó tudományos munkára. A „*Számoljunk csak*”, „*A méret a lényeg?*”, „*Enciklopédia egy tű hegyén?*” és „*Vedd kézbe a nanot!*” mozaikokból felépülő programok a vizsgált mérettartományról, a technológia történetéről és a nanoanyagok tulajdonságairól nyújtottak átfogó képet. **Paszternák András**, **Berényi Szilvia** és **Szabó Tamás** által tartott bevezető után az érdeklődők a következő laborelőadásokat hallgatták meg: „*Látható nanométe-*

rek” címmel **Drotár Eszter** (Elektronmikroszkóp Laboratórium) mutatta be a pásztázó és transzmissziós elektronmikroszkópokat és a hozzájuk kapcsolódó kutatási témákat, majd **Keresztes Zsófia** és **Kükemezey István** a pásztázó túspondás mikroszkóp működési elvét és alkalmazási területeit ismertette. A nanorészecskék előállításáról, felületek módosításáról **Tolnai Gyula** tartott bemutatót. A nanotechnológia legújabb vívmányainak az energiatárolás területén történő alkalmazásáról **Pilbáth Aranka** beszélt. **Szabó Tamás** és **Románszki Loránd** a védőbevonatok kialakításának területére kalauzolta a diákokat a virtuális utazás során. A nanobio-kutatások legújabb eredményeit **Berényi Szilvia** vázolta interaktív prezentációja során.



Tudománycseppek

A Lángész projekthez kapcsolódó óvodai Tudománycseppek programsorozat keretében – a Tudástársadalom Alapítvány szervezésében **Berényi Szilvia** (NKI Biológiai Nanokémia Osztály) és **Paszternák András** (NKI Felületmódosítás és Nanoszerkezetek Osztály) tartott a kémiával kapcsolatos foglalkozást „*Anyá, akkor Te is kémikus vagy?*” címmel a budapesti IX. kerületi Kerekerdő óvoda Hangya és Fecske csoportjának.



Paszternák András a Kutatók Éjszakáján 2011. szeptember 23-án megszervezte a *Kutatók a Neten - II. Kutatói Blog és Weboldal Találkozó* című rendezvényt. A blogbejegyzések és a weboldalak virtuális kapcsolati pontot biztosítanak a nanotechnológia különböző ágai-
val foglalkozó szakembereknek és az érdeklődőknek.

Tudományos Filmklub

2011. április 14 és június 1 között összesen nyolc alkalommal a Kutatóközpont tudományos ismeretterjesztő- és dokumentumfilm vetítéseknek adott helyszínt. A vetítések után a meghívott vendégek a film készítői és szakértői számoltak be a filmhez kapcsolódó személyes élményeikről, tapasztalataikról, és ezt követően a közönség is kérdezett a meghívottaktól.

A vetített filmek a következők voltak:

2011. április 14.

Alumínium, a magyar arany, 30 perces összeállítás az 1950-es, 60-as évek filmhíradó részleteiből a magyarországi timföldgyártásról.
Meghívott előadó: Szépvölgyi János (AKI igazgató)

2011. április 20.

Bence és a többi jómadár (rendező: Tóth Zsolt Marcell)

Ketten egy fészekben (rendező: Pálfi Szabolcs)

Meghívott vendégek: Tóth Zsolt Marcell, Pálfi Szabolcs természetfilmes és Palatitz Péter, a Magyar Madártani Egyesület munkatársa

2011. április 27.

Charles Simonyi, a meta utazó (rendező: Purger Tibor)

Meghívott vendégek: Purger Tibor rendező, Apáthy István az MTA KFKI AEKI úrkutatója, Vizi Pál, az MTA KFKI RMKI fejlesztőmérnöke, Képes Gábor, a Magyar Műszaki és Közlekedési Múzeum munkatársa

2011. május 4.

Egy világhi Szegeden (rendező: Sári Zsuzsa)

Meghívott vendégek: Sári Zsuzsa rendező, Venetianer Pál akadémikus, Marton János a Szegedi Tudományegyetem könyvtárának munkatársa

2011. május 11.

A fába szorult lélek (rendező: Tari János)

Meghívott vendégek: Tari János rendező, Szacsvay Éva néprajzkutató

2011. május 18.

Barlang (rendező: Szederkényi Júlia)

Meghívott vendégek: Szederkényi Júlia rendező, Havas Gábor szociológus

2011. május 25.

Abu Ramla, a Homok Atyja (rendező: Tóth-Szöllősi András)

Meghívott vendégek: Tóth-Szöllősi András rendező, Kubassek János, az érdi Földrajzi Múzeum igazgatója

2011. június 1.

Szerelmi álmok (rendező: Heinz Hille)

A Liszt Ferenc emlékévkapcsán vetített film utáni beszélgetés vendége: Bozó Péter, az MTA Zenetudományi Intézet munkatársa volt.

Chemical Singers fellépések

2011. május 27. *Kálmán Erika Doktori Konferencia*

Műsor: John Dowland: Wilt thou unkind thus reave me, Jakob Arcadelt: Il bianco e dolce cigno, Good news (spirituálé)

2011. június 1. *Tudományos Filmklub*

Műsor: Liszt: Pater noster

2011. június 29. *Nyári Évadzáró Koncert*

Műsor: Hubert Waelerant: Als ick ü vinde (lanttal), Jakob Arcadelt: Il bianco e dolce cigno (lanttal), T. L. da Victoria: O magnum mysterium, John Dowland: lant szóló (Bereczki Gábor), John Dowland: Say love if ever (lanttal), John Dowland: Thou unkind thus reave me (lanttal), Liszt Ferenc: Pater noster (orgonával), Bárdos Lajos: Patkóéknál, I pharadisi (spirituálé), George Gershwin: Summertime (feldolgozás),

Good news (spirituálé), Eric Clapton: Tears in heaven (zongorával), Bobby McFerrin: Don't worry (feldolgozás), Climbing up the mountain (gospel, zongorával)

2011. november 24. *Kutatóközponti Tudományos Napok*

Műsor: Thomas Tallis: Nine psalm (lanttal), VIII. Henrik: Pastime (lanttal), John Dowland: lantszóló (Bereczki Gábor), Dowland: Can she excuse (lanttal), Bach: Bourree (feldolgozás), Charles A. Tindley: The storm is passing over

2011. december 15. *Karácsonyi Koncert*

Műsor: Csillagfényes csöndes éjjel (hagyományos angol ének), Michael Praetorius: Dem neugebornen Kindelein (lanttal), Michael Praetorius: Es ist ein rose entsprungen, lanton előadva, Thomas Tallis: God grant with grace (lanttal), Thomas Tallis: O salutaris hostia, Farkas Ferenc: Áldott éj (lanttal), Ding dong (hagyományos angol ének, lanttal), Deck the hall (hagyományos angol ének, lanttal), Franz Gruber: Csendes éj (lanttal), Bárdos Lajos: Ó gyönyörű szép titokzatos éj, Fel nagy örömmre (feldolgozás), Mennyből az angyal (hagyományos magyar ének), Bob Chilcott: God so loved the world, Felix Mendelssohn-Take Six: Hark the herald, Charles A. Tindley: The storm is passing over (zongorával, Péntek László), Hilary Duff: Jingle bell rock (zongorával, Péntek László)

Tagok: szoprán: **Nagy Nóra**, alt: **Pappné Borsos Éva**, tenor: **Bozi János**, **Szabó Ervin**, **Szijjártó Gábor**, basszus: **Románszki Lóránd**, **Fegyverneki Dániel**, **May Zoltán**.

Az együttes hangszeres kísérői **Bereczki Gábor** (lant), **Tóth Gábor** és **Péntek László** (zongora) voltak.



TUDOMÁNYOS ÉRTEKEZÉSEK VITÁI

MTA doktori védés

2011. október 24.

Szentmihályi Klára: Fémionok a növényekben, hatásaik in vitro és in vivo

PhD-védés

2011. február 2.

Kereszturi Klára: Műszaki polimerek részecskesugaras felületmódosítása és felületanalitikája (Témavezető: Tóth András)

2011. február 28.

Keszler Anna Mária: Impulzus lézer indukált szénplazmák emissziós spektroszkópiai analízise (Témavezető: Nemes László)

2011. szeptember 14.

Varga Olívia: Fluoreszcens jelzőanyagok szupramolekuláris komplexek fotofizikai és fotokémiai tulajdonságai (Témavezetők: Kubinyi Miklós, Vidóczy Tamás)

2011. szeptember 27.

Sipos Szabolcs: C-glikozil-alfa-aminonitrilek szintézise alánstrecker reakcióban (Témavezető: Jablonkai István)

2011. szeptember 28.

Solt Hanna Erzsébet: Nitrogén-oxidok szelektív katalitikus redukciója metánnal indium tartalmú zeolitokon (Témavezető: Lónyi Ferenc)

2011. november 21.

Szabó Emese: Atmospheric kinetics and photochemistry of oxygenated volatile organic compounds (Témavezetők: Dóbbé Sándor, Christa Fittschen)

2011. november 29.

Kollár Márton: Hierarchikus pórusrendszerű MCM-22 zeolit katalizátorok előállítása, fizikai-kémiai es katalitikus tulajdonságai (Témavezető: Rosenbergné Mihályi Magdolna)

2011. december 14.

Tunyogi Tünde: Arany(I)tartalmú szupramolekulák előállítása és szerkezeti jellemzése (Témavezetők: Deák Andrea, Pálincás Gábor)

2011. december 16.

Szanka István: Funkciós csillag és hiperelágazásos polimerek előállítása kvázielő atomátadásos gyökös polimerizációval (Témavezető: Iván Béla)

2011. december 19.

Gyömöre Ádám: Kondenzált piridazinonok szintézise, vázátrendeződése és a közepes gyűrűtagszámú termékek konformációs analízise (Témavezető: Czugler Mátyás)

2011. december 19.

Bozi János: Halogén- és nitrogéntartalmú szintetikus polimerek hőbomlástermékeinek azonosítása és kémiai átalakítása (Témavezető: Blaszó Marianne)

Publikációs adatok

Kémiai Kutatóközpont publikációs pontjai 2008-2011. években

(lekérdezés: 2012.02.29)

Biomolekuláris Kémiai Intézet	Név	2008	2009	2010	2011
1.11 Biológiai Kémiai Laboratórium	Jablonkai I.	0,400	3,138	0,000	6,572
1.12 Oligoszacharid Laboratórium	Fügedi P.	4,510	2,738	16,470	2,374
1.13 Nukleotid Kémiai Laboratórium	Sági Gy.	-	0,844	-	0,880
1.21 Heterociklusos Kémiai Laboratórium	Riedl Zs	36,190	6,271	1,426	7,755
1.22 Organokatalízis Laboratórium	Soós T.	5,760	5,200	3,165	4,928
1.23 Természetes Szerves Vegyületek Laboratóriuma	Kovács P.	6,340	1,577	0,245	-
1.31 Biomembrán Laboratórium	Sarkadi B.	-	-	-	2,560
1.4 Molekuláris Farmakológiai Osztály	Visy J.	12,700	13,796	22,605	17,076
1.5 Neurokémiai Osztály	Kardos J.	9,160	16,305	9,173	8,189
1.61 Metabolizmus Laboratórium	Vereczkey L.	3,510	1,023	8,345	1,056
1.62 Biooxidációs Laboratórium	Jakus J.	1,310	4,059	0,614	-
1.63 Gyógyszer-Kölcsönhatások Laboratórium	Monostory K.	3,380	6,276	3,769	8,499
5.73 Központi Tudományos Laboratórium	Héberger K.	3,380	6,276	8,111	1,025
5.74. Fehérje Laboratórium		-	-	-	0,200
Összesen		86,640	67,503	73,923	61,114

Nanokémiai és Katalízis Intézet	Név	2008	2009	2010	2011
2.1 Biológiai Nanokémia Osztály	Bóta A.	-	-	11,377	11,871
2.2 Felületmódosítás és Nanoszerkezetek Osztály	Nyikos L.	18,670	27,568	4,773	6,842
2.25 Elektronmikroszkópiai Laboratórium	Németh P.	-	-	0,356	
2.31 Szerves Katalízis Laboratorium	Göbölös S.	9,090	10,758	7,877	4,173
2.32 Hidrogén Energia Laboratórium	Tompos A.	2,420	6,523	11,302	
2.4 Mikro és Mezoporózus Anyagok Osztály	Valyon J.	12,980	13,938	24,009	16,498
2.52 Nukleáris Kémiai Laboratórium	Kuzmann E.	3,970	10,238	8,671	0,203
2.53 Reakciókinetikai Laboratórium	Erdőhelyi A.	-	14,221	12,436	4,062
2.54 Pordiffrakciós Laboratórium	Sajó I.	5,760	3,206	2,660	1,618
Összesen		52,890	86,452	83,461	45,267

Szerkezeti Kémiai Intézet	Név	2008	2009	2010	2011
3.11 ESR Spektroszkópiai Laboratórium	Korecz L.	4,770	4,161	4,356	20,521
3.12 Lézerspektroszkópiai Laboratórium	Biczók L.	9,990	17,233	10,948	
3.2 NMR Spektroszkópiai Osztály	Tárkányi G.	8,270	7,197	6,489	6,641
3.3 Kristálydiffrakciós Osztály	Czugler M.	6,830	4,963	8,084	7,948
3.4 Tömegspektrometriai Osztály	Vékey K.	4,620	7,144	7,931	13,601
3.61 Folyadékszerkezet Laboratórium	Megyes T.	12,260	5,601	3,581	7,746
3.62 Szupramolekuláris Laboratórium	Deák A.	2,600	4,000	4,660	
5.76 Elméleti Kémiai Osztály	Pápai I.	21,093	22,996	21,732	15,837
9.21 Tudományos Titkárság	Vinkler P.	1,670	2,528	10,534	4,674
Összesen		72,103	75,823	78,315	76,968

Anyag- és Környezatkémiai Intézet	Név	2008	2009	2010	2011
4.1 Plazmakémiai Osztály	Mohai I.	15,460	12,217	17,922	20,571
4.2 Polimer Kémiai és Anyagtudományi Osztály	Iván B.	6,440	6,443	3,241	12,100
4.3 Alkalmazott Polimer Fizika-Kémiai Osztály	Pukánszky B.	12,850	10,510	21,129	14,750
4.4 Környezatkémiai Osztály	Pajkossy T.	16,140	25,619	13,298	27,840
4.5 Környezetvédelmi Laboratórium	Horváth T.	12,190	2,991	10,630	0,026
4.92 Igazgatás		-	-	2,600	2,440
Összesen		63,080	57,780	68,820	77,727

MTA KK Összesen		274,713	287,558	304,519	261,076
------------------------	--	----------------	----------------	----------------	----------------

2011-ben 10-nél több független idézetet kapott cikkek

(lekérdezés: 2012.02.29)

- Vakulya B, Varga SZ, Csámpai A, Soós T: Highly enantioselective conjugate addition of nitromethane to chalcones using bifunctional cinchona organocatalysts, *ORG LETT* 7 (2005) 1967-1969 75
- Keresztury G, Holly S, Besenyei G, Varga J, Wang A, Durig JR: Vibrational spectra of monothiocarbamates-II. IR and Raman spectra, vibrational assignment, conformational analysis and ab initio calculations of S-methyl-N,N-dimethylthiocarbamate, *SPECTROCHIM ACTA A* 49 (1993) 2007-2026 65
- Mayer I: Charge, Bond Order and Valence in the Ab Initio SCF Theory, *CHEMICAL PHYSICS LETTERS* 97 (1983) 270-274. 51
- Berrueta LA, Alonso-Salces RM, Héberger K: Supervised pattern recognition in food analysis, *J CHROMATOGR A* 1158 (2007) 196-214 46
- Antal MJJR, Várhegyi G: Cellulose pyrolysis kinetics: the current state of knowledge, *IND ENG CHEM RES* 34 (1995) 703-717 34
- Zsila F, Bikádi Z, Simonyi M: Probing the binding of the flavonoid, quercetin to human serum albumin by circular dichroism, electronic absorption spectroscopy and molecular modelling methods, *BIOCHEM PHARMACOL* 65 (2003) 447-456 33

-
- Héberger K: Quantitative structure-(chromatographic) retention relationships, *J CHROMATOGR A* 1158 (2007) 273-305 27
- Gronli MG, Várhegyi G, Di Blassi C: Thermogravimetric analysis and devolatilization kinetics of wood, *IND ENG CHEM RES* 41 (2002) 4201-4208 26
- Miskolczi Z, Sebők-Nagy K, Biczók L, Gokturk S: Aggregation and micelle formation of ionic liquids in aqueous solution, *CHEM PHYS LETT* 400 (2004) 296-300 25
- Hamza A, Schubert G, Soós T, Pápai I: Theoretical studies on the bifunctionality of chiral thiourea-based organocatalysts: Competing routes to C-C bond formation, *J AM CHEM SOC* 128 (2006) 13151-13160 24
- Várhegyi G, Antal MJJR, Jakab E, Szabó P: Kinetic modeling of biomass pyrolysis, *J ANAL APPL PYROL* 42 (1997) 73-87 23
- Sarkadi B, Homolya L, Szakács G, Váradi A: Human multidrug resistance ABCB and ABCG transporters: Participation in a chemoimmunity defense system, *PHYSIOL REV* 86 (2006) 1179-1236 22
- Rokob TA, Hamza A, Stirling A, Pápai I: On the mechanism of B(C₆F₅)₃-catalyzed direct hydrogenation of imines: Inherent and thermally induced frustration, *J AM CHEM SOC* 131 (2009) 2029-2036 21
- Szakács G, Váradi A, Özvegy-Laczka C, Sarkadi B: The role of abc transporters in drug absorption, distribution, metabolism, excretion and toxicity (adme-tox), *DRUG DISCOV TODAY* 13 (2008) 379-393 20

- Pajkossy T: Impedance of rough capacitive electrodes, J ELECTROANAL CHEM 364 (1994) 111-125 20
- Rokob TA, Hamza A, Stirling A, Soós T, Pápai I: Turning frustration into bond activation: A theoretical mechanistic study on heterolytic hydrogen splitting by frustrated Lewis pairs, ANGEW CHEM INT EDIT 47 (2008) 2435-2438 19
- Krishnamurthy P, Ross DD, Nakanishi T, Bailey Dell K, Zhou S, Mercer KE, Sarkadi B, Sorrentino BP, Schuetz JD: The stem cell marker Bcrp/ ABCG2 enhances hypoxic cell survival through interactions with heme, J BIOL CHEM 279 (2004) 24218-24225 19
- Pukánszky B: Interfaces and interphases in multicomponent materials: Past, present, future, EUR POLYM J 41 (2005) 645-662 18
- Szörényi T, Laude LD, Bertóti I, Kántor Z, Geretovszky Z: Excimer-laser processing of indium-tin-oxide films - an optical investigation, J APPL PHYS 78 (1995) 6211-6219 18
- Kennedy JP, Iván B: Designed polymers by carbocationic macromolecular engineering: Theory and practice, Hanser Publishers, Munich (1992) 18
- Erős G, Mehdi H, Pápai I, Rokob TA, Király P, Tárkányi G, Soós T: Expanding the scope of metal-free catalytic hydrogenation through frustrated lewis pair design, ANGEW CHEM INT EDIT 49 (2010) 6559-6563 17

-
- Vanyúr R, Biczók L, Miskolczy ZS: Micelle formation of 1-alkyl-3-methylimidazolium bromide ionic liquids in aqueous solution, COLLOID SURFACE A 299 (2007) 256-261 17
- Biczók L, Bérces T, Linschitz H: Quenching processes in hydrogen-bonded pairs: Interactions of excited fluorenone with alcohols and phenols, J AM CHEM SOC 119 (1997) 11071-11077 17
- Adam J, Blazsó M, Mészáros E, Stöcker M, Nilsen MH, Bouzga A, Hustad JE, Gronli M, Oye G: Pyrolysis of biomass in the presence of Al-MCM-41 type catalysts, FUEL 84 (2005) 1494-1502 16
- Mok WSL, Antal MJJR, Várhegyi G: Productive and parasitic pathways in dilute acid hydrolysis of cellulose, IND ENG CHEM RES 31 (1992) 94-100 16
- Rokob TA, Hamza A, Pápai I: Rationalizing the reactivity of frustrated Lewis pairs: Thermodynamics of H-2 activation and the role of acid-base properties, J AM CHEM SOC 131 (2009) 10701-10710 15
- Megyesi M, Biczók L, Jablonkai I: Highly sensitive fluorescence response to inclusion complex formation of berberine alkaloid with cucurbit[7]uril, J PHYS CHEM C 112 (2008) 3410-3416 15
- Sipos P, Németh T, Kovács Kis V, Mohai I: Sorption of copper, zinc and lead on soil mineral phases, CHEMOSPHERE 73 (2008) 461-469 15
- Tőke O: Antimicrobial peptides: New candidates in the fight against bacterial infections, BIOPOLYMERS 80 (2005) 717-735 15

- Özvegy-Laczka C, Hegedűs T, Várady G, Ujhelly O, Schuetz JD, Váradi A, Kéri G, Órfi L, Németh K, Sarkadi B: High-affinity interaction of tyrosine kinase inhibitors with the ABCG2 multidrug transporter, *MOL PHARMACOL* 65 (2004) 1485-1495 15
- Hegedűs T, Órfi L, Seprődi A, Váradi A, Sarkadi B, Kéri G: Interaction of tyrosine kinase inhibitors with the human multidrug transporter proteins, MDR1 and MRP1 *BBA-MOL BASIS DIS* 1587 (2002) 318-325 15
- Carraro S, Rezzi S, Reniero F, Héberger K, Giardano G, Zanconato S, Guillou C, Baraldi E: Metabolomics applied to exhaled breath condensate in childhood asthma, *AM J RESP CRIT CARE* 175 (2007) 986-990 14
- Nyikos L, Pajkossy T: Fractal dimension and fractional power frequency-dependent impedance of blocking electrodes, *ELECTROCHIM ACTA* 30 (1985) 1533-1540 14
- Miskolczi ZS, Biczók L, Megyesi M, Jablonkai I: Inclusion complex formation of ionic liquids and other cationic organic compounds with cucurbit[7]uril studied by 4',6-diamidino-2-phenylindole fluorescent probe, *J PHYS CHEM B* 113(2009) 1645-1651 13
- Pető G, Molnár GL, Pászti Z, Geszti O, Beck A, Guzzi L: Electronic structure of gold nanoparticles deposited on SiO_x/Si(100), *MAT SCI ENG C-BIO S* 19 (2002) 95-99 13
- Lin YC, Wu XY, Feng SA, Jiang GC, Luo JH, Zhou SN, Vrijmoed LLP, Jones EBG, Krohn K, Steingrover K, Zsila F: Five unique compounds: xyloketal from mangrove fungus *Xylaria* sp. from the South China Sea coast, *J ORG CHEM* 66 (2001) 6252-6256 13

-
- Rác B, Molnár Á, Forgó P, Mohai M, Bertóti I: A comparative study of solid sulfonic acid catalysts based on various ordered mesoporous silica materials, *J MOL CATAL A-CHEM* 244 (2006) 46-57 12
- Pajkossy T: Impedance spectroscopy at interfaces of metals and aqueous solutions - Surface roughness, CPE and related issues, *SOLID STATE IONICS* 176 (2005) 1997-2003 12
- Vas GY, Vékey K: Solid-phase microextraction: a powerful sample preparation tool prior to mass spectrometric analysis, *J MASS SPECTROM* 39 (2004) 233-254 12
- Antal MJ, Várhegyi G, Jakab E: Cellulose pyrolysis kinetics: Revisited, *IND ENG CHEM RES* 37 (1998) 1267-1275 12
- Várhegyi G, Antal MJ, Székely T, Szabó P: Kinetics of the thermal-decomposition of cellulose, hemicellulose, and sugar-cane bagasse, *ENERG FUEL* 3 (1989) 329-335 12
- Longstaff C, Thelwell C, Williams S, Silva MMCG, Szabó L, Kolev K: The interplay between tissue plasminogen activator domains and fibrin structures in the regulation of fibrinolysis: kinetic and microscopic studies, *BLOOD* 117 (2011) 661-668 11
- Móczó J, Pukánszky B: Polymer micro and nanocomposites: Structure, interactions, properties, *J IND ENG CHEM* 14 (2008) 535-563 11

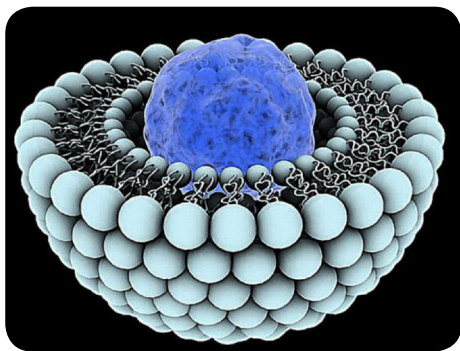
- Rezzi S, Axelson DE, Héberger K, Reniero F, Mariani C, Guillou C: Classification of olive oils using high throughput flow H-1 NMR fingerprinting with principal component analysis, linear discriminant analysis and probabilistic neural networks, *ANAL CHIM ACTA* 552 (2005) 13-24 11
- Cser A, Nagy K, Biczók L: Fluorescence lifetime of Nile Red as a probe for the hydrogen bonding strength with its microenvironment, *CHEM PHYS LETT* 360 (2002) 473-478 11
- Szentmihályi K, Vinkler P, Lakatos B, Illés V, Then M: Rose hip (*Rosa canina* L.) oil obtained from waste hip seeds by different extraction methods, *BIORESOURCE TECHNOL* 82 (2002) 195-201 11
- Tolnai G, Csempezs F, Kabai Faix M, Kálmán E, Keresztes Z, Kovács AL, Ramsden JJ, Hórvölgyi Z: Preparation and characterization of surface-modified silica-nanoparticles, *LANGMUIR* 17 (2001) 2683-2687 11
- Kerner Z, Pajkossy T: On the origin of capacitance dispersion of rough electrodes, *ELECTROCHIM ACTA* 46 (2000) 207-211 11
- Bakos E, Evers R, Szakács G, Tusnády GE, Welker E, Szabó K, de Haas M, van Deemter L, Borst P, Váradi A, Sarkadi B: Functional multidrug resistance protein (MRP1) lacking the N-terminal transmembrane domain, *J BIOL CHEM* 273 (1998) 32167-32175 11
- Bertóti I, Mohai M, Sullivan JL, Saied SO: Surface characterisation of plasma-nitrided titanium: An XPS study, *APPL SURF SCI* 84 (1995) 357-371 11

-
- Ángyán JG, Loos M, Mayer I: Covalent bond orders and atomic valence indices in the topological theory of atoms in molecules, *J PHYS CHEM US* 98 (1994) 5244-5248 11
- Kardos J, Kovács I, Hajós F, Kálmán M, Simonyi M: Nerve endings from rat brain tissue release copper upon depolarization. A possible role in regulating neuronal excitability, *NEUROSCI LETT* 103 (1989) 139-144 11
- Stirling A, Hamza A, Rokob TA, Pápai I: Concerted attack of frustrated Lewis acid-base pairs on olefinic double bonds: a theoretical study, *CHEM COMMUN* 27 (2008) 3148-3150 10
- Tárkányi G, Király P, Varga SZ, Vakulya B, Soós T: Edge-to-face CH/ π aromatic interaction and molecular self-recognition in *epi-cinchona*-based bifunctional thiourea organocatalysis, *CHEM-EUR J* 14 (2008) 6078-6086 10
- Dányádi L, Janecska T, Szabó Z, Nagy G, Móczó J, Pukánszky B: Wood flour filled PP composites: Compatibilization and adhesion, *COMPOS SCI TECHNOL* 67 (2007) 2838-2846 10
- Mayer I: Bond order and valence indices: A personal account, *J COMPUT CHEM* 28 (2007) 204-221 10
- Erdőhelyi A, Raskó J, Kecskés T, Tóth M, Domok M, Baan K: Hydrogen formation in ethanol reforming on supported noble metal catalysts, *CATAL TODAY* 116 (2006) 367-376 10
- Miltner HE, van Assche G, Pozsgay A, Pukánszky B, van Mele B.: Restricted Chain Segment Mobility in Poly(amide) 6/clay Nanocomposites Evidenced by Quasi-isothermal Crystallization *POLYMER* 47 (2006) 826-835 10

- Morimoto A, Yatsunami T, Shimada T, Biczók L, Tryk DA, Inoue H: Radiationless deactivation of an intramolecular charge transfer excited state through hydrogen bonding: Effect of molecular structure and hard-soft anionic character in the excited state, J PHYS CHEM A 105 (2001) 10488-10496 10
- Bakos E, Evers R, Sinkó E, Váradi A, Borst P, Sarkadi B: Interactions of the human multidrug resistance proteins MRP1 and MRP2 with organic anions MOL PHARMACOL 57 (2000) 760-768 10

SAJTÓSZEMLE

Nanorészecskék hordozzák a hatóanyagot



Rákkutatás Egyenesen a daganatban is „landolhat” a gyógyszer

Rákellenes szerekekkel kezelt betegek a megmondhatóit, mennyit szenvednek ezeknek a készítményeknek a mellékhatásaitól. Úgy érzik, gyógyulásuk is lassúbb a vártnál, hiszen, mint a szakemberek állítják, 10 molekulából csupán nyolc kerül oda, ahol jótekonny hatásukat ki kellene fejteniük.

Liposzóma, belsejében a gyógyszerhatóanyaggal

Régi törekvés, hogy célzott kezeléssel, a megfelelő helyre juttatott citosztatikumokkal csökkenteni lehessen a szervezetbe bevitt gyógyszer mennyiségét, s egyúttal a nem kívánatos mellékhatásokat is. Az MTA Kémiai Kutatóközpont-

jának Nanokémiai és Katalízis Intézete, valamint többek között a Semmelweis Egyetem és a KPS Kft. által alkotott, és dr. Peták István által vezetett konzorcium tagjai ennek jegyében egy tüdőrák kezelésére alkalmas liposzómás gyógyszerhordozót fejlesztenek.

A kutatók egy bizonyos daganatos sejttípuson tesztelték a leendő hatóanyagot és a gyógyszerhordozót. A gyógyszert „szállító” nanorészecskék a Vichem Kft. által tervezett és szintetizált új, célzott hatóanyagot fogják tartalmazni, amelytől az előzetes vizsgálatok alapján a kutatók sokat várnak. A Kémiai Kutatóközpont munkatársaira hárult az a feladat, hogy ezt a ráksejtek pusztulását okozó, kinázgátló gyógyszert „csomagolják be” úgy, hogy az csak a daganatban, s ne a szervezet egyéb, egészséges részeiben fejtse ki hatását.

Maga a liposzóma mint hordozó már ismert: a sejtmembránok alapvető szerkezeti egységét adó foszfolipid kettős réteg által határolt, mesterségesen előállított gömbszerű alakzat, melynek belső térfogata alkalmas különböző hatóanyagok bezárására. A gyógyszerhordozó liposzómákat Varga Zoltán

mérnök-fizikus tervezte és állította elő, a biológiai vizsgálatokat Lőrincz András biológus végezte a Semmelweis Egyetemen. A kísérletek során speciális egerek bőre alatt humán tüdő adenokarcinóma eredetű daganatot hoztak létre. Az egerek intravénásan kapták a nanohordozót, mely a kináz gátló (mint tumorelleses hatóanyag) mellett a nyomkövetéshez szükséges fluoreszcens jelzőanyagot is tartalmazott. „In vivo”, azaz az élő szervezetben történő képalkotási technikával kimutatták, hogy a hordozó a daganatban „landolt”, így a hatóanyag ott dúsult fel, ahol annak hatását ki kell fejtenie.

Hogyan dúsítja a hatóanyagot a nanorészecske? Az 50–100

nanométeres, azaz a milliméter tízezredének mérettartományába eső részecskék az ép szövetben nem képesek kilépni a vérkeringésből, de a tumorban lévő érhálózat átjárhatósága miatt be tudnak jutni a daganatba. A vizsgálatok során sikerült kimutatniuk a kutatóknak, hogy a gyógyszerhordozó liposzóma valóban átjut a vizsgált daganatok ereinek falán, ezáltal a tumorban koncentrálja a hatóanyagot. A hasonló célú nanorészecskéknek számos kritériumnak kell megfelelniük, például önmagukban nem lehetnek mérgezőek. Az eddigi vizsgálatok során a liposzómás gyógyszerhordozók nem bizonyultak toxikusnak.

Szerző: Chikán Ágnes
Megjelent: Népszabadság
2011. április 30.

Másodpercek alatt feltöltődő szuperkondenzátor



Sanghaji szuperkondenzátoros trolis áramot „tankol” a megállóban

Ha elhallgat elemmel működő kistrádióknak, mi sem egyszerűbb: a régi elemeket újakkal cseréljük ki. Az már nagyobb gondot okoz, ha mondjuk, télvíz idején kimerül gépkocsink akkumulátora, netán útközben hagy cserben bennünket az autó. Ha van is kéznél akkutöltő és a működéshez szükséges konnektor, akkor is órákba telik, míg járgányunk ismét üzemképes lesz.

Lehetséges, hogy az efféle gondokról hamarosan múlt időben beszélhetünk? Az MTA Kémiai Kutatóközpontjában a Nanokémiai és Katalízis In-

tézet Felületmódosítás és Nanoszerkezetek Osztályának vezetője, **Nyikos Lajos** munkatársaival együtt az úgynevezett szuperkondenzátorok fejlesztésével foglalkozik. Olyan felületeket készítenek, amelyeken három dimenzióban rendezett szén nanocsövek helyezkednek el.

Ez a két lemez közé telepített nanocsőerdő tulajdonképpen sok mindenre alkalmas: lehet akkumulátorként vagy közönséges elemként használni. Kisebb ugyan az energiasűrűsége, mint a modern lítium-polimer elemeknek, de a tömegéhez viszonyított teljesítményben túlszajtuk. A nanoszerkezetű csövek nagyon gyorsan képesek leadni az energiát. Amit egy hagyományos akkumulátor órák alatt véghez el, arra ez egy perc vagy akár néhány másodperc alatt képes.

Ezt a technikát tengeralattjárókban, tankokban az USA-ban, a Távol-Keleten már alkalmazzák, Európában azonban eddig nem terjedt el. Az EU azért is támogatja az ezzel kapcsolatos kuta-

tásokat, hogy segítségükkel a haditechnikán kívül a civil világ számára is hasznos eszközöket fejlesszenek. Az Aire Plusz például a repülőgépgyártást akarja forradalmasítani vele, de a hibrid autókhoz kapcsolva is jó szolgálatot tehetnek. Ma már nem utópia az olyan szuperkondenzátorral működő troli sem, amelynek nincs szüksége áramszedő felsővezetékre: a megállóban, amíg le- s fölszállnak az utasok, 20-30 másodperc alatt feltöltődik a kondenzátor, s azazal az energiával eljut a jármű a következő megállóig, ahol ismét „tankol”.

Amellett, hogy ez igen költségkímélő megoldás, még a környezetet is óvja. Hasznosítható a fékezéskor keletkező energia egy része is: az ilyenkor keletkező áramot tárolhatja a szuperkondenzátor, s szükség esetén ezt a tartalék energiát fröccsként adagolhatja a járműnek. Mindennapjainkat is kényelmesebbé teheti ez a technika: olyan egyszerű használati eszközökben is alkalmazható, mint egy akkus csavarhúzó, mert a kisülések révén gyors töltés érhető el.

Hogy mi a szerepe ezekben a kutatásokban a budapesti intézetnek? A drezdai Fraunhofer

Institute-tal, valamint a fizikai-kémiai tanszékkal közösen végzett kísérletek során sikerült a konkurensénél nagyobb teljesítménysűrűséget elérniük, eszközeik még rövidebb idő alatt még több energiát tudnak leadni. A Drezdában készített nanocsöveket és a lapot Budapesten szerelik össze, s ott igyekeznek tökéletesíteni a szuperkondenzátorokat. Céljuk, hogy még hosszabb élettartamú, stabil, kis súlyú, több energia tárolására alkalmas eszközt fejlesszenek ki.

E rendszerek előnye, hogy – szemben a hagyományos akkumulációval – sok ciklust kibírnak: míg azok 1000, a nanoerdős szuperkondenzátorok több tízezer töltés-kisülést produkálnak „élettük” során. Hátrányuk viszont, hogy hosszú idejű energiatárolásra nem alkalmasak: egy hónap eltelte után nem őrzik meg az energiát. Folyamatos használatot igényelnek, különben „kimerülnek”. Ezért csak szuperkondenzátoros autót biztos nem fognak gyártani – véli a kutató –, legfeljebb olyat, amilyen Belgiumban már működik: a fékezési energia egy részét visszanyerve bizonyos fokig helyettesíthetik a benzint.

A Kémiai Kutatóközpont vegyészeti partnereikkel olyan nagy teljesítményű szuperkondenzátorokat fejlesztenek, amelyekkel könnyű, hatékony, pénztárcánkat és a környezetet is kímélő eszközök, például zseblámpák, különböző kéziszerszámok, autóakkumulátorok állíthatók elő. Sajnos nem magyar, hanem egy német cég fontolgatja a nanocsőerdőből álló szuperkondenzátorok sorozatgyártását.

Szerző: Chikán Ágnes

Megjelent: Népszabadság

2011. szeptember 8.

Tankoljunk borral!

A nagy autógyárak érdeklődését is felkeltheti az MTA Kémiai Kutatóközpontjának fejlesztése, mely lehetővé tenné, hogy bioetanolt, azaz tízszázaléknyi alkoholt tartalmazó bort tankoljunk autónkba. Hogyan járulunk hozzá a hidrogéngazdaság felépüléséhez?

Az emberiség legégetőbb kérdéseinek egyike, hogy a fosszilis tüzelőanyagok fogyasztával honnan



nyerjen a modern életvitelhez nélkülözhetetlen energiát. Olyat, amelynek előállítása nem veszélyezteti a környezetet, gazdaságos és megfizethető. Az atomreaktorok a tragikus balesetek ellenére a jövőben sem lesznek nélkülözhetők, és a következő évtizedekben egyesek szerint 100-150 évig még a terméshet is tovább kínálja maradék szenes olajkészletét, de a kutatók máris gőzerővel fáradoznak a megújuló energiaforrások kiaknázásán is. Az MTA Kémiai Kutatóközpontjának Hidrogénenergia Osztályát vezető **Tompos András** és munkatársai azt vizsgálják, milyen szerepet játszhatnak a katalizátorok, vagyis a

vegyi folyamatokat felgyorsító anyagok ezekben az erőfeszítésekben.

A világ kutatói első lépésként olyan eljárásokat igyekeznek kifejleszteni, amelyek a nehezen földolgozható vagy kinyerhető nyersanyagokat hasznosítható-

vá teszik. Az első feladat a nagyobb kéntartalmú nyersanyagok kénmentes-

sítése. Szibériában, a tundra fagyott talajában vagy az óceánok mélyén megfelelő technológiával kiaknázhatók lehetnének a metánhidrátmezők, de a metánból előállított hidrogént ma még nem használják közvetlenül energetikai célokra (például üzemanyagcellában vagy robbanómotorokban), hanem inkább csak kőolaj-finomítókban és az ammóniagyártásban alkalmazzák. A metánhidrátmezők ráadásul instabillá válhatnak a globális felmelegedés hatására, és metánt bocsáthatnak a légkörbe, ami fokozná a fölmelegedést. Ez veszélyesebb lenne az üvegházhatás szempontjából, mint a szén-dioxid.

Épül a hidrogénfalu

A kutatóközpont vegyészeti inkább a biomassza-eredetű alkoholok (például a bioetanol) hidrogénné alakítására összpontosítanak. Miközben a folyóvizekben és a szélben rejlő erő, a geotermikus energia, a Napból származó s az óceán ár-ápanya által keltett energia mind elektromos energiává alakítható, a biomasszából folyékony üzemanyagot is lehet gyártani. A bioetanolból pedig reformálással hidrogént, illetve végső soron közvetlenül áramot lehet fejleszteni. A biomasszaalapú energia-hordozókra természetesen nem lehet építeni egy egész gazdaságot, hiszen a rendelkezésre álló, az egyébként kidobásra ítélt házkörüli növényi és mezőgazdasági hulladék nem biztosíthatja a teljes energiaellátást, de hasznosan kiegészítheti a háztartások, az erőművek, valamint a közlekedés energiaigényét.

A biomassza fölhasználása fölmerült a hazai vidékfejlesztési programokban is: a Miskolc környéki Bükk-Mak Leader Kft. az Európai Uniótól elnyert pénzek segítségével biomassza földolgozásán alapuló energiahálózat létrehozásán dolgozik. Terveik szerint a parlagon lévő földterü-

let rendben tartására, kaszálására, a növények összegyűjtésére, szállítására családokat költöztetnek a környékre. Az energiaigényt természetesen más energiaforrással is igyekeznek biztosítani: szélturbinákat, tüzelőanyag-cellákat és napelemeket telepítenek. A „hidrogénfalu” lakóinak a megújuló energia termelése biztosítaná a megélhetést.

A hidrogén energetikai alkalmazása tüzelőanyag-cellákban történhet a legjobb hatásfokkal. Tisztán tüzelőanyagcellás autók, buszok elvéve futnak már a világ országútjain, sőt kilenc gépkocsigyártó cég 2015-től növelni akarja ezek előállítását. Tompos Andrást születésnapján kollégái működő tüzelőanyagcellás játékaúttal köszöntötték.

Játékaúttal hidrogénnel

A kis kocsinak – ellentétben a naggyal, mely a környezetből jut levegőhöz – a hidrogéntartály mellett oxigéntartály is van, amelyeket a cella vízelektrolízis üzemmódjában föl lehet tölteni a megfelelő gázzal. A cella energiatermelő üzemmódjában az oxigén és a hidrogén rákerül a katódra és az anódra, az így keletkezett áram hajtja az autó kis villanymotorját. Úgy tűnik azonban, hogy ennél nagyobb

népszerűségeire tehetnek szert a fedélzeti reformert (azaz üzemanyag-átalakítót), tüzelőanyag-cellát és robbanómotort is alkalmazó hibridmeghajtású autók. Ezekben az üzemanyag – etanol vagy metanol – részint a robbanómotorba, részint a fedélzeti reformerbe kerül. Az autó beindítását a robbanómotor biztosítja. Az első percek után már a fedélzeti reformer is kellő mennyiségű hidrogént állít elő, amely a tüzelőanyag-cellára jut, s a termelt elektromos energia meghajtja a villanymotort. Tompos Andrásék a bioetanol fedélzeti reformálására is alkalmas katalizátorok kifejlesztésén dolgoznak. A technológia lehetővé tenné, hogy közvetlenül bioetanol, azaz tulajdonképpen 10 százaléknyi alkoholt tartalmazó bort tankoljunk az autóba.

A bioetanol a biomasszából a borgyártás folyamatával, erjesztés során keletkezik. A bioetanol reformálásához olyan katalizátorra van szükség, amely olcsó anyagból készül, hosszú távú működést biztosít, nagy hidrogénhozama van, és csekély mennyiségű szén-monoxidot, illetve metánt eredményez, eleget téve a környezetvédelmi kívánalmaknak. Az eddigi kísérletek-

ben bevált platina alkalmazása nem járható út, hiszen rendkívül drága és kevés van belőle. A kutatóintézet vegyészei új utat kerestek: nemesfémmentes, többkomponensű katalizátorokat fejlesztettek ki. Nikkelalapú, kobalt, cérium és molibdén kombinációjából készített katalizátort állítottak elő, amely megfelel a gazdaságos termelés követelményeinek.

Kinyomtatott katalizátorok

A Kontakt-Elektro Kft. megbízásából a kutatóközpont más módon is próbálkozik a kedvezőbb áramfejlesztés kidolgozásával: a membránelektrod-együttes (MEA) előállítását igyekszik tökéletesíteni. Az öt rétegből álló MEA a tüzelőanyag-cella lelke. A technológia érdekessége a kutatók ötletességén alapszik: ipari tintasugaras nyomtatót alakítottak át arra a célra, hogy egyenletes elektródréteget hozzanak létre a protonvezető membrán két oldalán: a festéktartályba töltött oldattal mintegy „kinyomtatják” az elektrokatalizátorokat, az anódot és a katódot. Ennek az elmés eljárásnak az előnye, hogy egyszerűen reprodukálható és könnyen optimalizálható technológia.

A kutató szerint attól még nem kell tartanunk, hogy hamarosan fölhasználjuk az összes fosszilis tüzelőanyagot, s megáll körülötünk az élet. Napjainkban nem az energiakészletek kimerülése, hanem az időközben föltalált olcsóbb technológia befolyásolja majd, melyik energiaforrást válasszuk. A Kémiai Kutatóközpont vegyészei a hidrogénben bíznak, s a jövő szakembereire vár az a feladat, hogy a hidrogén tárolásának módját kidolgozzák, s a hidrogénvezető hálózatot, az egész hidrogéngazdaság infrastruktúráját megépítsék.

Szerző: Chikán Ágnes
Megjelent: Heti Válasz
2011. július 7.

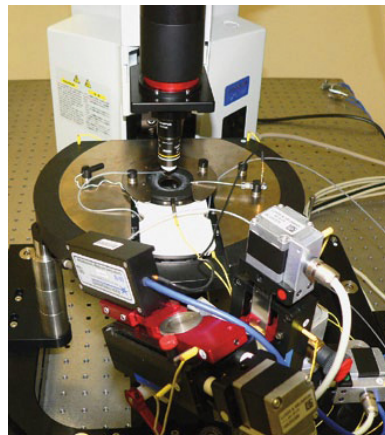
Kedvező jeleket „bocsát ki” a Nanoórszem

Félidejénél tart az a kutatási program, amelyet egy hattagú konzorciumból álló csoport, a hivatalosan NANOSEN9-nek elnevezett projekt keretében végez. A sejtek ionháztartásának szabályozását, illetve a szabályozásban szerepet játszó fehérjék hibás működését vizsgáló és detektáló Nanoórszem eszköz kifejlesztése a pályázati források csúszása ellenére időarányosan a tervezettnél jobb eredményt mutat, s az eddigiek alapján várható, hogy hamarosan kész a sorozatgyártásra. A Nanoórszem ötletgazdáját, dr. Héja Lászlót, az MTA Kémiai Kutatóközpont főmunkatársát, a projekt helyettes szakmai vezetőjét arról is kérdeztük, hogy milyen területeken hasznosítható, használható az egyes fehérjék aktív és passzív működését vizsgáló eszköz.

Miért van szükség a sejtek ionkoncentrációjának mérésére?

– Azért, mert a sejtek ionháztartásának pontos szabályozása nélkülözhetetlen az élet fennmaradásához, ennek megbomlása számtalan betegség oka vagy kísérőjelensége lehet. Így például a magas vérnyomás, a központi idegrendszer sejtje-

inek gyulladással járó sclerózis multiplex, az osteoarthritis (krónikus ízületi gyulladás – a szerk.) vagy más ízületi betegségek. Ezen életleni folyamatok elengedhetetlen feltétele, hogy a nátrium-, a kálium-, a klorid- és a kalciumionok koncentrációja a sejten belül és azon kívül pontosan szabályozott legyen.



Nanoórszem agyseleletekben való vizsgálatra alkalmas mérőállomás

Az ionok koncentrációját fehérjék szabályozzák, amelyek jelentőségét kiválóan példázza, hogy az agy az energiafelhasználásának 50-80 százalékát egyetlen ilyen fehérje: a nátrium-kálium pumpa működésére fordítja. Az ionháztartást szabályozó fehérjék működése azonban a jelenleg rendelkezésre álló eszközökkel közvetlenül nem vizs-

gálható, nem állapítható meg, hogy a vizsgálandó fehérje megfelelően tölti-e be a feladatot. Ezt a diagnosztikai hiányosságot hivatott megszüntetni a Nanoórszem, amely képes a sejtmembránban elhelyezkedő ioncsatornákhöz kapcsolódni, és annak közvetlen környezetében detektálni az ionkoncentráció változását, jelezni a fehérje aktivitását vagy annak hibás működését. Ezzel a betegségek kialakulásában szerepet játszó fehérjék működését vizsgáló kutatók jobban megismerhetik az adott fehérje szerepét az ionháztartás megbomlásában, ami segítheti őket a hatékonyabb gyógymódok és/vagy gyógyszer kifejlesztésében.

Valamennyi ion koncentrációjának mérésére alkalmas a Nanoórszem?

– Igen, ezt a fejlesztésünk eddigi eredményei, mérési adatai alapján mondhatom. Ugyanakkor ahhoz, hogy a Nanoórszem sorozatban gyártható legyen, jelenleg a nátriumion működésére koncentrálnunk, hiszen a leggyakrabban ez az ion „cserélődik” a sejtek között.

Hogyan néz ki a Nanoórszem?

– Alapvetően három egységből áll: egy hordozóból, egy ionszenzitív fluoreszcens festékből és a célba juttató molekulából. A fluoreszcens festék és a célba juttató molekula a vizsgált élettani folyamat függvényében cserélhető, hogy az eszköz minél szélesebb körben alkalmazható legyen.

A konzorciumuk az egyetlen, amelyik ilyen kutatásokat, illetve ezt a fejlesztést végzi?

– Valószínűleg nem mi vagyunk az egyetlenek a világon, de ismereteim szerint a mi konzorciumunk áll a legközelebb ahhoz, hogy hatékony eszközt állítson elő az ionháztartás fehérjéinek egyedi vizsgálatára.

Mikorra lesz a Nanoórszemből sorozatgyártásra alkalmas változat?

– A mostani prototípus igencsak biztató eredményeket mutat arra, hogy a projekt 2013-ra tervezett befejezéséig elkészül a szériaváltozat.

Szerző: Bubrik Gáspár

Megjelent: www.innoteka.hu

2011 december

Mindennapi kémia már az oviban is

*Víz, festék, ecet, cukor és tej - a be-
mutatók egyszerű eszközökkel zajla-
nak*

Két különös kémikus járja a na-
pokban Budapest óvodáit: Spa-
tula Sára és Kémcső Jenő a gye-
rekektől szeretne segítséget kérni
legutóbbi kísérletükhöz. Kémcső
Jenő megtestesítőjével, **Paszter-
nák András**sal, az MTA Kémiai
Kutatóközpont Nanokémiai és
Katalízis Intézetének munkatár-
sával beszélgettünk a program-
ról.

„Mivel 2011 a kémia nemzet-
közi éve, a Tudástársadalom
Alapítvány az idei óvodai Tu-
dománycseppek programso-
rozatot a kémiának szenteli.
Korábban biológus és fizikus kol-
légák foglalkoztak a gyerekekkel,
saját tudományterületük egy-
egy cseppjének bemutatásával.
A kémiai foglalkozások márci-
us-április fordulóján zajlanak,
a Tudománycseppekbe 14 fő-
városi óvoda kapcsolódott be.
A tervek szerint több, különböző
módszereket alkalmazó kémiai
bemutató is lesz a közeljövőben,
amelyek egyike az általunk élet-
re keltett Spatula Sára és Kémcső
Jenő története” - tudhattuk meg
Paszternák András

A program komplex módon
igyekszik közel hozni a kémia
világát a legkisebbekhez. Egy
történetet mesélnek el a tudósok,
még hozzá a háztartásokban elő-
forduló eszközök és alapanya-
gok segítségével, legtöbbször cu-
korról, tejjel, vízzel, ételfestéssel,
ecettel és szódabikarbónával. Így
természetesen szó sincs veszélyes
anyagokról vagy robbantásokról.
Ugyanakkor mégsem egyszerű
bemutatóra hivatalosak a gye-
rekek, hanem szakértői felügye-
lettel kísérletezhetnek, hogy ne
csak nézői legyenek a színes, szá-
mukra varázslatos jelenségeknek,
hanem 35 percen keresztül aktív
részesei is. A cél, hogy ha majd
hazamennek, rácsodálkozhassa-
nak ugyanazokra az anyagokra,
mint amelyeket a foglalkozáson
megismertek, és feltehessék a
kérdést - amely egyben a prog-
ram szlogenje is - „Anyá, akkor
te is kémikus vagy?”

„Nem akarunk mindenből ké-
mikust faragni, mindössze meg-
nyitjuk az érdeklődők előtt azt a
világot, amelyben dolgozunk és
élünk, ennek szépségét mi is gyer-
mekkorunkban pillanthattuk
meg először. Ha a mostani ovisok
közül lesz legalább egy, akivel
15-20 év múlva kollégaként talál-
kozunk majd, nem dolgoztunk
hiába” - jelentette ki a kutató. A

Tudástársadalom Alapítvány a Tudománycseppek mellett középiskolai Tudománynapokat is szervez Lángész projektjének keretében, mivel az óvodáktól az egyetemekig kívánják népszerűsíteni a tudományokat. „Az óvodai foglalkozásokkal párhuzamosan az elmúlt héten három középiskolai csoportot fogadtunk az MTA Kémiai Kutatóközpontjában, a nanotechnológiával foglalkoztunk. A gimnazistákban és szakközépiskolásokban megvan az érdeklődés, a kíváncsiság a természettudományok iránt. Csak meg kell találni az utat, hogy közelebb hozzuk a kémiát, a fizikát és a biológiát a tizenévesekhez. Ehhez egy-egy látogatás vagy kihelyezett iskolai óra csupán adalék, az igazán komoly feladat a tanárookra hárul, akiknek folyamatosan fenn kell tartaniuk az érdeklődést” - mondta el Paszternák András, hozzátéve, hogy bár fontos érdekesebbé tenni az órákat kísérletekkel, tanulmányi kirándulásokkal, de végül a kísérleteket, a jelenségeket és a reakciókat úgyis meg kell tanulni. Szerinte ideje belátni, hogy a kémia jelen van a mindennapokban, és nem egy távoli, lombikba zárt dolog.

Szerző: Jancsó Orsolya

Megjelent: Magyar Hírlap

A fehérjék térszerkezetétől a hidratált elektronokig

Aktívan jelen vannak a legnagyobb nemzetközi szakmai folyóiratok hasábjain a magyar kémikusok a Kémia Nemzetközi Évében: a Nature-ben egy magyar akadémikus közreműködésével írt publikációt méltattak olasz kutatók, míg a Science-ben az MTA egyik doktora és munkatársa kommentált egy korábbi tudományos cikket.

- A fehérjéket összetartó belső erőkről sokat tudunk ugyan, de még mindig nem eleget - indokolta az mta.hu-nak nyilatkozva Perczel András akadémikus, az MTA-ELTE Fehérjemodellező Kutatócsoport vezetője azt a fehérjék feltekeredését meghatározó kölcsönhatásokat vizsgáló kutatást, amelynek eredményéről a közelmúltban számolt be négy külföldi kutatóval közösen írt tudományos cikkében az Amerikai Kémiai Társaság lapjában, a Journal of the American Chemical Society-ben (JACS).

A kémikusok szerint főként a vasat tartalmazó fehérjéket felépítő molekulákban mutatható ki olyan mágneses magrezonancia jelenség, amelynek vizsgálatával még jobban megismerhető lesz

a fehérjék térszerkezete, a stabilizáló erők mibenléte. A további kutatások szempontjából nevezte fontosnak és „friss gondolatokat” ébresztőnek a Perczel András közreműködésével született cikket a Nature-ben megjelent kommentárjában két világhírű olasz kutató, Ivano Bertini és Claudio Luchinat is. Perczel András szerint az ilyen reakciók - főleg, ha a Science-ben, vagy a Nature-ben jelennek meg - tovább hitelesítik a kutatási eredményt, az eredeti publikációt követő kommentárok összessége pedig hozzájárulhat ahhoz, hogy az olvasó átfogó képet alkosson magának a témáról.

A biológiai szempontból legfontosabb oldószert, vagyis a vizet, illetve a vizes közegben lejátszódo elemi folyamatokat és hatásait vizsgálja Túri László az MTA doktora. - Az egyetlen elektron és néhány egymáshoz kapcsolódó vízmolekula kölcsönhatása következtében keletkező részecskéknek, az úgynevezett víz molekulafürt-anionoknak óriási a szerepük az atmoszféra kémiájában, egyebek között az ózonlyuk kialakulásában. Mivel a negatív töltésű víz molekulafürtök az egyszerű elektronátadási folyamatok modelljének is tekint-

hetőek, tanulmányozásuk a biokémia szempontjából is kiemelkedő jelentőségű, hiszen ilyen folyamatok zajlanak például a fotoszintézis során is - magyarázta Túri László.

A kémikus és kutatótársai korábban már publikáltak egy cikket a Science-ben, amelyben az addigi magyarázatoktól eltérően írták le a víz molekulafürt-anionok kísérletileg meghatározott tulajdonságait. Munkájuk akkor jelentős vitát váltott ki. Ennek következményeként egy „Comment”, és az arra adott válaszuk is megjelent a Science-ben. Túri László most **Madarász Ádám**-mal, az MTA Kémiai Kutatóközpontjának tudományos munkatársával egy, szintén a Science-ben megjelent kommentárban az általuk végzett kvantummechanikai modelszámításokra hivatkozva mutattak rá azokra a hibákra, amelyeket szerintük a Benjamin Schwartz által vezetett kutatócsoport vétett óriási mé-

retű víz molekulafürtökben „feloldott” elektron, vagyis a hidratált elektron szerkezetének hagyományos modelljét vizsgálva. - A kérdés lényege az, hogy a vízmolekulák által kialakított üregben található-e a hidratált elektron - foglalta össze a vita lényegét Túri László. A magyar kutatók igennel felelnek a kérdésre, és ezzel a hidratált elektron már körülbelül 40 éve felállított hagyományos modelljét erősítik meg. A kutatási területet a vizsgált hidratált elektron rendszer viszonylagos egyszerűsége miatt már évek óta intenzív érdeklődés övezi. Túri László és Madarász Ádám munkája ebbe a sorba illeszkedik, és várhatóan újabb komoly viták kiindulópontja lehet, amelyek eldöntéséhez azonban mind a kísérleti, mind a számítási technikák további fejlődése szükséges.

Szerző: -vb-

Megjelent: www.mta.hu

2011.március 28.

Vérből kimutatható a máj enzimhibája

Magyar találmány optimális gyógyszerterápiára

Nagyon leleményes a magyar nyelv, amikor a rosszindulatú, mérges emberre azt mondja: rosszmájú. Biológiai alapja is van ennek, hiszen a máj a szervezetünkbe került idegen kémiai anyagok, mérgek kiürítéséért felelős. Ha ezt a feladatát valami oknál fogva nem teljesíti tökéletesen, veszélybe, olykor életveszélybe kerülhet az ember.

Az MTA Kémiai Kutatóközpont, valamint a Semmelweis Egyetem Transzplantációs és Sebészeti Klinika munkatársainak sikerült olyan, a gyógyászatban alkalmazható eljárást kidolgozniuk, amely nemcsak a szervátültetés utáni gyógyszerterápia során lehet életmentő, hanem segítheti a különböző betegségekben szenvedő páciens gyógyulását.

Monostory Katalin biológus, toxikológus és munkatársai olyan enzimek vizsgálatával foglalkoznak, amelyek vízben oldhatóvá alakítják a gyógyszerhatóanyagokat, és gondoskodnak arról, hogy ezek kiürülhessenek

a szervezetből. Az átalakítást a májban az úgynevezett citokróm P450 nevű enzimek végzik, az esetek túlnyomó részében sikeresen. Az emberiség néhány százalékában azonban genetikai hiba folytán hiányzik vagy gyengén működik valamelyik citokróm P450 enzim, így az adott beteg gyógyszerlebontó képessége is gyengébb lesz. Mindez nem okoz gondot addig, amíg a páciens olyan orvossal nem kezelik, amelynek átalakításában a csökkenten működő vagy hiányzó enzim vesz részt. Ilyen esetekben nem hat megfelelően valamelyik gyógyszer, sőt mellékhatások, mérgezési tünetek léphetnek fel.

A kutatók olyan diagnosztikai eljárás kidolgozását tűzték ki célul, amely kimutatja a csökkent gyógyszerlebontó képességet. A Semmelweis Egyetem orvosaival néhány éve alkalmazták először azt a diagnosztikai eljárást, amelynek során egy májátültetésen átesett kislánynál a májból vett mintából sikerült kimutatni a csökkent működőképességű enzimet. A műtét után kritikus állapotba került gyermek gyógyszeres kezelését a vizsgálatok eredményei alapján módosították, ennek kö-

szönhetően hamarosan elhagyhatta a klinikát.



A módszer tovább fejlesztésével létrehozott úgynevezett CYPtest olyan betegkímélő, gyors megoldás, amely a kockázatos operáció során életmentő lehet: még a beavatkozás előtt, egyszerű vérvétel útján is ki tudják mutatni, ha valaki sérült citokróm P450 enzimrel született. Ez a vizsgálat arra is alkalmas, hogy a létező, de gyengén működő enzimre figyelmeztesse az orvosokat a gyógyszeres kezelés előtt, méghozzá nemcsak májátültetés, hanem számos egyéb betegség esetében is. A csökkent gyógyszerlebontó képesség ismeretében a beteg egyéni sajátosságaihoz igazítható a gyógyszeres terápia, kiválasztható a legmegfelelőbb hatóanyag és a legoptimálisabb gyógyszeradagolás.

Előfordulhat, hogy bizonyos szerek nem alkalmazhatók, vagy csak alacsonyabb dózisban, ami

még nem idéz elő komolyabb mellékhatásokat. Jó példa erre egy másfél hónapos, epilepsziás baba esete, aki a gyógyszeres kezelés megkezdését követően súlyos állapotba került. Kiderült, hogy a csecsemő mindkét szülőjétől hibás gént örökölt. A gyógyszerelés azonnali leállításával, másfajta hatóanyag alkalmazásával azonnal javult a baba állapota. Előfordul az is, hogy valakinek a szervezetéből nemhogy hiányzik valamelyik citokróm P450 enzim, hanem születéstől fogva több is van belőle, mint másoknál. Egy depressziós hölgnél például azért végezték el a tesztet a kutatók, mert számára hatástalannak bizonyult az antidepresszáns kezelés. Kiderült, hogy mája túl gyorsan bontotta le és ürítette ki a szervezetből az orvosságot, mielőtt még hatott volna. Miután gyógyszeradagját megduplázták, kedélyállapota jelentősen javult. Van még egy előnye ennek a vérből elvégezhető, egyszerű diagnosztikai eljárásnak. Az is ismert, hogy ha nincs is génhibánk, májunk aktuális gyógyszerlebontó képessége mindenkori állapotunktól is függ, melyet befolyásol táplálkozásunk, hormonális állapotunk, a betegségek, vagy

maga a gyógyszeres kezelés, dohányosok vagyunk vagy sem, és sok más külső körülmény. Nagyon hasznos lehet az éppen megfelelő – hatásos, de még mellékhatást nem okozó – gyógyszeradagolás például várandós kismamák esetében.

Az MTA Kémiai Kutatóközpontja a kísérleti eredmények, a sikeres alkalmazások után szabadalmi oltalmi igényt nyújtott be erre a csupán vérvizsgálatot igénylő, új diagnosztikai eljárásra. Egy hazánkban elvégzett májátültetés költsége 16-20 millió forint, ez azonban a szövődmények csökkentésével, így a helyesen megtervezett, egyénre szabott gyógyszeres terápiával lényegesen olcsóbbá tehető.

Szerző: Chikán Ágnes
Megjelent: Népszabadság
2012. január 2.

Rövidítések jegyzéke

MTA KK: Magyar Tudományos Akadémia Kémiai Kutatóközpont

AKI: Anyag- és Környezatkémiai Intézet

BKI: Biomolekuláris Kémiai Intézet

NKI: Nanokémiai és Katalízis Intézet

SzKI: Szerkezeti Kémiai Intézet