

Beszámoló
a 2003. évi tudományos tevékenységről

MTA
Kémiai Kutatóközpont

TARTALOM

KÉMIAI KUTATÓKÖZPONT	5
I. A Kutatóközpont fő feladatai a beszámolási évben	5
A Kutatóközpont 2003. évi tevékenységének főbb mutatói	6
Kémiai Intézet	7
I. A kutatóintézet fő feladatai a beszámolási évben	9
II. Az év folyamán elért kiemelkedő kutatási eredmények	9
Beszámoló néhány kiemelt kutatási eredményről	17
III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok	19
IV. Hazai és nemzetközi pályázatok	20
V. Az év folyamán megjelent jelentősebb publikációk.....	21
A kutatóintézet 2003. évi tevékenységének főbb mutatói.....	23
Izotóp- és Felületkémiai Intézet	25
I. A kutatóintézet fő feladatai a beszámolási évben	27
II. Az év folyamán elért kiemelkedő kutatási eredmények	27
Beszámoló néhány kiemelt kutatási eredményről	30
III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok	32
IV. Hazai és nemzetközi pályázatok	33
V. Az év folyamán megjelent jelentősebb publikációk.....	33
A kutatóintézet 2003. évi tevékenységének főbb mutatói.....	34
Anyag- és Környezetkémiai Kutatólaboratórium	35
I. A kutatólaboratórium fő feladatai a beszámolási évben	37
II. Az év folyamán elért kiemelkedő kutatási eredmények	37
Beszámoló néhány kiemelt kutatási eredményről	41
III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok	42
IV. Hazai és nemzetközi pályázatok	43
V. Az év folyamán megjelent jelentősebb publikációk.....	44
A kutatólaboratórium 2003. évi tevékenységének főbb mutatói.....	46

KÉMIAI KUTATÓKÖZPONT

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

Telefon.: 325-9040, Fax: 325-5990

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

Kémiai Intézet

1025 Budapest Pusztaszeri út 59/67.
(1525 Budapest, Pf. 17.)
Tel.: 325-9040, Fax: 325-5990
e-mail: palg@chemres.hu

Izotóp- és Felületkémiai Intézet

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

Anyag- és Környezetkémiai Kutatólaboratórium

1025 Budapest, Pusztaszeri út 59/67.
(1525 Budapest, Pf. 17.)
Tel: 325-7896, Fax: 325-7892
e-mail: szepvol@chemres.hu

I. A Kutatóközpont fő feladatai a beszámolási évben

Az MTA Kémiai Kutatóközpont 2003. évi tudományos kutatásait a *funkcionális anyagok kémiai kutatásának* tematikája foglalta egységes keretbe.

A kutatási tevékenység fő irányai a következők voltak:

- I. Biomolekuláris és szerves kémiai kutatások,
- II. Felületkémiai és katalízis kutatások,
- III. Szerkezeti kémiai és reakciókinetikai kutatások,
- IV. Anyagtudományi és környezeti kémiai kutatások,
- V. Nukleáris kémiai kutatások

Az I., II. és a III. kutatási főirány művelésében a Kutatóközpont Kémiai Intézete, a IV-ben az Anyag- és Környezetkémiai Kutatólaboratórium, míg a II. és az V. kutatásaiban az Izotóp- és Felületkémiai Intézet vett részt.

A Kémiai Intézet 2003. évi beszámolójából az Anyag- és Környezetkémiai Kutatólaboratóriumba átcsoportosított tudományos osztályok (Polimer kémiai, Polimer fizikai kémiai, Fémkomplex, Analitikai) eredményei és adatai az AKKL anyagában szerepelnek, a Laboratórium azonos feladatú kutatásaihoz integrálódva. Ugyanakkor két beszámoló - korábban az AKKL Lézerspektroszkópiai csoportja, ill. az IKI Optikai spektroszkópiai osztálya – a Kémiai Intézetnél van feltüntetve. Az említettek miatt a kutatóhelyek 2003. évi adatait nem vethetjük össze a korábbi évek beszámolóinak adataival.

A Kutatóközpont 2003. évi tevékenységének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA Kémiai Kutatóközpont

Átlagléttség ¹ :	449	Ebből kutató ² :	246
35 év alatti, intézeti állományban lévő fiatal kutatók száma:			105
Az időszak folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma:			369
Az időszak folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ³ :			367
<i>Ebből</i> idegen nyelvű külföldi folyóiratban:	286	idegen nyelvű hazai folyóiratban:	8
nemzetközi együttműködés keretében:	117	SCI által regisztrált folyóiratban:	264
összesített impakt faktor:	438,309	összes hivatkozás száma ⁴ :	4006
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:	3001		
Megjelent könyv:	5	könyvfejezet: 35	jegyzet: -
<i>ebből</i> magyar nyelven könyv:	1	könyvfejezet: 8	jegyzet: -
Megvédett PhD értekezés:	12	Megvédett MTA doktori értekezés ⁵ :	3
Bejelentett találmányok száma:	3	Megadott szabadalmak száma:	1
<i>ebből</i> külföldön:	1	<i>ebből</i> külföldön:	1
Értékesített szabadalmak száma:	-		
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma:	181	poszterek száma ⁶ :	158
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ⁷ :			61
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	44	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	34
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege:			1,781,654 M Ft
Beruházási támogatás:	16,146 M Ft	Fiatalkutatói álláshelyek száma ⁸ :	24
Az időszak folyamán művelt OTKA témák száma:	74		
	A időszakra vonatkozó szerződésállomány:		82,835 MFt
Az időszak folyamán művelt OM KFHÁ pályázat témáinak száma:			21
NKFP: 8	Az időszakra vonatkozó szerződésállomány:		60,422 MFt
Egyéb: 13	Az időszakra vonatkozó szerződésállomány:		20,394 MFt
Külföldi vagy nemzetközi forrásból művelt témák száma ⁹ :			13
EU forrásból: 10	Az időszakra vonatkozó szerződésállomány:		80,054 MFt
Egyéb: 3	Az időszakra vonatkozó szerződésállomány:		5,816 MFt
Egyéb pályázatok keretében művelt témák száma ¹⁰ :			27
	Az időszakra vonatkozó szerződésállomány:		54,540 MFt
	Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány ¹¹ :		2,088 MFt

Kémiai Intézet

I. A kutatóintézet fő feladatai a beszámolási évben

Az MTA Kémiai Kutatóközpont Kémiai Intézet 2003. évi tudományos kutatásait a *funkcionális anyagok kémiai kutatásának* tematikája foglalta egységes keretbe.

A kutatási tevékenység fő irányai a következők voltak:

- I. Biomolekuláris és szerves kémiai kutatások,
- II. Felületkémiai és katalízis kutatások,
- III. Szerkezeti kémiai és reakciókinetikai kutatások.

A Kémiai Intézet 2003. évi főbb kutatási eredményeiről a II. pont kutatási főirányonként, azokon belül témánként tartalmaz beszámolót.

A témánként feltüntetett teljes ráfordítási adatok mind a közvetlen, mind a közvetett költségeket (így a rezsiköltségek megfelelő hányadát) is tartalmazzák.

II. Az év folyamán elért kiemelkedő kutatási eredmények

Biomolekuláris és szerves kémiai kutatások

- A Szuzuki-, Heck- és Pschorr-reakciók felhasználásával új gyűrűzárási reakciókat dolgoztak ki tri- és tetraciklikus, piridazinnal kondenzált gyűrűvázak szintézisére. Azolopiridinek esetében váratlan gyűrűátrendeződést figyeltek meg: mechanizmus-vizsgálattal alátámasztották a folyamat szigmatróp átrendeződéses jellegét. Új hetarildiéneket és -triéneket, valamint azok aza-analójjait és nitron-származékait szintetizálták, és a termékek cikloaddíciós reakciókészségét vizsgálták. A heterociklusos származékok biológiai hatását illetően két területen értek el figyelemre méltó eredményeket: a) újabb policiklusos hetero-rendszerek esetében regisztráltak interkalációs hatást; b) új, vízdékony fenotiazin-származékok előállításával a multidrog rezisztenciát jelentősen gátló származékokhoz jutottak. Fluoros "click" kémia alkalmazásával terminális acetilén származékokat regio- és kemoszelektíven „fluorossá” alakítottak. Királis organokatalizátorokat állítottak elő, amelyek segítségével Diels-Alder reakciókban jelentős enantioszelektivitást (93 ee) értek el.

Kutatói kapacitás: 8 fő/év
Teljes ráfordítás: 70 400 E Ft
ebből pályázati forrás: 16 000 E Ft

- A tumor kemoterápiában alkalmazható glutation analogonok soklépéses szintézisére új, iparilag is használható módszert dolgoztak ki. Kvantitatív szerkezet-hatás vizsgálatok során kimutatták, hogy a növényi glutation S-transzferáz izoenzimek indukciója dioxacikloalkán típusú molekulákkal független a molekulák biológiai hatásától. Új izotiocianát származékokat, mint rovar attraktánsokat azonosítottak.

Kutatói kapacitás: 3 fő/év
Teljes ráfordítás: 26 400 E Ft
ebből pályázati forrás: 2 000 E Ft

- A lizergsavnak és gyógyászatilag jelentős származékainak totálszintézise érdekében új szintézis-utat valósítottak meg ergolinvázas intermedierek előállítására. A 4-bróm Uhle-ketonnak és származékainak metilaminoaceton etilén-ketáljával történő alkilezése olyan fontos intermediert szolgáltatott, melynek intramolekulás aldolciklizációjával egy új, a 8-oxo-ergolénhez és a lizergsav származékaihoz vezető szabadalomképes eljárást dolgoztak ki.

A spiro-oxindolok szintézise terén a metodika kiterjesztésével új bisz-spiro vegyületeket állítottak elő.

Az oxigén-heterociklusos vegyületek kutatása terén α - és β -naftolok cikloalka-diénekkal végzett ciklizációs reakcióját tanulmányozva felderítették a reakció mechanizmusát.

Kutatói kapacitás: 5 fő/év
Teljes ráfordítás: 44 000 E Ft
Ebből pályázati forrás: 5 000 E Ft

- A heparin- és a heparán-szulfát diszacharid egységeinek szintézisére kidolgozott ortogonális védőcsoportstratégiájukat kiterjesztették magasabb tagszámú oligoszacharidok előállítására is.

Eljárásokat dolgoztak ki a magasabb tagszámú oligoszacharidok előállításához szükséges mono- és diszacharid építőegységek szintézisére. Ezekből az építőegységekből ortogonálisan védett tri- és tetra-szacharidokat állítottak elő. E szintézisek kapcsán jó hozamú, sztereoselektív szintézismódszert dolgoztak ki a heparin- és heparán-szulfát egyik jellemző kötésének, az α -D-GlcpN-(1 \rightarrow 4)-D-GlcpA kötésnek a kialakítására. Ezzel nagymértékben egyszerűsítették a célvegyületek előállítását.

Kutatói kapacitás : 4 fő/év
Teljes ráfordítás: 35 200 E Ft
Ebből pályázati forrás: 16 000 E Ft

- A spontán ionofór aktivitású $\alpha_1\beta_3\epsilon$ GABA_A receptorokat farmakológiailag jellemezték. A glicin receptorkötődés allosztérikus modelljét kiterjesztették parciális agonistákra. Számítógéppel modellezték az 5-HT₃ receptorok szerkezetét és antagonistáik kötődését. Indukált CD-jelet adó marker ligandok segítségével kötődési interakciós vizsgálatokat végeztek AGP szérumfehérje szeparált genetikai variánsaival. Több új, 5-szubsztituált-pirimidin bázist tartalmazó PNS monomert szintetizáltak.

Kutatói kapacitás: 12 fő/év
Teljes ráfordítás: 105 600 E Ft
ebből pályázati forrás: 20 000 E Ft

- Valószínűsítették egy új típusú, uridin-kötő membránfehérje létezését a központi idegrendszerben. Kimutatták a neuromodulátor szomatosztatin felszabadulását B-típusú gamma-aminovajsav receptor (GABA_B) antagonistá hatására *in vivo*. *In vitro* molekuláris és szöveti szintű vizsgálatokban valószínűsítették a GABA_B és a szomatosztatin receptorok kölcsönhatását. Nyomjelzési és elektrofiziológiai technika alkalmazásával jellemezték az izolált, emlős retina fényválaszát, és kimutatták a foszfodieszterázenzim-gátló vegyületek hatását a retina fényválaszára, valamint a fényadaptációra. Jellemezték a hipomagnéziás oldattal kiváltott epileptikus aktivitás-mitázis deszinkronizációját izolált hippocampusz szeletben. Kimutatták a metabotrop Glu-receptorok szerepét a mitokondriális kalciumion-felvételben és az oxidatív metabolizmusban tenyésztett hippocampusz szeletben. Talamokortikális sejtek *genuin* multi-compartment modellben

történő vizsgálatával jellemezték a talamikus gátlás hatását a kérgi és a szenzoros input összegződésére és terjedésére.

Kutatói kapacitás: 12,5 fő/év
Teljes ráfordítás: 110 000 E Ft
ebből pályázati forrás: 26 250 E Ft

- Megállapították, hogy a GYKI-47261 jelű, antiepileptikus hatású vegyület, jelentős CYP2E1 induktív hatással rendelkezik. Megállapították a kalkonok szerkezeti sajátosságai és a CYP1A gátló hatás közti főbb összefüggéseket.

Kutatói kapacitás: 4 fő/év
Teljes ráfordítás: 35 200 E Ft
Ebből pályázati forrás: 4 000 E Ft

- Cukorbetegséget modellező kísérleti állatoknál megállapították, hogy a betegség korai szakaszában jelentkező szívnagyobbodás megelőzhető specifikus nitrogén-monoxid gyökfogókkal *in vivo*.
Fotoszenzibilizátorok tumorellenes hatásának mérését dolgozták ki sejt kultúrában, illetve HIV-ellenes hatását jelezték előre kemometriai módszerekkel.
A sejtletapadást elősegítő, EGF receptor-függő jelátviteli rendszerben szerepet játszó egyes fehérjék aktivitását mérték ki tumoros sejt vonalakban.
Aminosavak és biogén aminok mennyiségére vonatkozó főkomponens és lineáris diszkriminancia analízis segítségével a magyar borok eredetét meghatározó eljárást dolgozták ki szőlőfajták, termőhely, évszám és borkészítési technológia szerint.

Kutatói kapacitás: 9 fő/év
Teljes ráfordítás: 79 200 E Ft
Ebből pályázati forrás: 6 000 E Ft

Felületkémiai és katalízis kutatások

- A biomimetikus katalitikus oxidáció vizsgálatához új oximátovas(II) komplexeket állítottak elő, amelyekkel modellezték a katecholáz enzimhatást a 3,5-di-t-butil-pirokatechin dioxigén oxidációjának példáján. Ferroxim katalizátor jelenlétében vizsgálták a 2-aminofenol oxidációját és modellezték a fenoxazinon szintetáz enzim hatását. Electrospray ionizációs tömegspektrometriával azonosították az oldatban jelenlévő komplexeket. Elektronspin rezonancia spektroszkópia segítségével szabadgyökös köztiterméket mutattak ki a reakció alatt. Különböző vas, kobalt és mangán típusú katecholáz-mimetikus oxidációs katalizátorok esetében kimutatták, hogy a deutérium kinetikus izotópeffektus alapján megkülönböztethető a hidrogénatom-átvitel és az elektronátvitel mint sebesség-meghatározó lépés, ami a reakciómechanizmus legfontosabb vonása. Elemezték a kétféle mechanizmus fellépésének szerkezeti okait. Meghatározták egy újonnan szintetizált, dimer szerkezetű oximátomangán-komplex kristály- és molekulászerkezetét, valamint katalitikus aktivitását.

Kutatói kapacitás: 4 fő/év
Teljes ráfordítás: 46 000 E Ft
Ebből pályázati forrás: 1 500 E Ft

- Kutatásaik eredményeként először sikerült korróziós szempontból aktív fémfelületen (vas elektródon) alkil-mono- és -difoszfátok vizes oldatából tömör, rendezett szerkezetű, jó védőhatású adszorpciós réteget előállítani. Korábban az irodalomban alumíniumon sikerült hasonló viselkedést megfigyelni, mely esetben a stabil passzív film védi a fémot az adszorpcióval és önszerveződéssel párhuzamosan lejátszódó korrózióval szemben. Atomi erőmikroszkópos mérések alapján számszerű összefüggést találtak a korróziós folyamatok következtében egyre növekvő felületi érdesség és a nanorétegek védőhatása között.

Új típusú eljárásokat dolgoztak ki SiO_2 és ZrO_2 nanoszerkezetű bevonatok szol-gél technikával történő előállítására.

Vizsgálták az emberi szövetek sejt közötti tartományának jelentős részét kitevő fehérje – kollagén-réteg képződését különböző fémek, polimerek és önszerveződő monomolekuláris rétegek felületén, továbbá a humán endotél sejtek megtapadását a különféle, kollagén adszorpcióval már kondicionált felületen. A kollagén adszorpció minden esetben hatással volt a felületek biokompatibilitására, mind a növekvő sejtszám, mind a sejtek területi tulajdonságai szempontjából. Az adszorbeáltatott kollagén koncentrációjának növelése jelentősen befolyásolta a sejtek viselkedését, a fibrillumok képződése negatívan befolyásolta a sejtek területét. Szérum nélküli összehasonlító adhéziós kísérletek során megállapították, hogy a sejteknek kedvező felületek a titán és karboxilcsoport-végződésű, önszerveződő rétegek. A sejteknek az affinitása a hidroxil- és a poli-(etilén-oxid) csoportokhoz kicsi. Kollagén adszorpciója ezeken a felületeken megnövelte a sejtszámot, de az affinitási sorrendet nem befolyásolta.

Módszert dolgoztak ki a nanocsövek stabilitásának kiszámítására, amely a rezonancia-energia meghatározásán alapul.

Sóolvadék elektrolízis melléktermékeként szén nanocsöveket állítottak elő. Az előállított nanocsövek tisztítására, azonosítására, vizsgálatára és a morfológiai tulajdonságok megismerésére módszert dolgoztak ki.

Kutatói kapacitás:	17 fő/év
Teljes ráfordítás:	196 000 EFt
ebből pályázati forrás:	38 000 EFt

- Különböző ipari $\text{Pt}/\text{Al}_2\text{O}_3$ és $\text{Re-Pt}/\text{Al}_2\text{O}_3$ alapú reformáló katalizátorok tetraetil-ónnal történő módosítását vizsgálták. A módosítás eredményeként a reformált benzin összaromás tartalma kismértékben, a fokozottan környezetkárosító benzol tartalma jelentős mértékben csökkent. FTIR és Mössbauer-spektroszkópiai mérésekkel bizonyították új, Lewis-savas centrumok képződését a hordozón, illetve, mind a Pt, mind a Re-Pt nanoklaszterek ónnal történő ötvöződését.

Új módszert dolgoztak ki Au/MgO katalizátorok mangánnal és vassal történő módosítására. A módosított katalizátorok igen aktívnak és szelektívnek bizonyultak a CO preferenciális oxidációjában. A módszert szabadalmaztatták.

Hőmérséklet programozott redukcióval kimutatták, hogy a karbonsav észterek alkoholokká történő hidrogenolízisében az igen aktív $\text{Re-Pt}/\text{Al}_2\text{O}_3$, $\text{Sn-Pt}/\text{Al}_2\text{O}_3$ és $\text{Sn-Re-Pt}/\text{Al}_2\text{O}_3$ katalizátorok ionos állapotú réni- és ónt is tartalmaznak. Ennek alapján valószínűsítették, hogy a katalizátorokon a hidrogenolízis a „fémion-fém nanoklaszter” aktívhely együttesen megy végbe.

A kiépített nagy áteresztőképességű reaktor-rendszeren – a kombinatorikus katalízis-kutatásokhoz kidolgozott informatikai rendszer alkalmazásával – vizsgálták metán alacsony hőmérsékletű oxidációját. A munka során igen aktív, új típusú, többkomponensű hordozós fémkatalizátorokat fejlesztettek ki.

A katalitikus folyamatok elméleti számításaiban is alkalmazható korrelációs energia számítása (REBECEP) mellett kidolgozták a zérópont-energia közelítést is. Mindkét módszer egy nagyon gyors algoritmuson alapszik, így a potenciális felületek Hartree-Fock szinten történő számításai viszonylag egyszerűen kivitelezhetők.

Kutatói kapacitás: 7 fő/év
Teljes ráfordítás: 80 500 EFt
ebből pályázati forrás: 2 000 EFt

- Nitrogénmolekulák és felületi hidroxilcsoportok gyenge, hidrogénhidas kölcsönhatásának erősségéből következtettek a hidroxilcsoportok sav-bázis kölcsönhatástól nem befolyásolt, un. belső sáverőségére. A kölcsönhatás vizsgálatára elsőként alkalmazták a nagy nyomású DRIFT spektroszkópiai módszert. Új kémiai eljárással, szilárd fázisban lejátszott reakcióval az Y-zeolit vázban Si^{4+} ionokra cserélték a savas hidroxilcsoportokat hordozó Al^{3+} ionok egy részét. Kimutatták, hogy a megmaradó hidroxilcsoportok belső savassága nem nőtt, de - hibahely képződés következtében - a Brønsted savas hidroxilcsoportok az Y-zeolit szodalit építőelemében is hozzáférhetővé váltak az adszorptívum nitrogén számára. Az eredmények hozzájárultak a zeolitok Si/Al aránya, savassága és katalitikus aktivitása közötti összefüggések tisztázásához.

Kutatói kapacitás: 9 fő/év
Teljes ráfordítás: 103 500 EFt
ebből pályázati forrás: 37 000 EFt

- Alkil-trimetil-ammonium-alkil-szulfátok oldat/levegő határfelületi viselkedését tanulmányozták. Az SFG-mérések eredményei a hosszabb szénláncú vegyületek esetében egy felületi kétdimenziós, elsőrendű, gáz/folyadék fázisátalakulás létre utaltak. Trimetil-klórszilán szililező ágens alkalmazásával előállított, eltérő hidrofobicitású üvegfelületek spektrumainak elemzése révén bebizonyították, hogy a felületre vitt trimetilszilil csoportok jelenléte SFG-spektroszkópiával kimutatható, továbbá összefüggés van az SFG-spektrális intenzitás és a felület hidrofobicitása között. SFG-mérésekkel sikerült igazolni, hogy a Ti vékonyréteg mintákon adszorbeálódott albuminmolekulák konformációjára mind az adszorpció körülményei, mind pedig a Ti felület tulajdonságai erős hatást gyakorolnak, ami lényegesen befolyásolhatja a szervezet válaszreakcióját.

Kutatói kapacitás: 3 fő/év
Teljes ráfordítás: 34 500 E Ft
ebből pályázati forrás: 1 000 E Ft

Szerkezeti kémiai és reakciókinetikai kutatások

- Átmeneti fémionok és szabad gyökök pH-függő koordinációjának, ill. protonálódási-deprotonálódási folyamatainak jellemzésére kétdimenziós spektrumszimulációs eljárást dolgoztak ki. Integrált eljárást hoztak létre az egyensúlyi kémia képződési állandóinak és az ESR-spektroszkópia szerkezeti paramétereinek meghatározására. Kimutatták, hogy szemben a hagyományos potenciometrikus módszerekkel az ESR-spektroszkópia alkalmas izomerek szeparált vizsgálatára is. Új fluoreszcenciás jelzőanyagot találtak, s feltárták a C_{60} és a kalixarének közötti fotokémiai elektronátadási reakció sebességét meghatározó tényezőket. Meghatározták szubsztituált ftalocianinok fotofizikai paramétereit, a fotodinamikus terápiában történő

használhatóság szempontjai alapján. Lézer-indukált plazmák sajátosságait jellemezték a fénykibocsátás spektroszkópiai elemzésével.

Elvégezték a környezetkémiai szempontból érdekes, természetes előfordulású izoflavanon származékok szerkezetazonosítását korszerű NMR-módszerekkel.

Vizes oldatok szerkezetvizsgálatainak során elsőként regisztrálták az $[M(OH_2)_6]^{n+}$ két ($M^{II} = Mg, Zn, Cd$ és Hg) és három vegyértékű ($M^{III} = Al, Ga, In$ és Tl) akvakomplexek távoli infravörös színeképét. A Raman-színeképekkel összevetve, megállapították, hogy a komplexek a T_h pontcsoporthoz sorolhatók a szokásos oktaédes (O_h) szimmetriához képest, kivéve a $[Mg(OH_2)_6]^{2+}$ komplexet, melynek jelentősen torzult oktaédes szerkezete van vizes oldatokban. Közel lineáris összefüggéseket állapítottak meg a közepes M-O vegyértékrezgési frekvenciák, valamint az M-O, nyújtási erőállandók és a $Z^{1/2}/R_o^2$ paraméter között (Z : a komplex töltése, R_o : az egyensúlyi M-O kötés távolsága.)

Kísérletileg feltérképezték egyes esszenciális aminosavak vékonyréteg kromatográfiás (VRK) feltöltésénél *in situ* normál Raman és felületerősített Raman-spektroszkópiai (SERS) detektálási lehetőségét és hatékonyságát négy, különböző frekvenciájú gerjesztő sugárzás alkalmazásával.

FT-IR és Raman-spektroszkópiai mérések, továbbá skálázott kvantumkémiai erőterekkel végzett teljes rezgési analízis és intenzitászámítások alapján, részletesen értelmezték különböző bonyolultsági fokú szerves vegyületek (arilidén-izokromanonok, kalixarén-származékok, pinoszilvin, pirogallol, galluszsav, pirazinszármazékok, acetát-ion) rezgési spektrumait.

Kutatói kapacitás: 30 fő/év
Teljes ráfordítás: 228 000 E Ft
ebből pályázati forrás: 13 150 E Ft

- Meghatározták a brómatom klór-bróm-metánnal (CH_2ClBr) végbemenő gázfázisú elemi reakciójának hőmérsékletfüggését három független kísérleti módszer alkalmazásával, nagyon széles hőmérséklet-tartományban végzett kinetikai mérések alapján. A tapasztalt szokatlan (nem-Arrhenius típusú) hőmérsékletfüggést laza, hidrogénhíd-kötéssel létrejövő $Br...H...CHClBr$ komplex keletkezésével és szerepével magyarázták a reakcióban. A kísérleti eredményeket magas szintű *ab initio* kvantumkémiai és a variációs elvet alkalmazó elméleti reakciókinetikai számításokkal támasztották alá.

A kísérleti és elméleti eredmények felhasználásával pontos értéket adtak meg a $CHClBr$ -gyök képződési entalpiájára vonatkozóan, elsőként a szakirodalomban. A klór-bróm-metánnak jelentős a Föld ózonrétegét károsító légkörkémiai szerepe, amelynek modellszámításokkal történő leírásához bemenő adatként szolgál a meghatározott képződési entalpiaérték.

Oldatfázisban végzett vizsgálataikban megállapították, hogy az erős hidrogénhíd-kötés létrehozására képes alkoholok nagymértékű hatást gyakorolnak a kettős lumineszcenciát mutató rendszerek spektrumára, fotofizikai sajátosságaira és kinetikai viselkedésére. Összefüggést találtak a hidrogénhíd-kötéssel létrejövő komplexek termodinamikai paraméterei és a kettős lumineszcencia kísérletileg mért jellemzői között. Eredményeik hozzájárulnak az oldószerhatás jobb megértéséhez, lehetőséget nyújtanak a gáz - apoláros oldat - poláros oldat - protikus oldat rendszerek egységes kezelésére.

Kutatói kapacitás: 7 fő/év
Teljes ráfordítás: 53 200 E Ft
ebből pályázati forrás: 9 800 E Ft

- Szimmetrikus gazdamolekula kristályok, pl. királis Piedfort-asszociátumok, kriptofánok (C_{3v} , ill. C_{3h} -molekulaszimmetria) rendszereit írták le. Elvégezték makrociklusos zárványvegyületek szisztematikus homostrukturalitási vizsgálatát. A palládium *N*-benzoilnitrénkomplexeinek szerkezetét röntgendiffrakciós, NMR- és IR-spektroszkópiai módszerekkel vizsgálták. Krisztallográfiai adataik alapján elvégezték az arénszulfonil-azidok és a benzoil-azidok összehasonlító szerkezetvizsgálatát. Vizsgálták az általuk előállított organoó(IV)-kupferronátok kristályrácsában a hidrogénhid-akceptor kupferronáto-anion és hidrogéndonor oldószermolekulák (víz, alkoholok) molekuláris és szupramolekuláris szerkezetekre, stabilitásukra gyakorolt hatását. Aromás N-atomot tartalmazó mono- és dikarbonsavak dibutilón(IV)-komplexeit spektroszkópiai módszerekkel és egykristály röntgendiffrakcióval jellemezték. A 2-hidroxicikloalkán karbonsavak és az analóg karboxamidok hidrogénhidjait tanulmányozva a dipólus indukálta polimorfia/izostrukturalitás jelenségét ismerték föl a *transz*-2-hidroxicikloheptánkarbonsav polimorfjaiban. A precedens nélküli krisztallográfiai paradoxon oldószertüggését bebizonyították.

Kutatói kapacitás: 9 fő/év
 Teljes ráfordítás: 68 400 E Ft
 ebből pályázati forrás: 4 400 E Ft

- Meghatározták a $K_2[Ru(bpy)(CN)_4]$ komplexek szerkezetét és hidratációját vizes oldatban, röntgendiffrakciós és kvantumkémiai módszerekkel. Megállapították, hogy a ruténiumion körül oktaédes komplex szerkezet alakul ki, azaz a bipiridin ligandumok eszerint helyezkednek el, és a hidratáló vízmolekulák is ezt követik. Ab initio számításokkal, molekuláris dinamikai szimulációkkal és röntgendiffrakciós mérésekkel meghatározták a Li^+ és Be^{2+} iont tartalmazó, acetonitril és dimetilszulfoxid oldószerekkel készült oldatok szerkezetét.

Kutatói kapacitás: 3 fő/év
 Teljes ráfordítás: 22 800 E Ft
 ebből pályázati forrás: 1 200 E Ft

- Folyadékkromatográfiával kapcsolt tömegspektrometriás módszert dolgoztak ki hosszú szénláncú zsírsavak származékképzés nélküli elemzésére komplex biológiai mátrixból, mely versenytársa lehet a világszerte alkalmazott klasszikus gázkromatográfiás meghatározásnak. A módszer béta oxidációs és peroxiszomális veleszületett anyagcsererendellenességek kimutatására is alkalmas. Olyan, tandem tömegspektrometrián alapuló módszert dolgoztak ki aldehidek meghatározására, amely előzetes kromatográfiás elválasztás nélkül is képes az aldehidek biológiai mátrixból történő meghatározására. Az aldehidek vérben mérhető koncentrációja orvosbiológiai szempontból jelentős. Kidolgoztak egy olyan, hagyományos analitikai kolonnán alapuló, folyadékkromatográfiával kapcsolt tömegspektrometriás módszert növényi olajok jellemzésére, amelynek analízisideje a monolit kolonnák analízisidejével vetekszik, jelentősen kisebb oldószerszükséglet mellett. A Warwick-i Egyetemmel együttműködésben, a tumor marker humán alfa-1-acid glikoproteint modellvegyületként használva, kifejlesztettek egy olyan Fourier-transzormációs tömegspektrometriás módszert, amellyel lehetőség nyílik nagy

molekulatömegű ($MW > 30$ kDa), rendkívül heterogén glikoprotein keverékek nagyfelbontású mérésére előzetes kémiai vagy enzimatikus hasítások alkalmazása nélkül. A korábban a tömegspektrométerben lejátszódó folyamatok modellezésére kifejlesztett Windows-alapú számítógépes programot (MassKinetics) továbbfejlesztették, és sikeresen alkalmazták a kinetikus módszer entrópiaeffektusainak és klaszterszerkezeteknek a vizsgálatára. A program segítségével meghatározták az ütközéses energiaátadás és az infravörös fotonkibocsátás mértékét Fourier-transzformációs tömegspektrométerben.

Kutatói kapacitás: 9 fő/év
Teljes ráfordítás: 68 400 E Ft
ebből pályázati forrás: 14 800 E Ft

- Tisztázták annak alapvető elméleti okait, hogy az intermolekuláris kölcsönhatások számítása során fellepő BSSE-hiba kiküszöbölésére szolgáló kétféle, elvileg tökéletesen különböző korrekciós séma miért ad általában nagyon közeli eredményeket.

Egy elvileg új, kémiai energiapartíciós sémát javasoltak a molekulák Hilbert-térbeli leírásának keretében.

Bevezették az átfedési populáció, kötésrend- és vegyérték-indexek fogalmát a molekulák térbeli, ún. "fuzzy" atomos leírása esetére.

Kémiai energiapartíciós eljárást dolgoztak ki molekulák "fuzzy" atomos leírására.

Kiszámították a $S(^3P) + H_2 \rightarrow SH + H$ reakció potenciálfelületét, és felület-ugrások trajektóriamódszerrel megállapították, hogy a reakcióban jelentős szerepe van a nem adiabatikus effektusoknak.

Megállapították, hogy elemi reakciókban a minimális energiájú reakcióút a potenciálfelületen a kötésrend-megmaradást teljesítő plató peremén helyezkedik el.

Röntgen- és neutron-diffrakciós módszerek segítségével meghatározták a folyékony 2,2-etándiol szerkezetét, az egy molekulára jutó hidrogénkötések számát, valamint a molekula folyadékfázisban felvett konformációját.

Molekuláris dinamikai szimulációk segítségével értelmezték a folyékony metanol, metántiol és metilamin tulajdonságainak különbözőségét.

Kvantumkémiai és klasszikus dinamikai számítások alapján jellemezték a Pd(111) felületen adszorbeált vízmolekulák, illetve vízrétegek szerkezetét.

Kvantumkémiai számítások alapján meghatározták a $CH_2BrCl + h\nu \rightarrow CH_2X + Y$ ($X, Y = Br, Cl$) UV fotodisszociációhoz tartozó kétdimenziós potenciálfelületeket.

Megmutatták az időfelbontásos Röntgen-diffrakció alkalmazási lehetőségét molekula-kristályban.

Elméleti tanulmányok alapján részleteiben feltárták a CO_2 és C_2H_4 molekulák oxidatív C-C csatolásának mechanizmusát, felmérték az oldószerhatás következményeit.

Kvantumkémiai számítások alapján feltérképezték az $M + CO_2 \rightarrow MO + CO$ ($M = Ni, Cu$) reakciókhoz rendelhető alapállapotú potenciális energiafelületek részleteit és azonosították a reakció elemi lépéseit.

Megmutatták, hogy a hidratált $[Ru(bpy)(CN)_4]^{2-}$ komplex anion triplett gerjesztett állapotában a CN...H-OH típusú hidrogénkötések jóval gyengébbek, mint a komplex alapállapotában.

Kutatói kapacitás: 8 fő/év
Teljes ráfordítás: 60 800 E Ft
ebből pályázati forrás: 8 000 E Ft

Beszámoló néhány kiemelt kutatási eredményről

Funkcionális nanoszerkezetű és nanoméretű bevonatok

A funkcionális nanoszerkezetű és nanoméretű bevonatok kutatásának témakörében 2003. évben fontos elméleti eredmények születtek, amelyek közül többnek igen lényeges gyakorlati jelentősége is van.

Módszert dolgoztak ki tömör szerkezetű, hidrofób tulajdonságú alkil-foszfónát védőréteg kialakítására aktív vas felületén. Megállapították, hogy a monofoszfónátok gyors adszorpcióját egy nagyságrenddel lassabb rendeződés követi, melynek során, a molekulák rendeződésével párhuzamosan, az adszorpciós rétegben hidratált vízmolekulák kiszorulása játszódik le. Az adszorpciót Langmuir-típusú kinetika jellemzi, míg a rendeződéses folyamat összetett kinetikájú, ahol a molekulák közötti intermolekuláris kölcsönhatást is figyelembe kell venni. A védőrétegek inhibíciós hatása elsősorban blokkoló tulajdonságukban jelentkezik, az aktív fémoldódás sebessége jelentős mértékben csökken. Vizsgálataik alapján a foszfónátok nemcsak önszerveződő, hanem ún. "öngyógyító" tulajdonsággal is rendelkeznek. A felületet mechanikai karcolással aktiválva, a foszfónátréteg a sérült helyen újból kialakul.

Szilárd felületen Langmuir-Blodgett (LB)-eljárással rendezett szerkezetű, mono- és multimolekuláris filmeket alakítottak ki. Kiválasztották az LB-réteg készítéséhez legmegfelelőbb körülményeket (oldalnyomás, pH, hőmérséklet). Mikrobiológiai és felületvizsgáló kísérletekkel igazolták, hogy a mikroorganizmusok megtapadását üvegen az amfipatikus molekulákból kialakított LB-rétegek gátolják. Szénacélon a nitrogéntartalmú vegyületek lényegesen hatékonyabbak voltak, mint a foszfortartalmúak. Elektrokémiai és felületvizsgáló módszerekkel (atomi erőmikroszkóp, pásztázó elektronmikroszkóp) megállapították, hogy a lánchossz növekedésével az inhibíciós hatékonyság lényegesen nő. Ezzel párhuzamosan a részecskék mérete és a felület borítottsága is növekedett. A rétegek számának növelésével a hatékonyság egy optimális határig növekedett, ami a molekula típusától függően 5-9 réteg. Az atomi erőmikroszkópos mérések alapján számszerű összefüggést találtak a korróziós folyamatok következtében egyre növekvő felületi érdesség és a nanorétegek védőhatása között.

Új típusú eljárásokat dolgoztak ki SiO_2 és ZrO_2 nanoszerkezetű bevonatok szol-gél technikával történő előállítására. Ennek során folyadékfázisban állítottak elő különböző méretű és méreteloszlású részecskéket, majd ezekből a rendszerekből szobahőmérsékletű rétegeképzési eljárással alakítottak ki egy és többszörös rétegeket szilárd hordozók felületén. Atomikusan éles AFM (atomi erőmikroszkópia) használatával tanulmányozták a rétegek nano-léptékű szerkezetét, és felderítették a rétegeképzés folyamatának kulcsparamétereit, amelyek rendezett szerkezetű, különböző méretű nano-doméneket tartalmazó bevonatok előállítását teszik lehetővé. A rétegek jövőbeni gyakorlati alkalmazhatóságának igen jók a lehetőségei, elsősorban vasfelületek korrózióvédő bevonataként.

Kidolgozták az atomi erőmikroszkópia (AFM) módszerén alapuló lokális felületenergia-meghatározás új módszerét és az eljárást alkalmazták különböző felületi energiájú modellfelületek minősítésére. Ehhez kapcsolódóan az AFM szonda tiol-vegyületekkel történő irányított felületmódosítását megvalósítva, meghatározták a szonda és a vizsgált felület között kialakuló lokális adhéziós erő nagyságát a felület különböző pontjain. A mért eredményeket értékelve meghatározták az adhéziós erő, illetve az ebből származtatható határfelületi energia eloszlását. A kapott eredményeket összehasonlították a nedvesedési vizsgálatok eredményein alapuló „makroszkopikus” felületi energia értékekkel, és meghatározták a módszer alkalmazhatóságának korlátait.

Hazai együttműködésben sóoldék elektrolízis melléktermékeként szén nanocsöveket állítottak elő. A nanocsövek fizikai, kémiai tulajdonságait különböző adalékokkal

befolyásolták. Kémiai és fizikai műveleteket alkalmaztak a nanocsövek funkcionalizálására, felületmódosítására. Olyan molekulákat találtak, amelyek alkalmazásával stabilizálni lehetett a nanocső vizes diszperzióját, valamint olyanokat, amelyekkel stabilizálták a nanocső kötegek szerkezetét.

Módszert dolgoztak ki a nanocsövek stabilitásának kiszámítására, amely a rezonancia energia meghatározásán alapul. Kimutatták, hogy az egy szénatomra eső rezonancia energia értéke „karosszék” típusú csövekben, a cső vastagságának függvényében 0,16 és 0,17 eV/szénatom között változik, ahol a felső korlát a végtelen vastag csőre számított értéket jelenti, míg az alsó korlát a legvékonyabb, hipotetikus (1,1) csőre vonatkoztatott határérték. Az eredmények alapján a nanocsövek a „legaromásabb” képződményeknek tekinthetők, ami azt is jelenti, hogy ezek a molekulák addíciós reakciókkal csak nehezen lesznek módosíthatók. Mivel szubsztitúciós reakcióba a nanocsövek felépítésüknél fogva egyáltalán nem vihetők, érthető, hogy módosításuk drasztikus körülményeket igényel, ami a csövek roncsolását is eredményezheti.

Módszert dolgoztak ki nanoindentáció alkalmazásával bevonatok tapadásának vizsgálatára. A nanoindentáció során megrepedő bevonat jellegzetesen torzult behatolási mélység – terhelőerő görbéket eredményez, amiből a réteg delaminációjára lehetett következtetni. A jelenséget üveg felületén kialakított SnO₂ rétegek példáján mutatták be. Ugyancsak nanoindentációval kimutatták, hogy a 68 KeV Ar⁺ ion implantációval kezelt üveg felületi keménysége csökken, mivel a felületi rétegben a tetraéderez Si kötések egy része roncsolódik. A bemutatott kutatásokat a következő projektek keretében végzik: EU projekt: CNT-NET GTC3T-CT-2001-63020 Carbon Nanotubes for Future Industrial Composites: theoretical potential versus immediate application; Különleges tulajdonságú nanoszerkezetű bevonatok fejlesztése környezetbarát felületmódosító eljárásokkal NANOTECH 3A-0059/2002.; OTKA támogatások: T-037643: Funkcionális nanoszerkezetű anyagok, T043577: Nanocsövek előállítása, szerkezete és tulajdonságai. 2003. novemberében elnyerték a „Hungarian Network of Excellent Centers on Nanosciences” c. Európai Unió projektet, amely az említett témához kapcsolódik.

Új módszerek Y-zeolitok katalitikus tulajdonságainak módosítására és jellemzésére

A motorhajtó anyagok mintegy 50 %-át katalitikus krakkolással és hidrokrakkolással állítják elő. A krakkolás korszerű katalizátorainak meghatározó aktív komponense az erős szilárd sav Y-zeolit. Érthető, hogy az Y-zeolit kedvező katalitikus tulajdonságainak felismerése óta eltelt mintegy fél évszázadban a katalízis kutatás egyik legfontosabb területe a zeolit és az aktív alakulatok szerkezetének, valamint a szerkezet és a katalitikus aktivitás összefüggéseinek tanulmányozása volt. A katalizátor tudományos megismerése ennek ellenére sem tekinthető lezártnak. Szükség van olyan fizikai-kémiai módszerekre, melyekkel a katalizátorok tulajdonságai tervezhető módon alakíthatók ki. Az ilyen módszerek alkalmazása hozzájárulhat az ipari katalizátorok fejlesztéséhez és az említett tudományos összefüggések feltárásához is. Ismeretes, hogy a kisebb alumínium-tartalmú zeolit savkatalizátorok legtöbb katalitikus tulajdonsága kedvezőbb, mint az alumíniumban gazdagabb változatoké. Mivel Y-zeolitokat 3-nál nagyobb Si/Al atomarányal nem sikerült szintetizálni, az elmúlt évtizedek zeolitkutatásában kitüntetett figyelmet kaptak a szintézist követő dezaluminálási eljárások. A kutatócsoport 2003. évi kiemelkedő tudományos eredménye az Y-zeolitok szabályozott dezaluminálására kidolgozott új eljárás. Jelentősek továbbá a dezaluminált Y-zeolitok sáverőségére vonatkozó megállapítások is.

A dehidratált zeolitok ionos sókkal szemben mutatott nagy affinitásának tulajdonítható, hogy a sók - amennyiben a környezeti hőmérsékleten a diffúzió aktiválási energiája biztosított - szilárd fázisú diffúzióval behatolnak a zeolit mikropórusaiba. A só és a zeolit fématomjai

között cserereakció játszódhat le, amelyben a zeolitváz Si és Al atomjai, illetve a váztöltést kompenzáló kationok is részt vehetnek. A csere mértékét a reakció termodinamikai egyensúlya határozza meg. A csoport korábbi vizsgálatai a szilárd fázisban lejátszódó ioncserére vonatkoztak. Mélyreható ioncserét sikerült elérniük azoknál a zeolit/só rendszereknél, melyeknél a reakció egyensúlyát a só anionjából és a zeolit kationjából képződő termék folyamatos elvételével a csere lejátszódása irányába tudtuk eltolni. A közelmúltban ismerték fel, hogy $\text{NH}_4\text{Na-Y}$ zeolit és $(\text{NH}_4)_2\text{SiF}_6$ szilárd fázisban végrehajtott reagáltatásával a zeolitváz Al atomjai szabályozott módon Si atomokra cserélhetők. A csere 130-170 °C-on termodinamikailag kedvezményezett. Az előállított dezaluminált Y-zeolitok termikus stabilitása lényegesen nagyobb volt, mint az alumíniumban gazdagabb zeolité. A készítmények közös jellemzője, hogy szerkezetükben nagyobb az Al és Si hiányhely-koncentráció, mint a kiindulási zeolit kristályokban.

A katalitikus aktivitással kapcsolatba hozható legfontosabb tulajdonság a katalizátor savassága. A csoport által kidolgozott eljárással előállított dezaluminált Y-zeolitok olyan szilárd Brønsted-savak, melyek a zeolitvázon kívül nem tartalmaznak alumínium-oxid képződményeket. Az ipari gyakorlatban gőzöléssel stabilizált és aktivált Y-zeolit krakk katalizátorokat alkalmaznak. Gőzkezeléskor a zeolitváz dezaluminálódik és a zeolitos pórustérbe alumínium-oxid képződmények kerülnek.

Az előállított dezaluminált minták saverősségét a savas hidroxilcsoportok és a gyenge bázis nitrogén hidrogénhidas kölcsönhatásának erősségével jellemezték. A nitrogénadszorpciós vizsgálatra egy új kísérleti módszert, a nagynyomású DRIFT spektroszkópiát alkalmazták. Az eredmények arra engedtek következtetni, hogy az $\text{OH}\cdots\text{N}_2$ kötés erőssége arányos a savas hely belső saverősségével, a sav deprotonálási energiájával. A szilárd fázisú dezaluminálással sikerült a savas helyek koncentrációját csökkenteni, de a megmaradó savas helyek belső saverőssége lényegében változatlan marad. Ugyanakkor a kapott Y zeolitok hiányhelyekben gazdag kristályszerkezetében a Brønsted-savas helyek a gyenge bázis adszorptívum és a reaktáns molekulák számára egyébként hozzáférhetetlen üregekben, az ún. szodalit egységek belsejében is hozzáférhetők.

Kimutatták, hogy a gőzölés is jobban átjárható, hiányhelyes Y-zeolit szerkezetet alakít ki, amelyben viszont a savas helyek saverőssége is nagyobb, mint az a gőzölést megelőzően volt.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok

A Kutatóközpont Kémiai Intézetének országon belüli kapcsolatai a következő területeken jelentősek: egyetemi oktatásban való közreműködés; közös kutatási programokban való részvétel egyetemi intézetekkel, más kutatóhelyekkel és vállalatokkal; tudományos szervezetek (beleértve az MTA különböző bizottságait is), társaságok munkájában való közreműködés.

A Kémiai Intézet összesen öt közös kutatólaboratóriumot, ill. együttműködési szerződés keretében közös kutatócsoportot működtet egyetemekkel (Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem; Semmelweis Egyetem; Eötvös Loránd Tudományegyetem). A közös kutatómunka eredményeként 87 tudományos publikáció született 2003-ban. A kutatók közül 33 fő oktat egyetemeken (összes óraszám 1593). A Kémiai Intézet munkatársai a következő egyetemeken vesznek részt a graduális és a posztgraduális képzésben: BME, ELTE, SE, ME, SZTE, DE, PPKE, VE.

Kiemelendő az Intézet kutatásszervező és koordináló munkája a "Validált célmolekulákon alapuló gyógyszer és diagnosztikum tervezés" (MediChem) NKFP-projektben.

A Kémiai Intézet mindhárom kutatási irányban élénk nemzetközi kapcsolatokat folytatott 2003-ban is. Több alkalommal fogadott nemzetközi híru tudósokat neves külföldi kutatóhelyekről, akik közül számosan előadást is tartottak (pl. a Nobel-díjas H. Kroto, továbbá H. van der Plas, Univ. Wageningen, P. Stang, Univ. Utah, J.P. Kennedy, Univ. Akron). A kapcsolatok jelentős mértékben hozzájárulnak ahhoz, hogy az Intézet a kutatásait magas színvonalon végezhesse.

2003. június 17-20. között került sor a Központ Nemzetközi Tudományos Tanácsadó Testületének harmadik ülészakára, amely alkalmat kínált arra, hogy tehetséges fiatal kutatók áttekintést adjanak kiemelkedő eredményeikről. A Testület több tematikai és szervezeti ajánlást is megfogalmazott, valamint értékelte a jelenleg folyó munkákat. Továbbra is kiemelkedőnek és erősítendőnek ítélték a biomolekuláris kémiai, a felületekkel kapcsolatos fizikai kémiai, a nanotudományi és katalizátorkutatásokat, továbbá a polimeranyagok kutatását és a környezetkémiai vizsgálatokat. A Testület szorgalmazta, hogy az említett területek kutatásainak a legkorszerűbb eredmények eléréséhez szükséges kritikus tömeget biztosítsák.

2003-ban összesen 35 kétoldalu kutatási egyezmény keretében folytattak nemzetközi tudományos együttműködést. Nemzetközi konferencián 112 alkalommal vettek részt az Intézet kutatói, míg 22 tanulmányúti, 20 Tét és 69 egyéb kiutazást tettek.

A tudományos együttműködések eredményeként 65 közös publikáció született.

2003-ban a Kémiai Intézet a következő nemzetközi rendezvényeket szervezte meg, ill. vett részt a szervezésben:

- Eurocorr 2003, Budapest,
- 28. International Conference on Solution Chemistry (Debrecen) (a Debreceni Egyetemmel közösen),
- Advances in Chromatography and Electrophoresis – Conferentia Chemometrica, 2003 (a Szegedi Tudományegyetemmel közösen),
- Osztrák-Magyar Szénhidrát Konferencia (a Grazi Műszaki Egyetemmel).

A Center of Excellence on Biomolecular Chemistry projekt keretében:

- NATO Advanced Research Workshop on the Dynamics of Elementary Chemical Reactions,
- Bioorganic Chemistry Meeting,
- Epilepsy Workshop,
- Modern Synthetic Methodologies in Heterocyclic Chemistry.

IV. Hazai és nemzetközi pályázatok

A Kémiai Intézet hazai pályázatokon való részvételét egyértelműen eredményesnek ítélnéljük. Az év folyamán összesen 44 OTKA-témát műveltek az Intézet kutatói és 3 NKFP pályázati programban vettek részt.

Fontosabb hazai pályázati programok 2003-ban

A Kémiai Intézet által koordinált MediChem Konzorcium, „Validált célmolekulákon alapuló gyógyszer és diagnosztikum tervezés” c. NKFP projektje 410 millió forint támogatást nyert el 2001-2003. évekre. Az interdiszciplináris kutatási potenciált összefogó konzorcium kutatásainak célja a Magyarországon legfőbb halálókként szereplő szív- és érrendszeri, valamint daganatos megbetegedések és a kapcsolódó idegrendszeri állapotok korai

felismerését célzó, nagy kapacitású diagnosztikai eljárások kidolgozása, diagnosztikai reagensek kifejlesztése, valamint a betegségek kezelésére irányuló specifikus gyógyszerek előállítására és terápiás kipróbálása.

A „Különleges tulajdonságú nanoszerkezetű bevonatok fejlesztése környezetbarát felületmódosító eljárásokkal” (NANOTECH) c. NKFP-program résztvevői: MTA KKKI, BME, BAYATI, Festékipari Kutatóintézet, Kemobil Rt., Dunaferr Rt., MTA SZFKI, Mikro-T. Kft. MTA MFA. A támogatás teljes összege: 110 Mft. Koordináló intézmény: MTA KK KI.

Az EU-6 pályázatok eredményéről jelenleg még nem lehet minden témára vonatkozóan beszámolni. A 2003-ban elnyert pályázatok a következők:

Center of Excellence on Biomolecular Chemistry
Résztevő és koordinátor: MTA Kémiai Kutatóközpont

INCO strategic action on training and excellence
Résztevő és koordinátor: MTA Kémiai Kutatóközpont

Hungarian Network of Excellent Centers on Nanosciences
Koordinátor: MTA Kémiai Kutatóközpont

V. Az év folyamán megjelent jelentősebb publikációk

1. Riedl Zs, Kövér P, Soós T, Hajós Gy, Egyed O, Fábíán L, Messmer A: Unexpected ring transformation to pyrrolo[3.2-*b*]pyridine derivatives. Fused azolium salts. 22, Journal of Organic Chemistry, 68, 5652-59 (2003)
2. Incze M, Moldvai I, Temesvári-Major E, Dörnyei G, Kajtár-Peredy M, Szántay Cs: Chemistry of indoles carrying basic function. Part 8. A new approach to the ergoline skeleton, Tetrahedron, 59, 4282-4286 (2003)
3. Fügedi P: The potential of the molecular diversity of heparin and heparan sulfate for drug development, Mini Reviews in Medicinal Chemistry, 3, 659-667 (2003)
4. Simonyi M, Bikádi Z, Zsila F, Deli J: Supramolecular exciton chirality of carotenoid aggregates, Chirality, 15, 680-698 (2003)
5. Kovács I, Lasztóczi B, Szárics É, Héja L, Sági Gy, Kardos J: Comparison of binding and functional properties of pyrimidine and purine derivatives *in vitro*, Neurochemistry International, 43, 101-112 (2003)
6. Tamási V, Hazai E, Porsmyr-Palmertz M, Ingelman-Sundberg M, Vereczkey L, Monostory K: Gyki-47261, a new AMPA [2-amino-3-(3-hydroxymethylisoxazole-4-yl)propionic acid] antagonist, is a cyp2e1 inducer, Drug Metabolism and Disposition, 31, 1310-1314 (2003)
7. Stadler K, Jenei V, von Bölcsházy G, Somogyi A, Jakus J: Increased nitric oxide levels as an early sign of premature aging in diabetes, Free Radical Biology and Medicine, 35(10), 1240-1251 (2003)
8. Simándi LI: Catalytic Oxidations Using Cobalt(II) Complexes, In: Advances in Catalytic Activation of Dioxygen by Metal Complexes (Ed. Simándi LI) Kluwer Academic Publisher, Dordrecht, Boston, London, 2003, pp 265-328

9. Nagy NM, Kónya J, Beszeda M, Beszeda I, Kálmán E, Keresztes Zs, Papp K, Cserny I: Physical and chemical formations of lead contaminants in clay and sediment, *Journal of Colloid and Interface Science*, 263, 13-22 (2003)
10. Margitfalvi JL, Borbáth I: Time dependence of tin anchoring to supported platinum, *Journal of Molecular Catalysis A-Chemical*, 202, 313-326 (2003)
11. Lónyi F, Valyon J, Pál-Borbély G: A DRIFT spectroscopic study of the N₂ adsorption and acidity of H-Faujasites, *Microporous and Mesoporous Materials*, 66, 273-282 (2003)
12. Pászti Z, Petó G., Horváth ZE, Geszti O, Karacs A, Guczi L: Nanoparticle formation induced by low-energy ion bombardment of island thin films, *Applied Physics A-Materials Science & Processing*, 76, 577-587 (2003)
13. Nagy NV, Szabó-Plánka T, Rockenbauer A, Peintler G, Nagypál I, Korecz L: Great structural variety of complexes in copper(II)-oligoglycine systems: Microspeciation and coordination modes as studied by the two-dimensional simulation of electron paramagnetic resonance spectra, *Journal of the American Chemical Society*, 125(17), 5227-5235 (2003)
14. Demeter A, Bérces T, Hinderberger J, Timári G: Dual luminescence properties of differently benzo-fused N-phenylphenanthridinones, *Photochemical and Photobiological Sciences*, 2, 273-281 (2003)
15. Bombicz P, Czugler M, Tellgren R, Kálmán A: A classical example of a disappearing polymorph and the shortest intermolecular H...H separation ever found in an organic crystal structure, *Angewandte Chemie-International Edition*, 42, 1957-1960 (2003)
16. Megyes T, Schubert G, Kovács M, Radnai T, Grósz T, Bakó I et al: Structure and properties of [Ru(bpy)(CN)₄]²⁻ complex and its solvent environment: X-ray diffraction and density functional study, *Journal of Physical Chemistry A*, 107, 9903-9909 (2003)
17. Drahos L, Vekey K: Entropy evaluation using the kinetic method: is it feasible? *Journal of Mass Spectrometry*, 38, 1025-1042 (2003)
18. Mayer I: *Simple Theorems, Proofs, and Derivations in Quantum Chemistry*, Kluwer Academic/Plenum Publishers, New York, 2003, p 352

A kutatóintézet 2003. évi tevékenységének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA Kémiai Kutatóközpont, Kémiai Intézet

Átlaglétszám ¹ : 245	Ebből kutató ² : 157
35 év alatti, intézeti állományban lévő fiatal kutatók száma: 69	
Az időszak folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma: 188	
Az időszak folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ³ : 187	
Ebből idegen nyelvű külföldi folyóiratban: 160 idegen nyelvű hazai folyóiratban: 2	
nemzetközi együttműködés keretében: 65 SCI által regisztrált folyóiratban: 152	
összesített impakt faktor: 326,340 *összes hivatkozás száma ⁴ : 2701	
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül: 1886	
Megjelent könyv: 1	könyvfejezet: 10 jegyzet: -
ebből magyar nyelven könyv: -	könyvfejezet: 1 jegyzet: -
Megvédett PhD értekezés: 8	Megvédett MTA doktori értekezés ⁵ : 3
Bejelentett találmányok száma: 1	Megadott szabadalmak száma: -
ebből külföldön: -	ebből külföldön: -
Értékesített szabadalmak száma: -	
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma: 89 poszterek száma ⁶ : 93	
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ⁷ : 33	
Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 28 Nemzetközi folyóirat szerk. tagság: 16	
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege: 1,045,676 M Ft	
Beruházási támogatás: 3,446 M Ft Fiatal kutatói álláshelyek száma ⁸ : 15	
Az időszak folyamán művelt OTKA témák száma: 44	
A időszakra vonatkozó szerződésállomány: 54,556 MFt	
Az időszak folyamán művelt OM KFHÁ pályázat témáinak száma: 6	
NKFP: 3	Az időszakra vonatkozó szerződésállomány: 28,029 MFt
Egyéb: 3	Az időszakra vonatkozó szerződésállomány: 8,843 MFt
Külföldi vagy nemzetközi forrásból művelt témák száma ⁹ : 8	
EU forrásból: 5	Az időszakra vonatkozó szerződésállomány: 67,705 MFt
Egyéb: 3	Az időszakra vonatkozó szerződésállomány: 5,816 MFt
Egyéb pályázatok keretében művelt témák száma ¹⁰ : 2	
Az időszakra vonatkozó szerződésállomány: 1,0 MFt	
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány ¹¹ : 1,448 MFt	

*: az 1992-től 2003-ig megjelent közlemények adata

Izotóp- és Felületkémiai Intézet

I. A kutatóintézet fő feladatai a beszámolási évben

A KK IKI 2003. évi fő kutatási céljait a 2002. évi beszámolóval együtt benyújtott – mindkét alapvető tevékenységi irányra (heterogén katalitikus és izotópkémiai kutatások, továbbá e két fő kutatási irány közötti kapcsolatok erősítésére) kiterjedő – összeállítás tartalmazta.

A heterogén katalitikus és kapcsolódó kutatások terén kiemelkedő fontosságú volt a nagydiszperzitású rendszerek, nano-katalizátorok, nanoklaszterek, szénváz-átrendezéses és környezetvédelmi reakciók vizsgálata. E témakörökben jó, egyes esetekben kiváló eredményeket értek el. Említést érdemel két könyvfejezet megírása a „Nanotechnology in Catalysis” c. Kluwer által szerkesztett könyvben. Technikai nehézségek léptek fel a szénhidrogén adszorpció (AES) és a kénizotópcserre méréseknél. Újabb jelentős lépés történt a nukleáris módszerek alkalmazása terén a katalizátorkutatásban: Pd és Ag szolok képződését vizsgálták víz és alkohol elegyek gamma sugárzásával.

A nukleáris kémiai kutatások terén a Nukleáris Kutatások Osztálya által Molnár Gábor (†2004 január) vezetésével végzett legfőbb feladat – a „Handbook of Prompt Gamma Activation Analysis (PGAA)” (Kluwer Academic Publishers) – teljesítésében jelentős előrehaladás történt, a munka 2004-ben előreláthatóan befejeződik. Másik kiemelkedő fontosságú – a katalizátorkutatással közös feladat - a hidegneutronos *in beam Mössbauer spektroszkópia* alkalmazását célzó berendezés kiépítése – megkezdődött. E munka keretében egy újabb *Mössbauer* spektroszkópiai mérőberendezés épült ki.

A nukleáris ellenőrzési és dozimetriai módszerek fejlesztése terén a fő feladat az országban levő nagyszámú, összességében tetemes mennyiségű hasadó anyagot tartalmazó neutronforrás plutónium tartalmának meghatározását célzó több, párhuzamos ellenőrző módszer, továbbá új, uránminták meghatározását célzó módszer kidolgozása volt. A dozimetria terén a nagy hőmérsékletű besugárzás TL-dózismérőkre kifejlesztett hatásvizsgálata volt kiemelkedő feladat a Paksi Erőmű technológiai körülményeire tekintettel. E feladatok lényegében teljesültek. Kiemelt célként szerepelt a PHARE program keretében beszerzésre kerülő tömegspektrométer üzembehelyezésének előkészítése. A fő célok közé tartozott a radioaktív anyagok szállítását engedélyező eljárásban 2004-től bevezetésre kerülő nemzetközi biztonsági ajánlások érvényesítési módjának kidolgozása. E feladatok nagyrészt teljesültek.

A sugárhatáskémiai kutatások fő feladatai között a sugárzásos polimerizáció, a cellulóz degradáció, a textilipari színezékek szennyvíztisztítási célú radiolitikus roncsolása, a programozott tulajdonságú gélek, továbbá a kromatográfiásan alkalmazható polimer monolitok sugárzásos előállításának szerepelt. E kutatások eredményesen haladtak.

II. Az év folyamán elért kiemelkedő kutatási eredmények

Heterogén katalitikus, felület- és szerkezetkémiai kutatások

A katalíziskutatásban új, nanotechnológián alapuló módszerek felhasználásával különböző reakciókban megnövekedett aktivitású és szelektivitású nanorészecskéket állítottak elő és azokat korszerű fizikai és fizikai-kémiai technikákkal jellemezték. Megállapították, illetve bizonyították, hogy

- $\text{Fe}_2\text{O}_3/\text{Au}/\text{Si}(100)$ modellrendszerben a teljesen fedett arany promoteáló hatást fejt ki a vele érintkező felületi vasoxid réteg katalitikus aktivitására CO oxidációban. A nanoméretű arany promoteáló hatása nagyobb mint a tömbi jellegű arany réteggé;

- TiO_2 hordozós AuPd nanorészecskék előállítási módszere befolyásolja a fém/fémoxid határfelület szerkezetét és ennek következményeként a katalitikus aktivitást;
- víz és alkohol elegyek gamma besugárzásával Pd- és Ag-szolok állíthatók elő;
- a hordozós ezüst nanorészecskék a sztirol-oxid hidrogénezésében katalitikusan aktívak;
- grafit kristály (HOPG) felületén vékony, 1-2 nanométer vastag alumínátrétegek hozhatók létre. Pásztazó alagútmikroszkópos (STM) vizsgálatokkal megállapították, hogy a rétegekben hibahelyek (lyukak) maradnak és a felület teraszhatárai mentén néhányszor 10 nm széles és több 100 nm hosszú „pálcikák” alakulnak ki.
[Létszám: 8,5 fő, ebből IKI: 6,5 fő. Ráfordítás: 57 MFt, ebből pályázat: 3,6 MFt]

Konvencionális hordozós katalizátorokon bizonyították, hogy

- HZSM-5 hordozós Ga ill. Ga-Mo katalizátorokon elérhető 10%-os metán konverzió grafitképződés következtében gyorsan csökken és változatlan szelektivitás (C_2 :aromástermékarány) mellett 2-3%-on stabilizálódik;
- a germánium borítottság változása befolyásolja a $\text{GeRh}/\text{Al}_2\text{O}_3$ katalizátoron a szénváz átrendeződési folyamatok szelektivitását;
- a PtPd katalizátorok felületi összetétele módosul, és ez kihat e katalizátorok szelektivitására hidrogénes ill. oxidáló kezelésüktől függően;
- a n-hexán katalitikus átalakulása során kialakuló Pt:H:C arány befolyásolja mind a hordozómentes, mind a SiO_2 és CeO_2 hordozós Pt katalizátorok aktivitását és szelektivitását
- [Létszám: 9,3 fő, ebből IKI: 4,3 fő. Ráfordítás: 14 MFt, ebből pályázat: 3,5 MFt]

A környezetvédelmi jelentőségű katalitikus reakciók tanulmányozása során bizonyították, hogy

- az $\text{Ag}/\text{Al}_2\text{O}_3$ katalizátoron lejátszódó NO redukcióban a katalizátor optimális ezüst-tartalma 3-5%, valamint a nagyobb ezüst tartalom ezüst-krisztallitok kiválása révén hátráltatja a reakciót. Módszert dolgoztak ki a felületi ezüst szelektív mérésére;
- szoros korreláció létezik a tiofén-hidrodeszulfurálásban kifejezett katalitikus aktivitása és a katalizátor cserélődni képes kénatomjainak abszolút mennyisége között.
- összefüggés áll fenn a különböző rétegek, ill. mezo- és mikropórusos oxidok összetétele, szerkezete, termikus stabilitása és vezetőképessége között átmeneti fém-sókat tartalmazó α - és γ -Ti-foszfátok, továbbá V-Cr-oxidok esetében. Fenton típusú oxidációban használható ferriszilikátoknál megmutatták, hogy a szintézismódszer kis változtatásával a vas nagyon eltérő módon és mennyiségben építhető be a szerkezetbe.
- [Létszám: 10 fő, ebből IKI: 6,5 fő. Ráfordítás: 35 MFt, ebből pályázat: 2,5 MFt]

Nukleáris kémiai kutatások

Összegezték, részletesen és egységes formában leírták (standardizálták) a PGAA-eljárásokat, meghatározták és publikáltak minden kémiai elemre legalább egy parciális gamma-keltési hatáskeresztmetszetet. [2 fős csoport, ebből 2 fő intézeti, 5 MFt intézeti, ebből 1 MFt pályázati forrás].

Új eredményeket értek el a PGAA nukleáris, geológiai, kémiai (katalízis) és régészeti (archeometriai) alkalmazása útján [10 fős csoport, ebből 5 fő intézeti 20 MFt intézeti, ebből 5 MFt pályázati forrás].

PGAA módszerrel meghatározták és publikálták a tellúr izotópok teljes és számos gamma-átmenetének parciális neutronbefogási hatáskeresztmetszetét, továbbá meghatározták az

izomer arányokat, melyek befolyásolják a nukleáris asztrofizikai számításokban a Te izotópok keletkezési gyakoriságát [11 fős csoport, 5 fő intézeti, 1 MFt intézeti forrás] Továbbfejlesztették a PGAA technikát [2 fős csoport, 2 fő intézeti 3 MFt intézeti forrás].

Nukleáris ellenőrzés és dozimetria

Két független módszert dolgoztak ki a plutónium-berillium (PuBe) neutronforrások Pu tartalmának meghatározására a) neutron koincidencia és összneutron mérés, valamint b) γ -spektrometria útján. Az eredmények jó egyezése bizonyítja a módszerek alkalmazhatóságát.

γ -spektrometriai módszert dolgoztak ki további transzurán-tartalmú (AmBe, AmLi) neutronforrások összetételének meghatározására. Az ellenőrzési módszerek hazai alkalmazásának fontosságát illusztrálja az országban lévő mintegy 200, névlegesen összesen 5 kg-ot meghaladó mennyiségű plutóniumot tartalmazó neutronforrás. Az eljárások – tekintettel e források világszerte széleskörű elterjedtségére – előreláthatóan külföldön is felhasználásra kerülnek. Az eredményt 5 főből álló intézeti kutatócsoport érte el. [A becsült ráfordítás 20 MFt, ebből pályázati forrás 9,5 MFt]

A Paksi Atomerőműben folytatták a reaktorblokkokban a dóziseloszlás mérését az intézetben kifejlesztett metodika szerint. Az eddig végzett mérések eredményei alapján 3 éves szerződés keretében határozták meg a mérési programot az összes blokkra. [2 munkatárs, ráfordítás 8 MFt, pályázati forrás 3,7 MFt]

Folytatták új sugártechnológiai dozimetriai rendszerek kifejlesztését. Nemzetközi összehasonlító vizsgálatokkal igazolták új típusú optikailag stimulált lumineszcencia mérésén alapuló filmdoziméterek alkalmazhatóságát ipari γ - és e^- -sugárzással iniciált sugártechnológiai folyamatok ellenőrzésére. [3 munkatárs, becsült ráfordítás 7 MFt]

A radioaktív anyagok központi nyilvántartásának vezetése során mintegy húszezer új tételt regisztráltak 2003-ban. A radioaktív hulladékok elhelyezésével kapcsolatban folyamatosan egyeztettek a nyilvántartás és az elhelyezésre kerülő tételek adatait. A radioaktív anyagok szállításával kapcsolatos szakértői tevékenység keretében többek között véleményezték a paksi üzemanyag beszállításokat, hozzájárultak a sugárforrás gyártásra és szállításra 2004 januárjától a nemzetközileg előírt új szabályozás életbeléptetéséhez szükséges feltételek biztosításához. [6 munkatárs, becsült ráfordítás 25 MFt, ebből pályázati forrás 16 MFt]

A sugárhatáskémiai kutatások terén

Impulzusradiolízis technika alkalmazásával tanulmányozták a H-atom reakcióit 20 különböző akrilát típusú vegyülettel és megállapították, hogy a H-atomok a kettős kötésre addicionálódnak. A sebességi együtthatók sorrendje: krotonátok ~ maleinátok < fumarátok < akrilsav észterek ~ akrilamidok < metakrilsav észterek. A témakörből akadémiai doktori disszertáció készült.

Újabb eredményeket értek el gyógyszeradagolásra alkalmas, hőmérsékletváltozásra inverz térfogatváltozással reagáló N-izopropilakrilamid gélek szintézisében a monomer, illetve polimeroldatok besugárzásával különböző hőmérsékleteken. Megállapították, hogy a nagyobb hőmérsékleten besugárzott oldatokból gyors, másodperceken belüli összehúzódásra képes makropórusos gélek állíthatók elő, amelyek segítségével – többek között – gyógyszerek impulzusszerű adagolására is lehetőség van.

A sugárhatáskémiai kutatásokban 5 hazai és 3 külföldi (olasz) kutató dolgozott. [Akadémiai forrás összesen kb 40 MFt, hazai és külföldi pályázati forrás kb 8 MFt].

Az egyéb eredmények között kiemelkedőként tartandó számon az intézet kutatóinak széleskörű részvétele a 2003-ban megjelent Handbook of Nuclear Chemistry több fejezetének és táblázatokban összefoglalt, nagy volumenű mellékleteinek szerzői között. Kiemelendő a monográfia 3. kötetében megjelent, több mint három szerzői ívet kitevő fejezet, a Radiation Chemistry elkészítése, a Dosimetry Methods c. fejezet megírása, valamint Molnár Gábor tevékenysége a monográfia négy kötete Mellékleteinek szerkesztője, ill. társ-szerkesztőjeként.

Beszámoló néhány kiemelt kutatási eredményről

Nanorészecskék katalitikus sajátosságai

Nanotechnológiának nevezik azokat az eljárásokat, amelyekben a 100 nm-nél kisebb méretű anyagok különleges (elektronos, kémiai és szerkezeti) tulajdonságait használják fel. Nanoszerkezetek (nanorészecskék, nanopórusok, nanocsövek, dot-ok, stb.) előállíthatók polikristályos anyag méretcsökkentésével. A méretcsökkentés olyan új tulajdonságokhoz vezet, amelyek az új technológiák alapját képezik. A nanotechnológia kiváló innovatív lehetőségekkel rendelkezik és jószerével ez a 21. század húzóerejévé válhat. Az eddig bevezetett technológiák mintegy 30 milliárd Eurót termeltek és mintegy 10 %-os növekedéssel számolnak.

A nanotechnológia kémiai és katalitikus alkalmazása számos problémát vet fel az uniformizálás, fixálás, önszerveződés, felületi és tömbi összetétel területén. A fémek állapotban történő változások legérzékenyebben észlelhetők a fémrészecskék morfológiájának és elektronszerkezetének megváltozásán keresztül. A méretcsökkenéssel számos felületi szabad vegyérték szabadul fel, felületi szabadenergia megnövekszik és a vegyértéksáv elektronszerkezete is megváltozik. A kémiai molekulák aktiválása e nanorészecskéken könnyebbé válik, a katalitikus reakciókban tehát a rövid távú rendezettséget mutató fém nanorészecskék, klaszterek és a hordozó közötti határfelületen a szubsztrátum aktiválási mechanizmusa módosul. A **néhány nanométer átmérőjű** részecskék felületének **atomi szintű megismerése** hozzásegít **szerkezetük** és **reakcióképességük** közötti összefüggések feltárásához.

Egyik alapvető probléma a nanorészecskék méreteloszlása adott katalitikus reakció szelektivitása ugyanis függ a részecskék nagyságától. Az egyforma részecskeméret biztosítása azonban nem egyszerű feladat. Így külön hangsúlyt kell fordítani a metastabilis állapotú nanorészecskék stabilizálására. Ebben különösen jelentősnek bizonyul a határfelület szerepe, amellyel a részecskék kölcsönhatásba léphetnek és ezáltal felületi vándorlásuk lelassul, vagy megszűnik.

Nanorészecskék előállítására elvileg két mód létezik: az egyik, a nagyobb részecskék aprítása pl. lézer ablációval a Si(100) egykristály felületén Co, Pt, Cu, Ag, Au rendszerek állíthatók elő, míg a másik módszer a nanorészecskék atomokkénti felépítése kémiai módszerekkel, pl. zeolit üregeibe történő behelyezéssel. A zeolitok üregei ugyanis megátolják a fémionokból előállított fém nanorészecskék növekedését. Ideális esetben így teljesen egyforma méretű részecskék hozhatók létre. Példaként említhető a Pt-Co/NaY rendszer, amelyben a zeolitok üregeiben elhelyezkedő Pt-Co nanorészecskék esetében az elektronhiányos platinán a CO molekula aktiválási mechanizmusa megváltozik és alkoholok képződnek, míg nem-nanométerű Pt-Co a szénhidrogének képződését segíti elő.

Egyforma méretű nanoszerkezetek, a kívánt méretek szintézise irányítható, ha a gócképződés/részecskénövekedés sebességeinek arányát szabályozzuk. Így ugyanis tudatosan változtathatjuk a képződő részecskék méret-tartományát. A képződő fémszók gócképződése spontán folyamat, ill. számos módon befolyásolható, pl. kémiai úton, vagy akár ionizáló

sugárzás felhasználásával. A képződő fémszólók polimerekkel stabilizálhatók, majd a hordozó felületére történő felvitel után eltávolítható a részecskék méretének lényeges megváltoztatása nélkül.

A részecskeméret csökkenése elősegítheti a kétfémes részecskék képződését is minden olyan esetben, amikor nem korlátlanul elegendő fémeket használunk. Ez egyúttal elektronszerkezet változását is eredményezi.

Nanorészecskék tehát fontos szerepet játszanak ún. "csúcstechnológiájú" katalizátorok és különleges szelektivitású anyagok előállításában. Ezeknél nemcsak a katalitikus aktivitás, hanem a szelektivitás is lényegesen megváltoztatható.

A nagyenergiájú sugárzással iniciált polimerizáció kinetikájának tanulmányozása

A műanyagiparban több évtizede működnek nagyenergiájú sugárzást alkalmazó technológiák. A különböző típusú polimer termékeket (pl. polietilén (PE) hab, PE kábelbevonatok és csövek, PVC csövek, stb.), illetve vékony felületbevonatokat gyakran elektronszórásos eljárással térhálósítják. A gyógyászati területen alkalmazott hidrogének szintézisének is elterjedt ez az iniciálási mód. Magyarország élen járt a technológia bevezetésével, amikor mintegy 30 évvel ezelőtt megvalósították a polietilénből készült cső, illetve kábelszigetelés sugárzásos térhálósításának ipari eljárását (VSZM-MÜKI). A besugárzás nagyfeszültségű elektrongyorsítóval történik, az alkalmazott technológia azonban meglehetősen elavult. Viszonylag nagy dózist (nagy energia felhasználás) alkalmaznak, a monomeradalék dóziscsökkentő hatását és egyéb előnyeit a beruházás idején még nem ismerték.

Az egyéb iniciálási módszerekkel szemben számos előnye van a sugárzásos iniciálásnak. Ellentétben az egyéb iniciálási módokkal, ennél a módszerrel nincs szükség semmiféle adalékra (iniciátor, szenzibilizátor, katalizátor), ezért nagy tisztaságú polimert lehet előállítani. Emellett a sugárzásos iniciálás energiatakarékos és környezetkímélő eljárás. A polimerek sugárzásos térhálósításánál akrilsav- vagy metakrilsav-észter típusú monomereket használnak adalékként. A monomeradalék a feldolgozási paraméterek mellett általában a végtermék tulajdonságait is kedvezően befolyásolja.

A sugárzásos felületkezelés olyan festési eljárás, amely a hagyományos nagy energia-felhasználású kemencés beégetési technológiát váltja ki. Az elektronszórásos felületkezelés oldószermentes technológia (az oldószert a monomer helyettesíti). Az oldószer elpárologtatási lépést váltja ki a jóval kevesebb energiát fogyasztó besugárzás. Ez nem csak energia takarékossgot jelent, hanem környezetvédelmi és egészségvédelmi szempontból is jóval előnyösebb. Az elpárologtatott oldószer ugyanis a környezetet szennyezi, s az ott dolgozók egészségét is veszélyezteti.

Nemcsak elméleti, hanem gyakorlati jelentősége is van ezért annak, hogy ismerjük a monomerek polimerizációs reakcióját, a reakció kinetikai együtthatóit és mechanizmusát. Az MTA KK IKI-ben rendelkezésre álló impulzusradiolízis technika alkalmas a sugárzás hatására keletkezett köztitermékek koncentrációjának követésére (ns-tól ms-ig terjedő időtartományban) azok szerkezetének azonosítására és a kinetikai együtthatók meghatározására.

A kutatás végső célja, hogy igény esetén az ipari felhasználóknak segítséget tudjanak nyújtani a megfelelő monomeradalék kiválasztásához, hiszen a monomer reaktivitásának és kinetikai együtthatóinak ismerete igen fontos az ipari felhasználás szempontjából.

A munka során mintegy 40 monomer reakcióit vizsgálták. A különböző monomerek reaktivitása között nagymértékű eltéréseket figyeltek meg. Meghatározták az iniciáló gyökök szerkezetét, az első oligomerizációs lépések és a lánczáródás sebességi együtthatóit és ezen jellemzők szerkezetfüggését. Azt tapasztalták, hogy az akrilátok sokkal reaktívabbak, mint a metakrilátok. A monomergyökök ciklohexános oldatban mért lánczáródási sebességi együtthatója körülbelül két nagyságrenddel nagyobb, mint az első néhány növekedési lépésben keletkezett oligomergyökök lánczáródási sebességi együtthatója.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok

Az Intézet munkatársai által 2004-ben megjelentetett publikációk 29 százalékában más kutatóhelyek munkatársai, közülük 38 százalékban külföldiek társszerzők.

A katalízis és felületkémia terén fő együttműködő (hazai) partnerek a SzTE Kolloidkémiai, Szerves Kémiai, Alkalmazott és Környezatkémiai Tanszékei, továbbá az ELTE Magkémiai Tanszéke, valamint a KFKI, MFA és a KKKI több tudományos osztálya.

A Katalizátor és Felületkémiai Osztály munkatársai két COST programban vettek részt, (egyikben a projekt vezetőjeként) az Akadémiák közötti együttműködések keretében a CNR-MTA, Royal Swedish Academy-MTA és a CSIC-MTA együttműködésben dolgoztak.

A Katalízis és Nyomjelzéstechnikai osztály legfontosabb nemzetközi együttműködő partnerei a LACCO, CNRS (Poitiers) és a berlini Fritz Haber intézet. Mindkét részről rendszeresek a mérések végzését célzó cserelátogatások.

A nukleáris kémiai kutatások terén három egyetemi tanszékkal és három akadémiai kutatóintézettel, valamint a Magyar Nemzeti Múzeummal folyik együttműködés. Nemzetközi együttműködés 16 külföldi intézettel folyik. A partnerek között az USA-beli NIST, a Lawrence Berkeley és a Lawrence Livermore National laboratóriumok, a Dubnai JINR, a Forschungszenter Jülich, a Joint Research Center IRMM és további vezető intézetek szerepelnek. Az együttműködés a PGAA módszer közös alkalmazására, a módszer fejlesztésére irányul, mint például egyes irreguláris nuklidokat tartalmazó elemek hatáskeresztmetszet változásának kimérése hideg és termikus neutronnyalábokon.

A nukleáris ellenőrzési és biztonsági módszerek alkalmazása és fejlesztése terén 6 hazai és 10 külföldi intézménnyel folyik együttműködés. Kiemelkedő az együttműködés a PART-el, és a KFKI AEKI-vel a dozimetria terén, valamint a Nemzetközi Atomenergia Ügynökséggel (NAÜ), továbbá az (EU) Institute for Transuranium Elements-el (Karlsruhe) a PuBe források és a csempézett nukleáris anyagok azonosítása terén.

A sugárhatáskémiai kutatások terén négy hazai egyetemi tanszékkal, olasz és török intézményekkel folytattak együttműködést részben a szennyvízkezelés, illetve a funkcionális polimeranyagok előállítása terén. Két NAÜ projekt keretén belül pedig nemzetközi kutatócsoportban vettek részt, proteinek elválasztására alkalmazható funkcionális gélek és pórusos polimerek sugárzásos előállítására, valamint a szennyvíztisztítás területén.

Az IKI 7 munkatársa végzett 2003-ban felsőoktatási tevékenységet, elsősorban a Budapesti Műszaki és Közgazdaságtudományi, valamint a Veszprémi Egyetemen. Külön ki kell emelni a radiokémiai oktatás terén a BMGE és az ELTE hallgatói számára tartott laboratóriumi gyakorlatokat.

Az intézeti kutatók kiterjedt nemzetközi kapcsolatait mutatja többek között 9 intézeti munkatárs szerkesztőbizottsági tagsága nemzetközi folyóiratokban, továbbá az intézet egy-

egy munkatársának területi szerkesztői megbízása a Journal of Applied Catalysis, ill. szakterületi megbízása a Radiation Physics and Chemistry c. nemzetközi folyóiratokban.

IV. Hazai és nemzetközi pályázatok

Az IKI kutatói 2003-ban 11 OTKA pályázat keretében elfogadott témán dolgoztak. Ezen kívül külön említést érdemel az 5 KFHA pályázat. 2003-ban 2 OTKA pályázatot és 5 Akadémia-közi pályázatot nyertek el.

Mind a hazai, mind a nemzetközi pályázatok között első helyen kell említeni a PGAA témakörben elnyert pályázatokat, az urántartalmú minták analízise PGAA módszerrel c. munkát, amely a nukleáris ellenőrzés egyik perspektivikus módszere lehet. A módszer fejlesztésére elnyert pályázatokat a NAÜ és a NATO támogatja.

Ugyancsak a NAÜ támogatja „A szennyvizek kezelése nagyenergiájú sugárzással” c. kutatást.

Az OAH további hét téma keretébe tartozó fejlesztési és egyéb szakmai feladatra vonatkozó témát támogat, többek között a nukleáris anyagok összetételének meghatározása, a radioaktív és nukleáris anyagok nyilvántartási módszereinek fejlesztése terén.

V. Az év folyamán megjelent jelentősebb publikációk

1. Guzzi L, Horváth A, Beck A, Sárkány A, Controlling metal particle size in preparation of Pd/SiO₂ catalysts. Studies on Surface Science and Catalysis, 145: 351 (2003).
2. Guzzi L, Petó G, Beck A, Frey K, Geszti O, Molnár Gy, et al(1), Gold nanoparticles deposited on SiO₂/Si(100): Correlation between size, electron structure and activity in CO oxidation. Journal of the American Chemical Society, 125: 4332 (2003).
3. Schay Z, Guzzi L, Pál-Borbély G, Ramaswamy AV, Decomposition of NO and N₂O on Cu-AITS-1: oscillatory behaviour at full N₂O conversion. Catalysis Today, 84: 165 (2003).
4. Petó G, Geszti O, Molnár G, Daróczy Cs, Karacs A, Guzzi L, Beck A, Frey K, Valence band and catalytic activity of Au nanoparticles in Fe₂O₃/SiO₂/Si(100). Material Science and Engineering, C 23: 733 (2003).
5. Schuler RH, Wojnárovits L, Radical yields in the radiolysis of branched hydrocarbons: tertiary C-H bond rupture in 2,3-dimethylbutane, 2,4-dimethylpentane and 3-ethylpentane Journal of Physical Chemistry A, 107: 9230 (2003)
6. Wojnárovits L, Takács E, Dajka K, Emmi SS, Russo M, D'Angelantonio M, Tetrahedron, 59: 8353 (2003).
7. Wojnárovits L, Radiation Chemistry. Handbook of Nuclear Chemistry Vol 3., (Eds. Vértes A, Nagy S, Klencsár Z), Kluwer, 2003, pp 1-55
8. Lakosi L, Tam NC, Zsigrai J, Sáfár J, Revealing smuggled nuclear material covered by a legitimate radioisotope shipment using CdTe-based gamma-ray spectrometry Applied Radiation and Isotopes, 58: 263 (2003)
9. Zsigrai J, Ellipsoidal shapes in general relativity: General definitions and an application. Classical and Quantum Gravity, 20: 2855 (2003).

A kutatóintézet 2003. évi tevékenységének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA Kémiai Kutatóközpont, Izotóp- és Felületkémiai Intézet

Átlagléttség ¹ : 86	Ebből kutató ² :	43
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		15
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma:		80
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikációk száma ³ :		80
<i>Ebből</i> idegen nyelvű külföldi folyóiratban: 72	idegen nyelvű hazai folyóiratban:	3
nemzetközi együttműködés keretében: 34	SCI által regisztrált folyóiratban:	59
összesített impakt faktor: 38.106	összes hivatkozások száma ⁴	638
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül: 638		
Megjelent könyv: 2	könyvfejezet: 8	jegyzet: -
<i>ebből</i> magyar nyelven könyv:	könyvfejezet:	jegyzet:
Megvédett PhD értekezés: 1	Megvédett MTA doktori értekezés ⁵ :	-
Bejelentett találmányok száma: -	Megadott szabadalmak száma:	-
<i>ebből</i> külföldön:	<i>ebből</i> külföldön:	
Értékesített szabadalmak száma:		
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma: 50	poszterek száma ⁶ :	23
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ⁷ :		5
Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 10	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	9
Az év folyamán a teljes költségvetési támogatás összege:		358,5 MFt
Beruházási támogatás: 12,7 MFt	Fiatal kutatói álláshelyek száma ⁸ :2	
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:	tematikus 9, utazási 2	
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	13,3 MFt
Az év folyamán művelt OM KFHÁ pályázat témáinak száma:		5
NKFP:	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	- MFt
Egyéb:	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	2,75 MFt
Külföldi vagy nemzetközi forrásból művelt témák száma ⁹ :		1
EU forrásból:	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	2,5 MFt
Egyéb:	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	- MFt
Egyéb pályázatok keretében művelt témák száma ¹⁰ :		17
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	48,4 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány ¹¹ :		-MFt

**Anyag- és Környezetkémiai
Kutatólaboratórium**

I. A kutatólaboratórium fő feladatai a beszámolási évben

A kutatólaboratóriumban 2003-ban is az anyagtudományi és környezeti kémiai kutatások jelentették a fő kutatási irányokat.

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

Környezeti kémiai kutatásaik olyan fizikai-kémiai és kémiai összefüggések felderítésére irányultak, amelyek elősegítik a természeti környezetet az eddigieknél kisebb mértékben terhelő új termékek és eljárások megalapozását, ideértve egyes hulladékok környezeti hatásainak mérséklését is.

II. Az év folyamán elért kiemelkedő kutatási eredmények

Anyagkémiai kutatások

Aromás poliimid nagy dózisú kobalt- és vas-ionos bombázását követően karbonizálódott polimer-mátrixból és fémrészecskékből álló nanokompozit-rétegek képződését észlelték. XPS vizsgálataik szerint a vas oxidos állapotban, míg a kobalt fémes és oxidos állapotban is jelen van a felületi rétegben. A kapott eredményekből következően a polimerek átmenetifém ionokkal történő bombázása alkalmas módszer lehet különleges tulajdonságú nanokompozitok előállítására.

Grafít-elektrodák között, egyenáramú parázskisüléssel keltett nitrogén plazma optikai emissziós spektrumában, a semleges és ionizált nitrogén molekulák mellett, 9000-13500K forgási hőmérsékletű CN gyökök jelenlétét észlelték. Ezek a gyökök fontos szerepet játszanak szén-nitrid rétegek kialakulásakor.

A "Hosszú élettartamú humán-ízületi protézisek kifejlesztése" című NKFP projekt keretében ultranagy molekulatömegű polietilén-minták plazma-immersziós ionimplantációs kezelése, valamint módosított felületi rétegek összetételének, kémiai szerkezetének és nanomechanikai tulajdonságainak vizsgálata útján meghatározták a kezelési paraméterek célszerű tartományait.

Vizsgálták fullerének grafitporból történő szintézisét rádiófrekvenciás, termikus plazmában. A plazma optikai spektroszkópiai analízisével meghatározták a maximális fulleren képződést eredményező működési feltételeket. Modellt dolgoztak ki a különböző tömegszámú fullerének képződésének leírására. Megállapították, hogy RF plazmareaktorban a fullerének a korábbinál nagyobb hatékonysággal állíthatók elő, és preferáltan képződnek C₆₀-nál nagyobb szénatom-számú fullerének.

A nagysűrűségű polietilén ipari előállításához kapcsolódóan részletesen vizsgálták a reakciókörülmények, az előállított polimer por jellemzői, a granulátum stabilitása és a végtermék tulajdonságai közötti kapcsolatokat. A keletkezett polimer láncszerkezetének meghatározására DRIFT spektroszkópiás módszert dolgoztak ki, amit NMR spektroszkópiával validáltak.

A polietilén termékekben alkalmazott stabilizátorok egyik jellemző típusa, a foszfortartalmú antioxidánsok hatásmechanizmusának vizsgálata kapcsán megállapították, hogy az irodalomban korábban elfogadott, általános séma erre a rendszerre nem érvényes. Az adott

stabilizátorok hatékonyságát és hatásmechanizmusát ugyanis nagymértékben befolyásolja szerkezetük, elsősorban a foszforhoz kapcsolódó szerves ligandumok jellege.

A nagysűrűségű polietilénből legnagyobb mennyiségben csövet gyártanak. A vízzel érintkező csövek stabilizátorainak környezeti viselkedése egyelőre nem ismert, bár ennek számottevő egészségügyi és környezetvédelmi hatásai lehetnek. A folyamatok felderítése érdekében meghatározták néhány, gyakran alkalmazott fenolos antioxidáns hidrolitikus stabilitását. Azt tapasztalták, hogy az nagymértékben függ a stabilizátor szerkezetétől. A leginkább alkalmazott antioxidáns hidrolitikus stabilitása kicsi; ennek gyakorlati következményei egyelőre beláthatatlanok.

A heterogén polimer rendszerekkel kapcsolatos kutatásaik hagyományosan kiterjednek egyes polimer keverékekre, többkomponensű polimer rendszerekre és a szálerősítésű társított anyagi rendszerekre. 2003-ban a PVC, a klórozott PVC és a klórozott polietilén közötti kölcsönhatásokat, valamint ezen anyagok kölcsönös elegyíthetőségét tanulmányozták, különös tekintettel e tényezők hatására a keverékek szerkezetére és tulajdonságaira.

Összefüggést állapítottak meg a szénszálak elektrokémiai felületkezelése során lejátszódó kémiai reakciók, illetve a kialakuló reaktív csoportok száma, és a szálerősítésű társított anyagokban fellépő határfelületi adhézió között. A határfelületi reakciókat, illetve az adhéziót epoxigyanta és polikarbonát mátrixokban vizsgálták. Megállapították, hogy epoxigyanta mátrixban az adhézió mértékét a szál felületén található reaktív csoportok száma, míg a hőre lágyuló polikarbonát esetében a láncvégén található, korlátozott számú funkciócsoport határozza meg. A határfelületi kölcsönhatás erősségét kapcsolóanyagokkal módosították, és összefüggést állapítottak meg a lejátszódó kémiai reakciók, a kialakuló határréteg szerkezetére és a határfelületi nyírószilárdság között.

Vizsgálták a szerkezet és a tulajdonságok kapcsolatát töltőanyagot tartalmazó, társított anyagokban. Megállapították, hogy a töltőanyagok aggregációja azok jellemzőitől és mennyiségétől, valamint a feldolgozás körülményeitől függ. Az aggregáció következtében a kompozit tulajdonságai romlanak. Feszültséganalízissel meghatározták a töltőanyagot tartalmazó társított anyagokban kialakuló határfázis hatását a kompozit tulajdonságaira és deformációjának mechanizmusára. Delaminációval előállított, rétegszilikát nanokompozitok esetében kimutatták, hogy az adott rendszerek tulajdonságait a rétegszilikát felületkezelése és a delamináció mértéke határozza meg.

A biológiailag lebontható műanyagok előállítására és természetes alapanyagok felhasználására irányuló kutatásaikban vizsgálták a cellulóz-acetát módosítását különböző alifás poliészterekkel, és meghatározták a módosítás körülményeinek hatását a termék szerkezetére és tulajdonságaira. Kimutatták, hogy a monomer és az ojtott kaprolakton eltérően befolyásolja a cellulóz-acetát tulajdonságait: az előbbi külső, az utóbbi belső lágyítást eredményez. Tanulmányozták a cellulóz savas és enzimátikus bontását abból a célból, hogy a bomlástermékeket alifás poliészterrel kombinálva, biológiailag lebontható műanyagot állítsanak elő. Megállapították, hogy a savas lebontás egyenletesebb szerkezetű bomlástermékekhez vezet, mint az enzimátikus bontás. Természetes erősítőanyagok felhasználásával, módosított polipropilén társított anyagokat állítottak elő; ezekből különböző használati tárgyak és akusztikus eszközök készíthetők.

A Drezdai Polimer Intézet munkatársaival együttműködve szisztematikus vizsgálatokat végeztek az általuk korábban kidolgozott, kváziélő gyökös polimerizációs eljárással előállított polisztirol makromonomeren alapulva annak megállapítására, hogy az ezekből szintetizált poli-(propilén-g-sztirol) ojtott kopolimerek kompatibilizáló hatása miként függ azok szerkezetétől. Az így nyert modell kopolimerekkel kapott polipropilén-polisztirol blendék pásztázó elektronmikroszkópos vizsgálata az általánosan elfogadottnak vélt tendenciával

ellentétes függést mutatott az ojtott blokk-kopolimer kompatibilizáló hatásának az elágazó lánc hosszától való függéséről.

Az új típusú, hidrofil és hidrofób polimer láncokból álló amfil, nanofázisú polimer kotérhálók szerkezetéről spin diffúziós szilárdtest NMR és kisszögű röntgenszórás mérésekkel nyertek újszerű információkat. A kapott eredmények egyértelműen bizonyítják a nano-méretű fázissztválást. Meglepő módon, igen éles, gyakorlatilag átmenet nélküli fázishatár található a nem elegyedő polimer láncok fázisai között. Ezek a különleges szerkezetű polimer kotérhálók számos új nanoszerkezetű, hibrid-kompozit kiindulási anyagául szolgálhatnak.

Elektrokémiai kutatásaik során megállapították, hogy a Pt(111) egykristályon kialakuló kettősréteg-kapacitás elektródpotenciál görbében megjelenő csúcs a felületi víz-dipólréteg átfordulásának tulajdonítható. Értelmezték a Pt(111) elektródon mérhető impedancia spektrumokat, és azonosították a megfelelő adszorpció és diffúziós folyamatokat.

A Fe^{2+}/Fe^{3+} elektródreakciót az előző évek során kidolgozott, kombinált zaj- és impedancia-méréseken alapuló módszerrel vizsgálva megállapították, hogy a mért átlépési tényező 1%-on belül megegyezik az elméletileg várható 0,5 értékkel.

Mérési módszert dolgoztak ki vizes hígítású festékanyagokból kialakított bevonatok védőképességének gyors minősítésére. Kimutatták, hogy a perklorátionok, a korábbi általános felfogással ellentétben, savas közegben számottevő mértékben redukálhatók fém vassal és kobalttal. E kutatási eredmények alapján megtervezhető egyes perklorát-szennyezések felszámolása, és káros környezeti hatások szüntethetők meg.

Megállapították, hogy a H_2 gáz és a H^+ ionok között kialakuló egyensúly, a fémkorrózió körülményei között is, katalitikus folyamat. Bizonyították, hogy a cink vasra vonatkoztatott védőhatása magasabb hőmérsékleten azért szűnik meg, mert a cink passzivitását okozó ZnO jól katalizálja az O_2 molekula ionizálódását, aminek eredményeként növekszik a katódos folyamat sebessége.

Ionos permanganát-komplexek szintézise és vizsgálata során számos érdekes és szokatlan reakciót észleltek. Az ammónia ligandumot tartalmazó, cink-, illetve réz-permanganát komplexek termikus bomlásakor intramolekuláris redoxireakció játszódik le. Oxigén felszabadulása nélkül víz és ammónia fejlődik, és $MeMn_2O_4$ típusú vegyületek alakulnak ki. Mivel a fém-mangán-oxidok szabad koordinációs helyekkel rendelkező katalizátorok, az ammónia részleges oxidációja és kis mennyiségű NO, illetve NO_2 képződése is kimutatható. Redoxi-reakciókat tapasztaltak kadmiumsó és hexaamminnikkel(II)-permanganát termikus bomlása során is, ugyanakkor a diammin-ezüst(II)-só redoxireakciójában fémezüst képződött.

Természetes eredetű poligalakturonát- (PG) és malát-fémkomplexeket előállítottak elő. Megállapították, hogy vas(II)-poligalakturonát csak nitrogén atmoszférában, alacsony hőmérsékletű liofilizáció során képződik. Levegőn, 50-60°C-on végzett szárításkor $Fe(II):Fe(III):PG = 1:1:3$ összetételű komplex alakul ki. A kapott vas(II,III)-vegyületben a vas(II) olyan stabilis szerkezeti helyzetben van, hogy még hidrogén-peroxiddal sem oxidálható vas(III)-vegyületté. Megállapították, hogy kemilumineszcenciás rendszerben a fém-poligalakturonátok, a fémtől és a komplex minőségétől függetlenül, nagyobb koncentrációkban prooxidáns tulajdonságúak. A fiziológiás tartományba eső, alacsonyabb koncentrációknál azonban a Mg-, a Mn- és a Zn-poligalakturonátok a kísérleti rendszer fényintenzitását nem befolyásolják.

A Semmelweis Egyetem által koordinált, „Komplex prevenciók kutatások a hazai egészségi állapotok javítására; természetes eredetű antioxidánsok *in vitro* és *in vivo* vizsgálata” című NKFP projekthez kapcsolódóan számos gyógynövény szerves hatóanyag- és fémtartalmát

határozták meg. Ezek közül különösen fontos a külföldről származó gyógynövénydrogok vizsgálata, és összevetésük a hazai drogokkal. Megállapították, hogy a külföldről származó gyógynövények egy részének hatóanyag- és a fémtartalma jelentősen eltér a hazai gyógynövényekétől, illetve a szakirodalomban leírt átlagos koncentrációktól. Egyes Kínából származó gyógynövények esetében jelentős mennyiségű koffeint mutattak ki és több elem (Al, As, Ba, Cr, Cu, Fe, Mn, Ni és Ti) koncentrációja is jelentősen meghaladta a hazai átlagértékeket.

Környezetkémiai kutatások

A poliéter és poliészter típusú, természetes és szintetikus makromolekulák összetételének meghatározására az utóbbi években elterjedt módszert, a GC/MS-hez közvetlenül kapcsolt termikus hidrolízist és metilezést, sikeresen adaptálták és alkalmazták léggörből származó aeroszolak különböző szemcseméretű frakcióinál a szerves széntartalom meghatározására. Ezen, 10-100µg tömegű, csak részben oldható minták, többé-kevésbé makromolekuláris szerves anyag más metodikákkal nem elemezhető.

Új nagyteljesítményű folyadékkromatográfias és HPLC/MS módszert dolgoztak ki növényolajok gyors elemzésére és eredetének vizsgálatára, valamint környezetszennyező anyagok növényi fehérjékhez történő kötődésének tanulmányozására. Meghatározták és leírták, hogy a vizsgált szennyező molekulák (pesticid bomlástermékek, oldószerek, felületaktív anyagok) lipofilitása és sztereokémiai viszonyai hogyan befolyásolják a kialakuló kölcsönhatás erősségét. Bizonyították a Trucker 3 modell alkalmazhatóságát nagy kromatográfias adatmátrixok értékelésére.

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

Bróm-tartalmú égésgátlókat és antimon-trioxid szinergista adalékot tartalmazó ütésálló polisztirol hőbomlását vizsgálták termikus módszerekkel. Megállapították, hogy az égésgátlók nem befolyásolják lényegesen a polimer elsődleges bomlási reakcióit. Antimon-trioxid jelenlétében ugyanakkor kétféle bomlási mechanizmus alakul ki.

Zeolit molekulaszűrők, valamint nagyfelületű szenek hatását tanulmányozták halogéntartalmú égésgátlók, és égésgátlókat tartalmazó fa-, illetve műanyag hulladékok hőbomlási folyamataira. Megállapították, hogy a nagy pórusméretű alkáli-zeolitok a nagyméretű halogénezett aromás szénhidrogéneket eltávolítják a pirolízis-olajból, a klór- és bróm-fenolokat azonban nem. Egyes elektronikai hulladékok aktív szenek jelenlétében történő hőbomlásakor a termékeloszlás jelentősen módosulását figyelték meg az eredeti hulladékokhoz képest; új reakcióutakat tételeztek fel, és azokat kísérletileg is igazolták.

Biztató eredményeket értek el egy propilén-glikol alapú hűtőközegben alkalmazható, korrózióvédő hatású adalék kifejlesztésében. Eddigi eredményeik alapján reális esély van propilén-glikol alapú, környezetbarát, a gépjárművek mellett ipari hűtőrendszerekben is használható, alacsony dermedéspontú hűtőközeg kifejlesztésére. Ezzel a hűtőközeggel helyettesíteni lehet az eddig széles körben alkalmazott, környezeti szempontból veszélyesnek minősülő, etilén-glikol alapú hűtőközegeket.

OM KFHÁ projekt keretében vizsgálták a környezeti kárelhárítás lehetőségeit Garé és Hidas térségében, ahol a korábban lerakott és nem megfelelően tárolt, 16 ezer tonna vegyes poliklór-benzol súlyos talaj- és talajvízszennyezést okozott. Műszaki és gazdasági szempontból optimális félüzemi eljárásokat fejlesztettek ki a szennyezett talaj és a talajvíz tisztítására. Talajtisztításra az ellenáramú reaktív termodeszorpció, és az eluátum ezt követő katalitikus oxidációja bizonyult a leghatékonyabb megoldásnak. A szennyezett víz tisztítására többféle

fél-üzemi eljárást (sztrippelés a kihajtott klór-benzolok katalitikus oxidációjával, UV-oxidáció, illetve szoláris fotokatalitikus oxidáció) fejlesztettek ki; ezek mindegyikével elérhető a kívánt tisztítási hatások. Gazdasági megfontolások alapján ugyanakkor e három eljárás kombinációja látszik a legjobb ipari megoldásnak.

Hazai energiaültetvényről származó fiatal fahajtások, valamint nemzetközi együttműködésből származó faminták, mint energiahordozó biomasszák esetében tanulmányozták, hogy a kéreg-, az ásványi anyag-, valamint az extrahálható anyag tartalom miként befolyásolja a termikus sajátságokat. A mérési adatokat kemometriai, valamint reakciókinetikai módszerekkel értékelték. A vizsgálatok során olyan, a szakirodalomban eddig nem ismert összefüggéseket tártak fel, amelyek elősegítik a különböző biomasszák között észlelhető hasonlóságok és különbségek értelmezését.

A napenergia termikus hasznosítására irányuló kutató-fejlesztő munka során, a Dunaújvárosi Főiskolával együttműködésben, kifejlesztették, bevizsgálták, és hőtani, valamint gazdasági szempontból jellemezték a napfényálló műanyag kollektorból és atmoszférikus nyomású melegváltartályból álló napenergiás vízmelegítő prototípusát. A berendezés, a jelenlegi szoláris vízmelegítő rendszerekhez képest, jóval kisebb beruházási költséggel alakítható ki, és a 20 évre számított élelciklus költségeket tekintve 30-40%-os megtakarítást ígér.

A BME Vegyipari Műveletek Tanszékével közös kutatásaik során a szakaszos, extraktív desztilláció alkalmazhatóságát vizsgálták minimális, illetve maximális forráspontú azeotrópokra, közbenső forráspontú oldószerek alkalmazásával. Modellszámításokkal feltérképezték a várható hatékonyságot és gazdaságosságot, majd elképzeléseiket kísérleti úton, nagylaboratóriumi berendezésben igazolták.

NKFP projekt keretében vizsgálták a timföldgyártás során keletkező veszélyes hulladék, a vörösiszap fémtartalmának kinyerési lehetőségeit, különös tekintettel a plazmatechnológiára. Ívplazmában végzett olvadákredukcióval a vörösiszap vastartalmának mintegy 75%-át sikerült kinyerniük. A vasolvadék kevés szenet, szilíciumot, magnéziumot, titánt és alumíniumot tartalmazott. A vörösiszapban lévő nióbbium gyakorlatilag teljes mértékben a fémfázisba került. Vizsgálták a vörösiszap fémkomponenseinek klórozásos illósítással történő elválasztását is. Megállapították, hogy foszgénnel, 850°C-on történő illósításkor a vas és titán gyakorlatilag teljesen, míg az Al és a Na, 68%, illetve 82%-ban nyerhető ki.

Beszámoló néhány kiemelt kutatási eredményről

Elektroszorpciós és elektrokatalitikus kutatások

A kutatólaboratóriumban folyó elektroszorpciós és elektrokatalitikus kutatások alapvető célja az elektrokémiai rendszerek határfelületein lejátszódó folyamatok pontos megismerése, különös tekintettel a mindinkább előtérbe kerülő nanotechnológiai eljárásokra. E kutatások tipikusan interdiszciplináris jellegűek: a klasszikus elektrokémiai, kolloidkémiai, korróziós és környezetkémiai kutatások határterületein mozognak. Az elmúlt időszakban elsősorban a fémoldat határfelületeken lejátszódó elemi adszorpciós folyamatokat tanulmányozták, elektrokémiai impedancia spektroszkópiás, voltametriás, elektrokémiai zajméréses, valamint radioaktív nyomjelzéses módszerekkel. Fontosabb eredményeik a következőkben foglalhatók össze:

- A fénoxid-elektrolit határfelületen végbemenő anion-adszorpció mechanizmusának vizsgálata során megállapították, hogy az adszorpció feltétele az oxidfelület protonálódása.

- A fémionok más fémek felületén történő adszorpciója alapvető reakciólépés minden, a határfelületeken összekapcsolódó, két- és többfémes rendszer kialakulásában. Bizonyították, hogy a ródiom-ionok platinán jól adszorbeálódnak, miközben az ionizációs potenciál határozottan eltolódik.
- Tisztázták, hogy a Pt(111) elektródon, olyan vizes oldatokban, ahol az elektród felületén csak hidrogén-, illetve hidroxid-ionok adszorbeálódhatnak, a voltametriás és impedancia mérésekben miként tükröződik a felületre történő hidrogén-, illetve hidroxid-ion adszorpció. A folyamatok sebességére küszöbértékeket adtak meg, és következtetéseket vontak le az adszorpció mechanizmusára. Az adott rendszerekben a kettősréteg kapacitás - elektródpotenciál görbén megjelenő csúcsot azzal magyarázzák, hogy a csúcshoz megfelelő potenciálon a határfelületi vízréteg, mint dipólus-sor, átfordul.
- Kimutatták, hogy a perklorátionok, a korábbi általános felfogással ellentétben, savas közegben, számottevő mértékben redukálhatók fém vassal és kobalttal. Ezek az eredmények segítséget nyújthatnak egyes perklorát-szennyezések felszámolásához.

A témában megjelent fontosabb közlemények

1. Horányi Gy: Electrocatalysis - Heterogeneous in encyclopedia of catalysis (Horváth IT ed). Vol. 3. Wiley-Interscience, John Wiley & Sons Inc, Hoboken NJ, 2003, pp 115-155
2. Bakos I, Szabó S: Electrochemical adsorption of rhodium on platinum. Journal of Electroanalytical Chemistry, 547: 103-107 (2003)
3. Pajkossy T: Voltammetry and impedance of Pt(111) electrodes in aqueous KClO₄ solutions, Z. Phys. Chem., 217: 351-363 (2003)
4. Pajkossy T, Kolb DM: On the origin of the double layer capacitance maximum of Pt(111) single crystal electrodes, Electrochem. Comm., 5 (4): 283-285 (2003)
5. Láng GG, Horányi Gy: Some interesting aspects of the catalytic and electrocatalytic reduction of perchlorate ions. Journal of Electroanalytical Chemistry, 552: 197-211 (2003)

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok

Az AKKL kutatói a hazai kutatóhelyek közül több akadémiai kutatóintézetrel (KK-KI, KK-IKI, ATKI, FKK-GKL) és egyetemi tanszékekkel (ELTE, BME, VE, ME, SZE, DE) dolgoztak együtt különféle kutatási témákban. Az AKKL a BME-vel közösen működteti a hazai felületmérnök-képzés bázislaboratóriumát, és a Veszprémi Egyetem kihelyezett tanszékeként is részt vesz a hazai felsőfokú oktatásban. Az Alkalmazott Polimer Fizikai Kémiai Osztály gyakorlatilag egy szakmai egységet alkot a Budapesti Műszaki Egyetem Műanyag- és Gumiipari Tanszékével. A kutatólaboratórium munkatársai ezen kívül a következő egyetemeken tartanak graduális és posztgraduális kurzusokat: CEU, ELTE, SOTE, ME, SZE, DE, Dunaújvárosi Főiskola.

Nitrid-rétegek felületkémiailag jellemzésében a Leobeni Bányászati Egyetemen, plazmakémiai folyamatok termodinamikai számításaiban az OTA Szervetlen Kémiai Intézetével, platina elektródok töltésmentes potenciáljának meghatározásában az Ulmi Egyetemen, napenergiás desztilláló berendezések fejlesztésében a Cagliari Egyetemen működnek együtt.

Igen eredményes az AKKL együttműködése a Drezdai Polimer Intézet és a mainzi Polimer Kutatási Max Planck Intézet munkatársaival, valamint a Freiburgi Egyetem Makromolekuláris Kémiai Tanszékével, az ottani Anyagtudományi Kutatási Centrummal és a Nottinghami Egyetemen. Kétoldalú együttműködés keretében a két indiai kutatóhellyel, a Jodhpur Egyetemen, valamint az Indian Institute of Technology-val végeznek közös kutatásokat.

IV. Hazai és nemzetközi pályázatok

Hazai pályázatok

A kutatólaboratórium kutatói 2003-ban a következő OTKA pályázatok művelésében vettek részt:

- Nemegyensúlyi, Langmuir-Blodgett típusú szupramolekuláris rendszerek stabilitásvizsgálata XPS technikával (T25789)
- Közepes amplitúdójú perturbációra kiterjesztett EIS módszer kidolgozása és alkalmazása korróziós folyamatok kinetikájának vizsgálatára (T26727)
- Kvázielő gyökös polimerizációs rendszerek (T29711)
- Határfelületi kölcsönhatások vizsgálata heterogén polimer rendszerekben (T29719)
- Amfifil kotérhálók biokompatibilitásának kutatása (F29728)
- Relaxációs folyamatok tanulmányozása fém/elektrolit határfelületeken (T30150)
- Szilárd katalizátorok előállítása szerkezet- és felületmódosítással, és alkalmazásuk szerves vegyületek átalakulásaiban (T30156)
- C_3N_4 és CN_x fázisokat tartalmazó rétegszerkezetek kutatása (T30424)
- Szerkezet-tulajdonság összefüggés heterogén polimer rendszerekben (T30579)
- Módosított felületi rétegek mechanikai tulajdonságainak vizsgálata (T30833)
- Elektrokatalízis és elektroszorpció klasszikus módszereinek helye és szerepe a modern kutatásban (T31703)
- A rénium, iridium és ródium idegen fémfelületeken végbemenő adszorpciójának és a rénium korróziógyorsító hatásának vizsgálata (T31846)
- Új típusú csillag polimerek szintézise és oldataik sajátságainak tanulmányozása (T33107)
- Hőbomlási folyamatok kölcsönhatása polimer keverékekben (T33111)
- Béta-polipropilén és kétalkotós rendszerei (T34230)
- Polimerek degradációjának mértékét és mechanizmusát meghatározó tényezők, valamint a stabilitás egyes kérdéseinek vizsgálata (T37687)
- A réz-alumínium fém-pár korróziós sajátosságai (T37693)
- Adalékanyagok hatása a hulladékhasznosítás szempontjából fontos hőbomlási folyamatokban (T37704)
- Biomassza tüzelőanyagok optimális hasznosítását elősegítő alapkutatás termikus analízis segítségével (T37705)
- Szerves aeroszol képződése felhőfolyamatokban (T43578)
- Új típusú amfifil kotérhálók duzzadási dinamikájának tanulmányozása (F31901)
- Új MINP modellek kidolgozása anyagcsere hálózatokra (F35085, közreműködőként)

A kutatólaboratórium a következő NKFP programokban működött közre 2003-ban:

- Hosszú élettartamú humán-izületi protézisek kifejlesztése (NKFP 1/013/2001. Koordinátor: MTA KK-AKKL)
- Komplex prevenciók kutatásai a hazai egészségi állapotok javítására; természetes eredetű antioxidánsok *in vitro* és *in vivo* vizsgálata (NKFP 1/016/2001. Koordinátor: Semmelweis Egyetem)
- Validált célmolekulákon alapuló gyógyszer és diagnosztikum tervezés: szabadgyök-fogó tulajdonságú, természetes eredetű szerves fémkomplexek (NKFP 1/047/2001. Koordinátor: MTA KK-KI)

- Környezetbarát, piacképes termékfejlesztés és környezetvédelmi kutatások az alumíniumiparban (NKFP 3/035/2001. Koordinátor: Veszprémi Egyetem)
- Természetes nyersanyagbázison alapuló és/vagy biológiailag részlegesen, illetve teljesen lebomló, társított anyagból készült termékek előállítása és alkalmazása (NKFP 3A/0036/2002. Koordinátor: MTA KK-KI)

A kutatóhely által művelt egyéb hazai pályázatok a beszámolási évben a következők voltak:

- Poliamid-6 nanokompozit (OM KFHÁ 00151/2001)
- Nem nutritív táplálkozási faktorok jelentősége a máj és bélbetegségek gyógyításában: Természetes eredetű antioxidánsok in vitro és in vivo vizsgálata (Népjóléti Minisztérium, ETT 250/2000)
- Hibrid elválasztó műveletek összehasonlítására alkalmas mérőrendszer kialakítása (OM KFHÁ 02335/2000)
- Klórozott szénhidrogénnel szennyezett talaj és talajvíz kárelhárításának vizsgálata és fejlesztése (OM KFHÁ 00919/2002)
- A talaj termőképességét befolyásoló biológiai illetve mikrobiológiai folyamatokat gátló környezetszennyező anyagok szinergista, illetve antagonista hatásának felmérése (Környezetvédelmi Minisztérium, KAC KO441232001)
- Felületaktív anyagok adszorpciója és deszorpciója magyarországi talajtípusokban, a folyamatot befolyásoló körülmények meghatározása (Környezetvédelmi Minisztérium, KAC KO441242001)
- Biodízel használt sütőolajból (KMFP 00042/2001)
- Új hordozóanyag helikopterrel végzett, biológiai szúnyogirtáshoz (OM KFHÁ 00708/2003)
- OM műszerpályázat (OM MU-55/02)

Nemzetközi pályázatok

A kutatólaboratórium kutatói az alábbi EU pályázatok kidolgozásában vettek részt 2003-ban:

- Új, felületmódosított, lángálló polimer rendszerek kifejlesztése a tömegközlekedés és más területek biztonságának javítása céljából (G5RD-CT-1999-00120)
- Új, felületmódosított anyagpár-rendszerek protézisekhez (EU CRAFT G5ST-CT-2002-50247 NSE PRO)
- Újszerű, ívplazmás eljárás veszélyes hulladékok lebontására, és nagy értékű építőanyagok egyidejű előállítására (GRD1-2000-25035)
- Elektromos és elektronikus berendezések hulladékainak kezelése és újrahasznosítása. Integrált termikus-kémiai eljárás halogéntartalmú anyagok ártalmatlanítására (GIRD-CT-2002-03014)

Egyéb nemzetközi pályázat:

- DuPont Research Award

V. Az év folyamán megjelent jelentősebb publikációk

1. Blazsó M., Janitsek S, Gelencsér A, Artaxo P, Graham B, Andreae MO: Study of tropical organic aerosol by thermally assisted alkylolation-gas chromatography mass spectrometry. Journal of Analytical and Applied Pyrolysis, 68-69: 351-369 (2003)

2. Cserhádi T, Forgács E: Cyclodextrins in chromatography. RSC Chromatography Monographs (Smith RE ed). The Royal Society of Chemistry, Cambridge, UK, 2003, pp 1-157
3. Főglein KA, Babievszkaya IZ, Szépvolgyi J: Recent studies on the decomposition of n-hexane and toluene in RF thermal plasma. Plasma Chemistry and Plasma Processing, 23(2): 233-243 (2003)
4. Földes E, Szabó Z, Janecska Á, Nagy G, Pukánszky B: Quantitative analysis of functional groups in HDPE powder by DRIFT spectroscopy. Macromolecular Symposia, 202: 97-115 (2003)
5. Horányi Gy: Electrocatalysis - Heterogeneous in encyclopedia of catalysis (Horváth IT ed). Vol. 3. Wiley-Interscience, John Wiley & Sons Inc, Hoboken NJ, 2003, pp 115-155
6. Iván B, Fónagy T, Erdey-Grúz T, Holló-Szabó G, Szesztay M, Schulze U, Pionteck J: End-functional polystyrenes via quasiliving atom transfer radical polymerization and new polymer structures therefrom. ACS Symposium Series, 854: 331-341 (2003)
7. Lelkes Z, Rév E, Steger Cs, Varga V, Fonyó Zs, Horváth L: Batch extractive distillation with intermediate boiling entrainer. Proc. ESCAPE-XIII, Lappeenranta, 2003, pp 197-202
8. Popok VN, Khaibullin RI, Tóth A, Beshliu V, Hnatowicz V, Mackova A: Compositional alterations of polyimide under high fluence implantation by Co⁺ and Fe⁺ ions. Surface Science, 532-535: 1034-1039 (2003)
9. Sreedhar B, Bhaskar V, Sridhar Ch, Srinivas T, Kótai L, Szentmihályi K: Acylation of alcohols and amines with carboxylic acids: a first report catalyzed by iron(III)oxide-containing activated carbon. Journal of Molecular Catalysis A: Chemical, 191(1): 141-147 (2003)

A kutatólaboratórium 2003. évi tevékenységének főbb mutatói

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

Átlagléttség: 75	Ebből kutató: 46
35 év alatti, intézeti állományban levő kutatók száma: 21	
Az év folyamán megjelent összes (tudományos és ismeretterjesztő) publikációk száma: 110	
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma: 109	
<i>ebből</i> idegen nyelvű külföldi folyóiratban: 62	idegen nyelvű hazai folyóiratban: 4
nemzetközi együttműködés keretében: 22	SCI által regisztrált folyóiratban: 61
összesített impakt faktor: 81,785	összes hivatkozások száma: 667
összes hivatkozás száma, önidézetek nélkül: 477	
Megjelent könyv: 2	könyvfejezet: 17 jegyzet:
<i>Ebből</i> magyar nyelven könyv: 1	könyvfejezet: 7 jegyzet:
Megvédett PhD értekezés: 3	Megvédett MTA doktori értekezés: 0
Bejelentett találmányok száma: 2	megadott szabadalmak száma: 1
<i>ebből</i> külföldön: 1	<i>ebből</i> külföldön: 1
Értékesített szabadalmak száma: 0	
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma: 42	poszterek száma: 42
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma: 23	
Nemzetközi tudományos bizottsági tagság: 6	nemzetközi folyóirat szerk. tagság: 9
Az év folyamán a teljes költségvetési támogatás összege: 377,478 MFt	
beruházási támogatás: 0 MFt	fiatal kutatói álláshelyek száma: 7
Az év folyamán művelt OTKA témák száma: 21	
az időszakra vonatkozó szerződésállomány: 14,979 MFt	
Az év folyamán művelt OM KFHÁ pályázat témáinak száma:	
NKFP: 5	a tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: 32,393 MFt
egyéb: 5	a tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: 8,801 MFt
Külföldi vagy nemzetközi forrásból művelt témák száma:	
EU forrásból: 4	a tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: 9,849 MFt
Egyéb: 0	a tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: 0 MFt
Egyéb pályázatok keretében művelt témák száma: 8	
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: 5,140 MFt	
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány: 0,640 MFt	