

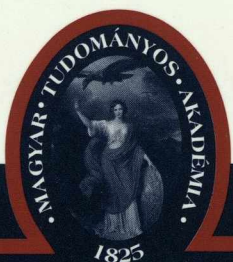
A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA KUTATÓINTÉZETEI

KÉMIAI KUTATÓKÖZPONT

ANYAG- ÉS KÖRNYEZETKÉMIA

IZOTÓP- ÉS FELÜLETKÉMIA

KÉMIA



MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
KÉMIAI KUTATÓKÖZPONT

IGAZGATÓSÁG

Főigazgató: Pálinkás Gábor
1025 Budapest, Pusztaszeri út 59/67.

Igazgatótanács. Elnök: Pálinkás Gábor
Tagok: Bérces Tibor, Gyarmati István, Hajós György, Kálmán Alajos,
Márta Ferenc, Wojnárovits László, Szépvölgyi János, Tétényi Pál

Kutatóközponti titkárságvezető: Vinkler Péter

TAGINTÉZETEK:

Kémiai Intézet
Igazgató: Pálinkás Gábor

Izotóp- és Felületkémiai Intézet
Igazgató: Wojnárovits László

Anyag- és Környezetkémiai Kutatólaboratórium
Igazgató: Szépvölgyi János

MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA

KÉMIAI KUTATÓKÖZPONT

Kémiai Intézet (Vinkler Péter)

**Anyag- és Környezatkémiai
Kutatólaboratórium**
(Szépvölgyi János)

Izotóp- és Felületkémiai Intézet
(Tétényi Pál)

MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA

BUDAPEST • 2000

Szerkesztőbizottság

Beck Mihály, Bodnár György, Glatz Ferenc (elnök), Kónya Sándor (lektor),
Láng István, Pritz Pál, Szász Zoltán, Teplán István, Tolnai Márton,
Burucs Kornélia (titkár)

Szerkesztő

GLATZ FERENC

A szerkesztő munkatársa

Teplán István

Olvasószerkesztő

Póty János

ISBN 963 508 235 5 ö

ISBN 963 508 250 9

Kiadja

a Magyar Tudományos Akadémia

Felelős kiadó: Burucs Kornélia

Kiadói szerkesztő: Kovács Éva

Nyomdai munkálatok: Akaprint Nyomdaipari Kft.

Felelős vezető: Freier László

Készült 5,99 (A/5) ív terjedelemben, 1500 példányban

Tartalom

Vinkler Péter: Kémiai Intézet	7
Szépölgyi János: Anyag- és Környezetkémiai Kutatólaboratórium	41
Tétényi Pál: Izotóp- és Felületkémiai Intézet	51

A Kémiai Kutatóintézet szerepvégzési feladata a jövőben

- Nemzetközi színvonalú tudományos kutatások folytatása a kémia és a vele rokon szaktudományok olyan témakörökben fontos területen – államos technológiák fejlesztése a hazai iparhoz, az anyagok tulajdonságai, valamint a biológiai folyamatok kémiai eseményeire –, amelyekben a kutatási feladatok megoldása jelentős szellemi kapacitást képviselő, specifikus tudással rendelkező kutatók összehangolt munkáját kívánja meg, és többoldalú megközelítést, valamint megrettető műszerezettségű igényel.
- Kutatók részese nemzetközi és hazai tudományos együttműködések keretében.
- Stratégiai kérdések vizsgálata a hazai gazdaság – valamint az egészségügy – területén és a környezetvédelem fejlesztés érdekében.
- Részvétel a hazai és a külföldi – különös tekintettel a vegyipari és gyógyszeripari – vállalatok kutatási-fejlesztési feladatainak megoldásában.
- Az olyan tudományos eredmények publikálása, hasznosítása, keszleményezés és elterjesztése.
- Közreműködés a hazai természettudományos, elsősorban a kémiai kultúra fejlesztésében és fejlesztésében, továbbá képzésben a hazai felsőoktatásban és a tudományos továbbképzésben. Az együttműködések közös laboratóriumok és laborhelyeken történő megvalósítása.
- Országos feladatkörű szakértői tanácsadás.
- Kémiai számítástechnikai bázis üzemeltetése.

A kutatóközpontot a Magyar Tudományos Akadémia azzal a szándékkal hozta létre 1998. január 1-jei hatállyal a Központi Kémiai Kutatóintézetből, az Izotópkutató Intézetből és a Szervetlen Kémiai Kutatólaboratóriumból, hogy az együttműködés lehetőségeinek kiaknázásával, valamint a közös infrastruktúra és a műszerállomány racionális felhasználásával eredményesebben és gazdaságosabban folytathassa tudományos tevékenységét.

A Kémiai Kutatóközpont alaptevékenységi feladatai a következők:

- Nemzetközi színvonalú tudományos kutatások folytatása a kémia és a vele rokon szaktudományok olyan kiemelkedően fontos területein – különös tekintettel a kémiai szerkezetnek a reakciókészséggel, az anyagok tulajdonságaiival, valamint a biológiai hatással fennálló összefüggéseire –, amelyeken a kutatási feladatok megoldása jelentős szellemi kapacitást képviselő, speciális szak tudással rendelkező kutatók összehangolt munkáját kívánja meg, és többoldalú megközelítést, valamint megfelelő műszerezettséget igényel.
- Kutatások végzése nemzetközi és hazai tudományos együttműködések keretében.
- Stratégiai kutatások végzése a hazai gazdaság, valamint az egészségvédelem javítása és a környezetvédelem fejlesztése érdekében.
- Részvétel a hazai és a külföldi – különös tekintettel a vegyipari és gyógyszeripari – vállalatok kutatási-fejlesztési feladatainak megoldásában.
- Az elért tudományos eredmények publikálása, hasznosításuk kezdeményezése és elősegítése.
- Közreműködés a hazai természettudományos, elsősorban a kémiai kultúra terjesztésében és fejlesztésében, továbbá kiemelten a hazai felsőoktatásban és a tudományos továbbképzésben. Az egyetemekkel közös laboratóriumok és kihelyezett tanszékek működtetése.
- Országos feladatkörű szakkönyvtár fenntartása.
- Kémiai számítástechnikai bázis üzemeltetése.

Az alaptevékenységhez kapcsolódó további feladatok:

- Alkalmazott kutatás és kísérleti fejlesztés végzése az alapkutatói eredmények gyakorlati bevezetése érdekében, továbbá fejlett metodikát és tudományos háttérrel igénylő különleges anyagok előállítása. Speciális szaktudományos mérési szolgáltatások biztosítása.
- Izotópokkal kapcsolatos szakmai szolgáltatótevékenység végzése hatósági jogkör alapján.

A Kémiai Kutatóközpont munkája jelenleg a következő területeket öleli fel:

- szerves és bioorganikus kémiai kutatások,
- felületkémiai és heterogénkatalízis-kutatások,
- kémiai folyamatok kinetikájának és mechanizmusának kutatása,
- elektrokémiai és korróziós kutatások,
- polimerkémiai és polimerfizikai kutatások,
- környezeti és analitikai kémiai kutatások,
- anyag- és molekulaszervezeti kutatások,
- nukleáris kémiai kutatások.

A kutatóközpont történetét a jogelőd intézmények krónikája nyomán ismer-tjük.

MTA KÉMIAI KUTATÓKÖZPONT

KÉMIAI INTÉZET

Igazgató: Fülöp György

1025 Budapest Pasztor utca 59/A

KÉMIAI KUTATÓKÖZPONT

Kémiai Intézet

Írta

Vinkler Péter

MTA KÉMIAI KUTATÓKÖZPONT

KÉMIAI INTÉZET

Igazgató: Pálinkás Gábor
1025 Budapest Pusztaszeri út 59/67.
Telefon: 325-9040, 325-7900
Fax: 325-5990, 325-7750
Postai cím: 1525 Budapest Pf. 17
E-mail: palg@chemres.hu
Honlap: <http://www.chemres.hu>

Tudományos Vezetői Testület. Vezetője: Pálinkás Gábor
Kutatók száma: 162
az akadémikusok száma: 8
a tudomány doktorainak és az MTA doktorainak száma: 33
a kandidátusok száma: 34
a PhD-fokozattal rendelkezők száma: 27
a 35 év alatti kutatók száma: 92 (PhD-ösztöndíjasokkal)

PERIODIKÁK: Intézeti Krónika

TUDOMÁNYOS RÉSZLEGEK:

Bioorganikus Kémiai Osztály, Szintetikus Szerves Kémiai Osztály,
Természetes Szerves Vegyületek Szintézise Osztály,
Molekulárfarmakológiai Osztály, Neurokémiai Osztály,
Farmakobiokémiai Osztály, Biokomplex Kutatási Osztály,
Katalízis Osztály, Polimerkémiai és Anyagtudományi Osztály,
Felületi Reakciók és Fémkatalízis Osztály, Reakciókinetikai Osztály,
Polimerfizikai -kémiai Osztály, Felületkémiai és Korróziós Osztály,
Kémiai-fizikai Osztály, Környezetkémiai és Analitikai Osztály,
Biooxidációs Csoport, Fotooxidációs Csoport,
Röntgendiffrakciós Osztály, Molekulaszerkezeti Osztály, Mikropórusos
és Mezopórusos Anyagok Osztálya, ESR-Spektroszkópiai Csoport,
Kémiai Informatikai és Számítástechnikai Csoport

Megalapításának célja és körülményei

A Kémiai Intézet – mint írtuk – csupán két esztendeje, 1998. január 1-jétől létezik, elődintézménye azonban több évtizedes múltra tekinthet vissza.

A vegyipar – beleértve a gyógyszeripart – Magyarországon az 1940-es évektől kezdődően mind a mai napig az egyik legdinamikusabban fejlődő iparág. A kémiai alap-, valamint alkalmazott kutatások iránti fokozott igény tette szükségessé az 1950-es években olyan kutatóintézetek alapítását, amelyeknek fő feladata nem az oktatás, hanem a távlati tudományos és a gyakorlati célú alkalmazott kutatások végzése. Az MTA Központi Kémiai Kutatóintézetének (KKKI) létrehozását a 422/1952/II.15. sz. minisztertanácsi határozat rendelte el.

Az alapító okirat megállapítja: „Hazánkban nincs olyan kémiai kutatóintézet, amely a nagyobb felszerelést igénylő kutatások elvégzését is lehetővé tenné. Halaszthatatlanul szükséges tehát, népgazdaságunk fejlesztése érdekében, az MTA elnöke javaslatának megfelelően, központi kémiai kutatóintézet létesítése, amelynek először a fizikai-kémiai és szerves kémiai osztálya kerül felállításra.” Az okirat szerint „az intézet feladata: alapvető kémiai kutatások végzése”.

A KKKI tevékenységének fő célja a *kémiai szerkezet és a reakcióképesség közötti összefüggések felderítése* volt és maradt mind a mai napig. Az intézet több tudományterületen úttörő munkát végzett az elmúlt évtizedekben. Ilyenek voltak: radioaktív izotópokkal jelzett szerves vegyületek előállítására és a reakciók mechanizmusának felderítése, a frontális gázkromatográfia elmélete, az adszorpció termodinamikája és alkalmazásai, irreverzibilis termodinamika, szénhidrogének izomerizációs és krakkreakcióinak vizsgálata, gáz- és folyadékfázisú kontaktkatalitikus és elektródreakciók tanulmányozása, fotokémiai kutatások; az anyagszerkezet-kutatás területén: az infravörös-spektroszkópia, a magmágneses rezonanciaspektroszkópia, a tömegspektrometria, a röntgendiffrakció, a gáz-elektron-diffrakció, a folyadékok szerkezetének kutatása; a makromolekuláris kémiában: a gyökös polimerizációs folyamatok kutatása és a polimerek degradációjának vizsgálata, továbbá a bioorganikus kémia.

Az intézet szervezete

Bár a KKKI alapító oklevele 1952. évi keltezésű, a kutatóhely tényleges működését első igazgatójának, Schay Géza akadémikusnak (1900–91) 1954 őszén történt kinevezésétől számíthatjuk. Önálló telephelye akkor még nem volt, a munka a Budapesti Műszaki Egyetem laboratóriumaiban indult meg, gázadszorpciós folyamatok és szerves kémiai reakciómechanizmusok vizsgálatával. A kutatásokat csakhamar kiterjesztették polimerizációkinetikai, spektroszkópai, röntgendiffrakciós, szerkezetkutatási, továbbá katalíziskutatási témákra is. Abban az időben Oláh György (jelenleg az MTA tiszteleti tagja, Nobel-díjas) igazgatóhelyettesként irányította a szerves kémiai kutatásokat. 1955-től az intézetet a Szerves Vegyipari és Műanyagipari Kutatóintézet Hungária körüti épületében helyezték el. A Pusztaszeri úton 1958-ban kezdték el építeni a kutatóhely székházát. 1962-ben készült el az első és a harmadik laboratóriumi, valamint az igazgatószáki épület. Rövid időre az MTA Műszaki Fizikai Kutatóintézete is ideköltözött. 1968-ban adták át a második laboratóriumi épületet.

1957-ig egy polimerkémiai csoport is az intézethez tartozott Hardy Gyula vezetésével. Ebből az egységből fejlődött ki később a Műanyagipari Kutatóintézet. Az Országos Atomenergia-bizottság Izotópinézetének megalakulásakor, 1960-ban a magkémiai és izotópkémiai kutatások nagyobb részét a KKKI-ből oda csoportosították. Később az Izotópinézetet is az MTA-hoz kapcsolták.

1966-ban az MTA Sztereo-kémiai Kutatócsoportját (igazgató: Ötvös László), 1972-ben a Kémiai Szerkezeti Kutatólaboratóriumot (igazgató: Lengyel Sándor), valamint a Szeretlen Kémiai Kutatólaboratóriumot (igazgató: Székely Tamás) is a KKKI-hoz csatolták. Később azonban a Szeretlen Kémiai Kutatólaboratórium, valamint a Kémiai Szerkezeti Kutatólaboratórium egyik részlege, a Gázelektron-diffrakciós Laboratórium (igazgató: Hargittai István) ismét kivált az intézetből.

A Pusztaszeri úti telephely IV., legnagyobb kutatási pavilonja 1978-ban készült el. Ez az épület lehetőséget adott arra, hogy új kutatócsoportok megalakulásával (Szántay Csaba és Medzihradsky Kálmán vezetésével) a korábbi kutatási témakörök jelentősen kibővíljenek, elsősorban a szerves és a bioorganikus kémia területén.

Az intézet létszáma az alapítás évében (1954) összesen 22 fő volt, 8 kutatóval; tíz évvel később (1964) már mintegy 200-an dolgoztak, s közülük 60 volt a tudományos kutatók száma. 1976-ban 409 volt az összlétszám 172 kutatóval, míg 1986-ban 519 főből 212 volt a kutatók száma. Az összlétszám 1989-ben érte el a maximumot (533). Jelenleg a Központi Kémiai Kutatóintézet utódintézetében, a Kémiai Kutatóközpont Kémiai Intézetében összesen 297-en dolgoznak, ebből a kutatók létszáma 160 fő.

Az intézet vezetői voltak:

Igazgatók, ill. főigazgatók: Schay Géza (igazgató) 1954–69, Nagy Ferenc (igazgató) 1969–72, Holló János (igazgató) 1972–80, (tudományos igazgató) 1980–91, Márta Ferenc (főigazgató) 1980–98, Pálinkás Gábor (főigazgató) 1999–.

Igazgatóhelyettesek: Oláh György 1954–56, Náray-Szabó István 1956–57, Nagy Ferenc 1957–69, Ötvös László 1969–96, Lengyel Sándor 1972–85, Pálinkás Gábor 1993–98, Hajós György 1996–.

Jelenleg az MTA-nak 8 rendes vagy levelező tagja dolgozik az intézetben. Akadémia Doktora címe 33 kutatónak van, a tudomány kandidátusainak, illetve a PhD-fokozattal rendelkezőknek a száma pedig 80.

Kutatási területek

Az intézet kutatási céljait és a tevékenység területeit az 1950-es évek első felének ismeretei határozták meg. Az akkori, a témaválasztásokat befolyásoló alapvető célkitűzés – *a kémiai szerkezet és a reaktivitás közötti összefüggések vizsgálata* – azonban még mindig időszerű. Hasonlóképpen az egyes kutatási területek – szerves kémiai reakciómechanizmus, kinetikai és katalízisvizsgálatok, polimerkémiai, valamint anyagszerkezeti kutatások – ma is meghatározó területek a kémia tudományában. Az 1960-as évektől kezdődően s fokozottan az 1980-as évektől, a kémiai ismeretek egyre több, korábban tőle távoli területen nyertek és nyernek alkalmazást. Jelenleg két fő irány különböztethető meg. Az egyik a kémia és az *élő rendszereket* tanulmányozó más tudományágak ismereteinek és módszereinek közös alkalmazása az élő szervezet működése megértésének, a fiziológiai történések felderítésének és új gyógyszerek kidolgozásának céljából. Ezért indította meg az intézet az 1970-es évek elején bioorganikus kémiai, majd peptidkémiai és a természetes szerves vegyületekkel foglalkozó kutatásait. Az élettudományok előretörése azóta is világszerte folytatódik. Ennek eredményei a gyógyászatban is jelentkeznek, jelentős részben éppen a kémia egyre nagyobb szerepvállalásának köszönhetően. A másik fő irány az *anyag szerkezetének és funkciójának*, az anyagok egymásra hatásának, a lejátszódó reakcióknak az elemi lépések, a molekulák, atomok szintjén történő mind pontosabb megismerése. Ezen belül a kémia és a fizika határterületei a legizgalmasabbak.

Növekedtek a kémiai kutatásokkal szemben támasztott társadalmi-gazdasági elvárások. Egyre nagyobb az igény új gyógyszerekre (antivirális, antimikrobiális, gombaellenes stb. szerekre), polimerekre (kompozitokra, kerámiákra, bioprotézisekre stb.), korróziógátlókra, az alternatív energiaforrások kihasználását lehetővé tevő eljárásokra és vegyületekre (így pl. hidrogéngáz-tárolókra, speciális

fűtőelemekre), elektronikai alkatrészekre, petrolkémiai termékekre, hajtóanyagokra, kozmetikumokra, kis mennyiségben is hatékony növényvédő szerekre, funkcionális élelmiszer-adalékokra, hulladékkezelő eljárásokra, új, környezetbarát vegyipari technológiákra.

Az intézet igyekezett lépést tartani a szerkezetkutatásban, az analitikában és a kémiai kutatások egyéb területein használatos berendezések gyors fejlődésével. Az 1986-os évtől kezdődően az ELTE Kémiai Tanszékcsoportjával közösen indította el az OTKA II. sz. Budapesti Kémiai Szerkezetkutató és Elválasztás-technikai Műszerközpontjának tevékenységét. A központ részt vállalt az egyetemek műszeres szerkezetkutatási feladatainak megoldásából, de számos vállalat részére is végzett méréseket. Az 1980-as évek végén kezdte meg működését a Varian XL 400 típusú, nagy felbontású, nagy terű NMR-berendezés és a Nicolet cég Fourier-transzformációs infravörös spektrométere, amelyek akkor a legkorszerűbbek voltak az országban. 1990-ben állították üzembe a nagy felbontású tandem tömegspektrométert (MS). Ugyancsak az 1980-as évek végére épült ki az intézet belső számítógépes hálózata. Az elmúlt években helyeztek üzembe pl. egy atomerő-mikroszkópot és egy pásztázó alagútmikroszkópot, amelyek a felületvizsgálatokat, valamint egy optikai rotációsdiszperzió- és cirkulárisdikroizmus-spektrométert, továbbá egy nagy teljesítményű röntgenkészüléket, amelyek a szerkezetkutatásokat segítik.

A világtendenciáknak megfelelően az elmúlt két évtizedben az intézet bioorganikus kémiai kutatásaiban egyre inkább előtérbe kerülnek a biokémiai, molekuláris farmakológiai, *neurokémiai*, az élettani folyamatok szabályozásában szerepet játszó vegyületekkel és reakcióikkal, azok mechanizmusával kapcsolatos kutatások. Az elemi folyamatok mechanizmusának felderítésében pedig a *foto-kémiai*, *fotofizikai* és *oldatkémiai*, *oldatfizikai* vizsgálatok kapnak egyre nagyobb szerepet. A *felületi folyamatok* mechanizmusának megismerésére irányuló új kutatások a kémiai folyamatok feltárását s ezzel például hatékonyabb katalizátorok kidolgozását teszik lehetővé. Új témaként jelentkeztek az 1990-es évek közepétől a *környezetvédelemmel* kapcsolatos kutatások. Ezek közé tartoznak az új, környezetbarát eljárások alkalmazását lehetővé tevő katalizátorok kidolgozásával összefüggő, a hulladékmegsemmisítéssel, illetve a hulladék-újrahasznosítással kapcsolatos, valamint a környezetanalitikai vizsgálatok.

A kémiai kutatásokat tekintve a kutatóhelynek az akadémiai-egyetemi szférát az iparral összehangoló, integráló szerepe volt és van jelenleg is. Az intézet a *Biológiaiilag aktív vegyületek kutatása* című országos és tárcaszintű kutatási főirány koordináló és bázisintézete volt 1976–80 között. A programban számos MTA-, egyetemi és más kutatóintézet, vállalati kutatóhely vett részt. A program több eredeti, magyar gyógyszerkészítmény kidolgozásához járult hozzá.

Szerves kémiai és bioorganikus kémiai kutatások

Szerves radiokémiai kutatások

Az 1950-es évek kezdetétől a radioaktív szerves vegyületek felhasználása a kutatások számos területén világszerte általános módszerré vált. A klinikai gyakorlatban is használnak izotópokkal jelzett szerves vegyületeket. A kérdés fontosságát felismerve, a KKKI 1958-ban kutatócsoportot hozott létre, amelynek feladatául az izotópokkal jelzett vegyületek szintézismódszereinek kidolgozását állította. A kutatások Ötvös László vezetésével kezdődtek meg.

A jelzett anyagok előállításában a szén- és a hidrogénatom sugárzó izotópjának a megfelelő pozíciókba történő beépítése volt a feladat. Az említett atomok izotópjai közül elsősorban a hosszú lebomlási idejű, 14-es atomtömegű radioszén (^{14}C) alkalmazására került sor. A radioizotópos szintézisek elvégzéséhez szükség volt a megfelelő szerves reakciók mechanizmusának pontos ismeretére. A kutatások eredményei messze túlnőttek az eredetileg kitűzött célon. Tisztázták pl. az egyik legismertebb szerves kémiai reakció, a karbonsavsókból történő ketonképződés folyamatát, számos, szén-dioxid-kihasadással járó, korábban már ismert átalakulás (pl. Dakin–West reakció, furfurál savas közegben történő oxidatív dekarboxileződése, izocianátok szén-dioxid-vesztéssel végbemenő folyamatai) mechanizmusát és néhány átrendeződéses folyamat (pl. tetrazén \rightarrow formazán), továbbá néhány csoportcsere-reakció (pl. nitril \leftrightarrow karboxil átalakulás) lefolyását. A megismert csoportcsere-reakciók az izotópok szintetikus felhasználására szolgáltak. Említést érdemel a radioaktív szén-dioxidnak izotóp szenet tartalmazó káliumcianiddá történő átalakítása igen jó (95%-on felüli) radiokémiai termeléssel.

A radioaktív szerves vegyületek kémiájának megteremtésével az MTA KKKI iskola hozott létre Magyarországon.

Heterociklusos és szénhidrát-kémiai kutatások

Az intézetben kezdetől folynak szintetikus szerves kémiai kutatások. A Szerves Reakciómechanizmus Kutatócsoport első vezetője Oláh György volt. Elsősorban szerves fluórvegyületek előállításával és reaktivitásuk vizsgálatával foglalkoztak. Munkájuk kiterjedt az elektrofil aromás szubsztitúciós folyamatok tanulmányozására is. 1957-ben jött létre Messmer András irányításával a Szervesreakciómechanizmus- és Analitikai Kutatócsoport, amely 1970-ben osztállyá szerveződött. Ennek tevékenysége a heterociklusos és a szénhidrát-kémiai vizsgálatokat fogta össze. A két tématerület 1984-ben szervezetileg különvált: Pintér

István vezetésével Szénhidrát-kémiai Kutatócsoport (1993-tól osztály) alakult, amely 1998-ig működött. A Heterociklusos Kémiai Csoport Hajós György irányításával osztállyá bővülve végzi kutatómunkáját jelenleg is. Eredményeikből itt csak néhányat említhetünk meg.

Felismerték, hogy az acetilezett *cukorformazánok* dezacetilezésekor az „irreguláris Zemplén-dezacetilezés” a formazilcsoport aktiváló hatása folytán 1,4-eliminációs-addíciós mechanizmussal megy végbe, így az alkalmazott nukleofil reagenstől függően a 2-es helyzetben különböző csoportokkal szubsztituált új 2-dezoxi-aldózformazánok állíthatók elő. Megemlíthető, hogy az első *cukorfoszfinimineket* a Szénhidrát-kémiai Kutatócsoport hozta létre.

Kondenzált tetrazóliumsók közvetlen szintézisét és reakcióit vizsgálva számos új gyűrűvázat állítottak elő. A regiospecifikus gyűrűfelnylési reakciók megfigyelésével elméleti szempontból figyelemre méltó összefüggéseket sikerült megállapítaniuk a heterociklusos rendszerek elektroneloszlása és a reakciókészség között. Az *angulárisan* és *linárisan kondenzált* gyűrűvázak előállítására és vizsgálatára során szignifikáns összefüggést észleltek az anelláció típusa és a kémiai viselkedés között. A jelenség leírását „*heteroaromás anellációs effektus*” néven általánosították. A vizsgálatok eredményeit szemiempirikus kvantumkémiai számításokkal is alátámasztották. Kondenzált tetrazolok és triazóliumsók körében vizsgálták a vegyérték-izomerizációs speciális gyűrűzárési módszert. A gyűrűzáródási lehetőségek felismerése új reakcióutak kidolgozását tette lehetővé. *Számos, potenciálisan farmakológiai hatású, hídő-nitrogén-tartalmú, kondenzált [1,2,4] triazíniumsót* állítottak elő.

Természetes szerves anyagok szintézise

A természetes szerves vegyületek igen jelentős vegyületcsoportot képeznek mind élettani, mind elméleti és szintetikus szerves kémiai vonatkozásaik miatt. A kutatásukra szerveződött osztály Szántay Csaba vezetésével 1976-ban alakult meg. Az elmúlt évtizedek során elért eredményekből az alábbiakat emeljük ki.

A *morfin* még ma is a leghasználatosabb fájdalomcsillapítók egyike, így a gyógyászatban nélkülözhetetlen. Ugyanakkor mint kábítószer rendkívül káros az egészségre. Különösen vonatkozik ez acetilszármazékára, a *heroinra*. A morfin világforgalmát igen nehéz ellenőrizni, hiszen alapanyagát, a mákot nagyon sok helyen termesztik. A csoportnak sikerült egy *iparilag is megvalósítható morfinszintézist* kidolgoznia. Ezzel megnyílt az út a nagy léptékű gyártás megvalósítása előtt.

Amerikai kutatók 1992-ben egy dél-amerikai őserdőkben honos béka (*Epipeleobates tricolor*) mérgező anyagot tartalmazó bőréből izoláltak rendkívül kicsiny

mennyiségben (500 békából 0,1 mg-ot) egy *epibatidin*nek elnevezett alkaloidot. Az anyag a morfinnál 500-szor hatékonyabb fájdalomcsillapítónak bizonyult. Fontos tulajdonsága, hogy a fájdalomcsillapítás *nem az opiát receptorokon* való kötődés révén következik be, így alkalmazása nem okozhat gyógyszerfüggőséget. A természetes szerves anyagok többsége *királis szerkezetű*, és csak az egyik enantiomer formában fordul elő, vagyis optikailag aktív. A biológiai hatás többnyire összefügg a molekula térszerkezetével. Az ilyen anyagok totálszintézise csak akkor tekinthető megoldottnak, ha egyetlen, a farmakológiailag kedvező hatású enantiomer van a kezünkben. Hosszan tartó kísérleti munka eredményeként a kutatócsoportnak sikerült egy rendkívül előnyösen végrehajtható epibatidin-szintézist kidolgoznia, amely közvetlenül az egyetlen, kívánt enantioszelektív térszerkezetű alkaloidot eredményezi. Így megnyílt a lehetőség a nagyobb mennyiség előállítására és a részletes biológiai vizsgálatokra.

Az *anyarozs-alkaloidokból* és származékaikból sok kiváló gyógyszer hatóanyaga nyerhető. Előállításuk a rozson tenyésző gombákból történik. Az anyarozs-alkaloidok igen bonyolult szerkezetűek, így iparilag is megvalósítható szintézisük rendkívüli kihívást jelent. Hosszú évek kitartó munkájával sikerült ezen alkaloidok alapvázát, az ún. *ergolinvázat* új módon szintetizálni, ami reményt ad arra, hogy a kívánt cél rövidesen elérhető lesz.

Prosztaglandiok és flavonszármazékok kutatása

A *prosztaglandinok* és analogonjainak kutatása az 1970-es évek elején kezdődött az intézetben Tömösközi István és Gruber Lajos vezetésével. A kutatócsoportnak optikailag aktív oxabiciklo-oktenon sztereospecifikus hidroxilálásával, azt követően redukcióval és Wittig-reakcióval, majd dehidratációval sikerült gazdaságosan előállítania egy prosztaglandin intermediert ($\text{PGF}_{2\alpha}$). Prins-reakcióval sztereospecifikusan Corey-laktont készítettek, amelyből az említett prosztaglandin-származék igen előnyösen nyerhető. A $\text{PGF}_{2\alpha}$ a gyógyszeriparban alkalmazott fontos köztermék. Az eljárást a Chinoin Gyógyszergyár az elsők között hasznosította a világon.

Az 1970-es években Farkas Loránd, illetve Sóti Ferenc vezetésével számos flavon-, benzofurán- és dibenzo-piron-származékot állítottak elő.

Nukleozidok, nukleotidok és analógjaik bioorganikus kémiai kutatásai

Az 1960-as évek végén Ötvös László által elindított bioorganikus kémiai kutatások legfontosabb célja az volt, hogy a biokémiai átalakulásokat a *szerves kémia* már

ismert törvényei alapján magyarázza meg. Az alkalmazott metodikák több terület (szerves szintézis, izotópszintézis, kromatográfiai analízis és elválasztástechnika, *in vitro* biokémiai műveletek, állatkísérletek) együttműködését igénylik. A KKKI-ben folyó kutatások jelentős része a racionális gyógyszerkutatás céljait szolgálja.

Az eltelt mintegy három évtized alatt elért leglényegesebb eredmények közé sorolható a biopolimereken végbemenő reakciókban döntő jelentőségű sztérikus effektusok értelmezésére kidolgozott *orientációs és kompressziós sztérikus szubsztituens elmélet*. Ezzel számos enzim (hidrolázok, polimerázok, transzferázok) által katalizált átalakulás szubsztrátspecificitását – beleértve a sztereospecificitást is – sikerült megmagyarázni és új, kvantitatív szerkezet–hatás összefüggésekkel leírni.

A nukleinsavak bifunkciós, fiziológiai hatású (rákellenes) alkilező szerekekkel végzett vizsgálata révén a *DNS jobbra csavarodó kettőshélix-szerkezetét kémiaiilag* is sikerült bizonyítaniuk oldatban, fiziológias körülmények között.

A kutatócsoport felderítette számos nukleozid antivirális és tumorelles hatásának molekulárfarmakológiai alapjait.

Az említett kutatások indították el hazánkban a bioorganikus kémiát. Ugyancsak a KKKI kezdeményezésre alakult meg az MTA Bioorganikus Kémiai Munkabizottsága. A kutatások gyakorlati eredménye a HEVIZOS márkanéven forgalomba került herpeszellenes, antivirális készítmény, amely svájci és német klinikai vizsgálatok szerint az Acyclovirrel egyenértékű, ekvimoláris dózisa számolva azt lényegesen felülmúló hatékonyságú gyógyszer.

Receptor- és fehérjekötődési vizsgálatok

1977-ben Simonyi Miklós irányításával kezdődött el a gyógyszermolekulák szérumfehérjéken és receptorokon történő kötődésének vizsgálata. A kutatócsoportnak sikerült igazolnia, hogy az emberi vérben a *különböző optikai aktivitású hatóanyagok sztereoizomerjei elkülönülnek*. Ez a felismerés azért lényeges, mert az összes ma alkalmazott gyógyszer mintegy 25%-a optikailag nem egységes, vagyis racém formában kapható. A csoport néhány további eredménye:

- Kémiai jellemzők meghatározásával hozzájárultak a γ -aminovajsav (GABA)-A/benzodiazepin-, glicin- és szerotonin ioncsatorna-receptorok szerkezetének és működésének a leírásához, az agonista és antagonisták hatások megkülönböztetéséhez.
- Megállapították, hogy a GABA-receptor A, B és C alosztálya, valamint az idegsejtek felvételi helyei a flexibilis GABA-molekulát egymástól különböző torziós szögekkel jellemezhető konformációkban kötik meg.

– Immobilizált fehérjét tartalmazó oszlopon megvalósították mind a gyógyszer-engedélyezési előírások szerinti kötődésvizsgálatot, mind a racém gyógyszerek kromatográfiás rezolválását.

A kutatásoknak az ad gyakorlati jelentőséget, hogy az eredmények ismereteiket szolgáltatnak a vizsgált molekulák sorsáról és a hatás kifejtésének helyéről az élő szervezetben. A kutatások során kidolgozott módszerekre – amelyeket számos farmakon gyógyszerfejlesztése során alkalmaztak – négy szabadalmi oltalmat nyertek.

Neurokémiai kutatások

A racionális gyógyszertervezés megköveteli a gyógyhatás szempontjából megcélzott biomolekula részletes ismeretét. Az intézet bioorganikus kémiai kutatásainak szélesítése érdekében az 1980-as években kezdték meg Kardos Julianna vezetésével a *neuronális membránreceptorok* funkciójára és a rajtuk lejátszódó folyamatok molekuláris mechanizmusának felderítésére irányuló kutatásokat. Az említett, a központi idegrendszer működése szempontjából alapvető jelentőségű receptorok szabályozzák a kémiai ingerületátvitelben szerepet játszó ionok és molekulák transzmembrán fluxusának sebességét. Mivel természetes környezetükben, az idegsejt plazmamembránjában ezek a folyamatok a másodperc törtrésze alatt játszódhatnak le, molekuláris mechanizmusuk tanulmányozására rendkívül érzékeny radioaktív, fluoreszcens-nyomjelzéses és gyors kinetikai módszereket honosítottak meg nemzetközi együttműködésben. A legutóbbi években a transzmembrán kalcium-, nátrium- és kálium-ionfluxus-változások követésére alkalmas *in vitro* módszereket fejlesztettek ki. Ezen a metodikai alapon különböző típusú glutamát-, γ -aminovajsav- és nukleotidreceptor funkcionális tesztekkel dolgoztak ki, amelyeket ismert hatású receptoragonistákkal és -antagonistákkal ellenőriztek. Megvizsgáltak számos, gyógyszerfejlesztés alatt álló vegyületet.

Kidolgozták a központi idegrendszer AMPA típusú glutamát receptora által szabályozott, nátrium-ionfluxus-változásokat leíró minimális kinetikai modellt.

Farmakobiokémiai kutatások

A farmakobiokémiai kutatások területe az intézet egyes – korábban Dénes Géza által vezetett – bioorganikus kémiai témáiból fejlődött ki 1984-től. A kutatásokat Vereczkey László irányítja. Elsősorban gyógyszerek és gyógyszerjelölt moleku-

lák indukciós hatását, metabolizmusát és potenciális *interakciós hatását* vizsgálják. Legfontosabb eredményeik közül csak néhányat említünk meg.

- Megállapították, hogy patkányok májában a fenobarbitál és a dexametazon együtt adva indukálja a p-nitrofenol-hidroxiláz enzim aktivitását. A részletes vizsgálatok szerint az aktivitás egy eddig nem detektált enzim révén emelkedik meg.
- Rendszeresen végeznek kísérleti állatok, illetve humán máj sejtjeivel és sejtfrakciókkal *in vitro* gyógyszermetabolizmus-vizsgálatokat mind fázis I., mind fázis II. reakciókban, hozzájárulva ezzel új gyógyszerek kifejlesztéséhez.
- Sikerült egy olyan módszert kialakítaniuk, amelynek segítségével, gátlószerek alkalmazásával előre megjósolható, hogy egy adott vegyület (pl. az Ipriflavon) milyen enzimeken keresztül metabolizálódik, és milyen vegyülettel (gyógyszerekkel) adhat klinikailag is fontos interakciót.

Peptidkémiai kutatások

A peptidkémiai csoport Medzihradzsky Kálmán irányításával, az enkefalinok 1975-ben történt felfedezése nyomán, az opioid peptidek szerkezet-hatás összefüggéseinek vizsgálatával kezdte meg tevékenységét 1976-ban. A kutatócsoport által előállított peptidek biológiai hatását a Semmelweis Orvostudományi Egyetem és a Szegedi Biológiai Központ kutatói vizsgálták. Kiemelkedő jelentőségűnek találták az enkefalin-klórmetil-ketont, amely a szinaptoszóma membránokon irreverzibilis receptorinhibitornak bizonyult, valamint az N-terminálison melfalánt tartalmazó analógot, melynek segítségével bizonyították, hogy az irodalmi adatokkal szemben a morfinban is jelenlévő fenolos hidroxil nem feltétlenül szükséges az opioid hatás kiváltásához.

Élettanilag jelentős fémkomplexek kutatása

A KKKI-ban az élettanilag jelentős fémek komplexeinek vizsgálatát Lakatos Béla kezdte el 1968-ban. A csoport vezetését 1990-től Vinkler Péter vette át. Annak ellenére, hogy néhány, fémek hiányára visszavezethető betegség – pl. vérszegénység – okai régóta ismeretesek voltak, nem állt rendelkezésre mellékhatások nélküli, kis dózisban is alkalmazható, jól felszívódó és hasznosuló, terhes nőknek is jól adható anémiás készítmény. A széles körben alkalmazott szerves fém-sók, szerves sók és kelátkomplexek, biopolimerek komplexei erre a célra nem alkalmasak. A kutatások során kiderült, hogy a kívánt célnak a természetes eredetű, közepes molekulatömegű és közepes stabilitási állandójú fém-

komplexeket adó vegyületek felelhetnek meg. Ilyen anyag a növényi (pl. citrus-félék, alma) pektinből nyerhető *poligalakturonsav*. Elsőként állítottak elő *bázisos fém-poligalakturonátokat*, amelyek optimális fiziológiai hatást eredményeztek.

A kutatás gyakorlati eredményei a FERROCOMP, a MULTICOMP és a MAGNACOMP márkanévű termékek, amelyek 1993–98 között kerültek forgalomba. A FERROCOMP – több klinika vizsgálatai szerint – jelenleg a legjobb vérszegénység elleni készítmény.

Növényvédőszer-kutatások

1981-ben, Dutka Ferenc vezetésével kezdték meg a növényvédőszer-antidotumok kutatását. A munka elsődleges célja az volt, hogy célzott biológiai hatását, originális, a hazai vegyipar által gyártható és a mezőgazdasági technológiában felhasználható, szabadalomképes, a nemzetközi piacon is értékesíthető, a gyomirtók kultúrnövényt károsító hatását kivédő antidotumokat szintetizáljanak. Viszonylag rövid idő alatt sikerült egy *originális herbicid antidotumot* (egy dioxolán-származékot) (MG-191) kidolgozniuk. Az MG-191 olyan proantidotumnak tekinthető, amely biológiai közegben enzimek hatására aktiválódik. A hatást egy *acilezési reakció* okozza. Az olcsó alapanyagokból egyszerű technológiával gyárthatónak bizonyult és sikeresen alkalmazott gyomirtó termék 18 országban nyert szabadalmi védettséget. A licencet a Monsanto Chemical Co. (USA) vásárolta meg.

Fizikai kémiai kutatások

Homogén katalitikus folyamatok kutatása

Az 1960-as évek elején Nagy Ferenc vezetésével részletesen vizsgálták a hidrogénmolekula átmenetifém-komplexekkel szembeni homogén katalitikus aktivitását. A szubsztrátumok bizonyos körében érvényesnek talált szabad gyökös mechanizmusra ma is gyakran hivatkoznak az irodalomban. Később a csoport érdeklődése a biológiai rendszerekben működő oxidoreduktáz enzimek modellezése felé fordult. Simándi László irányításával olyan komplexeket állítottak elő, amelyek aktiválják a dioxigént, és utánozzák bizonyos metalloenzimek működési mechanizmusát. Kobaloxim és ferroxim komplexekkel sikerrel modellezték az élettani fontosságú *fenoxazinon szintetáz és catechol enzimeket*. Részletes kinetikai vizsgálatok segítségével tisztázták a modellreakciók mechanizmusát.

Az évtized végén megépítették a gyors oldatreakciók követésére alkalmas *első hazai stopped-flow készüléket*, amely az áramló reakcióelegy gyors megállításán és az azt követő spektrofotometriás sebességmérésen alapul. E készülék lehetővé tette szerves vegyületek gyors permanganátos oxidációjának részletes vizsgálatát és a reakciómechanizmus felderítését.

A mezőgazdaságban használt kis dózisu, szulfonil-karbamid típusu gyomirtók gyártásánál széles körben alkalmazzák a veszélyes és környezetkárosító *foszgent*. A Nitrokémia Ipartelepék Rt. megbízásából *környezetkímélő* eljárásokat dolgoztak ki a legelterjedtebben használt szerek *foszgenmentes* előállítására. Az új technológiák palládiumkomplexekkel történő katalitikus karbonilezésre épülnek.

A foszgenmentes katalitikus karbonilezés köztitermékeinek vizsgálatából fejlődtek ki az új *palládiumkomplexek* szintézisére és szerkezetvizsgálatára irányuló kutatások. Arén-szulfonilazid és kétmagvú palládiumkomplexek reakciójában számos, korábban nem ismert, ún. A-vázaz nitrén- és azidkomplexet állítottak elő. Az új vegyületek szerkezetét röntgendiffrakciós módszerrel határozták meg. Elsőként végezték el az arén-szulfonil-azidok és a palládiumdimer közti reakciók kinetikai vizsgálatát. A *szerkezet és a reakcióképesség* kapcsolatát a Hammett-összefüggés és a meghatározott kötéstávolságok alapján értelmezték.

Hordozós fémkatalizátorok kutatása

A heterogén katalitikus kutatások keretében az 1960-as években Nagy Ferenc vezetésével Móger Dezső csoportjában részletesen vizsgálták kis molekulák hordozómentes fémeken végbemenő kemiszorpcióját és reakcióit. Ezekben a vizsgálatokban a hagyományos adszorpció és az akkor újnak tekintett elektrokémiai módszereket alkalmazták.

A következő évtized végétől a Margitfalvi József vezette kutatások fő célja *hordozós fémkatalizátorok* előállítása és vizsgálata lett. Az 1980-as évek elejétől ezeket a katalizátorokat szerves kémiai reakciókban – szelektív hidrogénezés, dehidrogénezés, izomerizáció, hidrodahalogénezés, redukív aminálás – vizsgálták. Az utóbbi két évtizedben megnőtt az igény a *szuperaktív és szelektív*, úgynevezett *reakcióra szabott katalizátorok* kifejlesztésére.

Jelenlegi kutatásaik fő célja a váz- és a hordozós *fémkatalizátorok* előállítása (módosítása), ezek szerkezete és a vizsgált reakcióban mutatott aktivitása-szelektivitása közötti összefüggések feltárása. A munka során „irányított kémiai kölcsönhatások” vagy „irányított felületi reakciók” révén biztosítani tudják, hogy az adott szerves kémiai reakcióban kizárólagosan katalitikusan aktív felületi alaku-

latok képződjenek. Olyan váz- és hordozós fémkatalizátorokat állítottak elő, amelyek szelektivitása a vizsgált reakciókban jelentősen felülmúlja a hagyományos módon előállítottakét.

Az 1990-es évek közepétől a csoport a heterogén katalizátorokat *aszimmetrikus hidrogénezési* reakciókban is alkalmazza, vizsgálják a heterogén katalizátorokon a módosító által kiváltott királis indukció eredetét. A királis indukció, illetve a szubsztrátum-specifikusság eredetének felderítése során kidolgozták az úgynevezett „árnyékolóhatás-modellt” („Shielding Effect Model”). Ennek lényege a reakcióba lépő prokirális molekula és a királis módosító között a folyadékfázisban végbemenő *komplekxképződés*. A komplexben a királis módosító „árnyékoló hatás”-t fejt ki a reagálandó prokirális molekulára. Az árnyékolás eredményeképpen a reagálandó molekula már csak egy meghatározott módon képes a heterogén katalizátor felületén adszorbeálódni és hidrogéneződni, és *így csak az egyik optikai izomer keletkezik*.

Az alkalmazott kutatási eredményeket több jelentős cég (így pl. Air Products and Chemicals Inc. [USA], Clariant GmbH [Németország], MOL Rt.) használítja.

Zeolitkatalízis-kutatások

A korábbi, amorf aluminoszilikát és savas ioncserélő műgyanta katalizátorokon végzett kutatások folytatásaképp 1967-ben kezdte el Kalló Dénes és Papp János Schay Géza akadémikus irányítása mellett a zeolitkatalízis-kutatásokat. A csoport, majd osztály vezetését később Kalló Dénes vette át.

Toluol benzollá történő hidrodemetilezését vizsgálták módosított hazai természetes zeoliton, a klinoptiloliton. A zeolitok olyan kristályos aluminoszilikátok, amelyeket egymáshoz közös oxigéncsúcsaikon keresztül kapcsolódó SiO_4 - és az őket izomorfán helyettesítő AlO_4^- -tetraéderek építenek fel. Ily módon molekuláris méretű csatornák szabályos térbeli rendszere áll elő. Ma már a világ katalitikus ipari eljárásainak döntő részében zeolitokat alkalmaznak: a termelt érték 60-70%-át zeolitkatalízis útján nyerik, míg a feldolgozott mennyiséget tekintve a zeolitkatalízis részesedése 80-90%-ot tesz ki.

A tokaj-hegyaljai klinoptilolit- és mordenittartalmú riolittufa kőzettani, fizikai kémiai vizsgálata mellett az intézet közreműködött a rétegfeltárásban is. Ezek a munkák alapozták meg a hazai zeolitvagyon kihasználását. A csoport részt vett egy új, *kommunális szennyvíztisztítási eljárás* (ZEOFLOCC) kidolgozásában. A szabadalmaztatott és több országban értékesített eljárás révén a biológiai kezelés hatékonysága klinoptilolitörlemény adagolásával 30-50%-kal növelhető.

A természetes klinoptilolit és mordenit módosításával olyan katalizátorokat sikerült előállítaniuk, amelyekkel megvalósítható a *xilol-izomerizáció* (m-xilolnak az értékesebb o- és p-xilollá történő átalakítása). Sikerült tisztázniuk klinoptilolit katalizátorokon az n-butén-izomerizációnak, a metanol dimetiléterre

történő dehidratálásának, valamint az l-butén szekunder butanollá történő hidratálásának kinetikáját és mechanizmusát. Kimutatták, hogy toluolt etilénnel alkilezve etil-toluolok képződnek, amelyek közül csupán a p-etil-toluol az értékes izomer, mivel az ebből egyszerű dehidrogénezéssel előállított p-metil-sztirol a műanyaggyártás alapanyaga. Megfelelően módosított zeolit katalizátoron (ZSM-5-ön) olyan *alakszelektivitást* tudtak elérni, hogy a 96-98%-ban képződött p-izomer mellett csupán m-izomer volt jelen.

Környezetvédelmi szempontból igen fontos, hogy a *belső égésű motorok*, hőerőművek által kibocsátott *káros anyagokat*, a szén-monoxidot, az elégtelen szénhidrogéneket és a nitrogén-oxidokat ártalmatlanítsuk. A Valyon József vezetésével folyó kutatások eredményeként nagy nemzetközi visszhangot váltott ki az a felismerés, hogy a reakció drága nemesfém-katalizátorok helyett olcsó réz-zeolitokon is végrehajtható egy redoxi mechanizmus szerint.

A Beyer Hermann vezette csoport munkatársai a Leuveni Egyetemmel (Belgium) együttműködésben 1980-ban egy teljesen új, szilíciumtetrakloridos *dezaluminálási* eljárást dolgoztak ki. Később sikerült zeolitok és fémsók, illetve fénoxidok között lejátszódó szilárdtest- és redukzív szilárdtest-ioncserélő reakciókat felismerniük. Kidolgozták több, alumíniumot tartalmazó rétegszilikát-származék szintézisét, megvizsgálták alkalmazhatóságukat ioncserélőként; kikísérletezték a *folyadékfázis kizárásával* zeolitokká történő átkristályosíthatóságukat. A MOL Rt.-vel való együttműködés eredményeképp évi 300 000 t mennyiségű *gázolaj katalitikus paraffinmentesítése* vált lehetségessé. A közreműködésükkel kidolgozott szabadalmak alkalmazása révén az iparvállalatoknál jelentkező eredmény 1993-tól évente több mint 1 milliárd Ft-ot tesz ki.

Oxidációs folyamatok tanulmányozása

A rendszerelméletnek, a számítástechnikának és a kémiai kutatások műszerzettségének gyors fejlődése az 1970-es években lehetővé és szükségessé tette olyan *modellezési eljárás* kidolgozását, amely egy bizonyos összetett kémiai folyamat vizsgálata során kapott *egyedi* adatokat felhasználhatóvá teszi az adott reakció típus *általános* leírására. A Gál Dezső vezetésével folyó kutatások során kidolgozott eljárás fő összetevői: irodalmi adatok alapján a vizsgálandó folyamat „lehetséges mechanizmusának” összeállítása; kísérlettervezés a mechanizmus alapján; a kísérleti eredmények felhasználása a mechanizmus redukciójára; az adatok alapján a mérések számítógépes szimulációja.

Modellreakcióként az etil-benzol folyadékfázisú oxidációját tanulmányozták. Munkájuk során tisztázták a folyamatban keletkező stabilis közti- és végtermé-

kek képződési sorrendjét és a reakcióban fontos szabad gyökök szerepét a termékek képződésében. Megállapították, hogy a termékek mennyiségét a hidroperoxidnak a köztitermék gyökök által kiváltott átalakulása szabja meg. Arra a következtetésre jutottak, hogy a homogén fémkomplexek mint katalizátorok kiválasztását az említett mennyiségi összefüggések határozhatják meg.

Hasonló elveket alkalmaztak egy biológiai rendszerre: a *photodinamikus terápia*-nak nevezett daganatgyógyítási eljárás kémiai történéseinek tanulmányozására. A kutatócsoport az irodalomban eddig elfogadottól eltérő, de egyúttal azt kiegészítő mechanizmusra tett javaslatot, melynek értelmében a fénnel gerjesztett szenzibilizátorok és a daganatos sejtekben növekvő koncentrációban keletkező szabad gyökök közötti kölcsönhatás jelentős mértékben hozzájárul az eljárás hatékonyságához. Hipotézisüket kémiai modellekkel, valamint daganatos egereken végzett vizsgálatokkal támasztották alá. Megállapították, hogy a *terápia során a gyökkoncentráció erősen csökken*. A mechanizmus ismerete új típusú szenzibilizátorok szintézisének megtervezését segíti elő.

Folyadékfázisú kinetikai vizsgálatok

Az 1962-től kezdve Simonyi Miklós vezetésével folytatott *folyadékfázisú gyökös reakciók kinetikája és mechanizmusa* című téma vizsgálatai során megállapították, hogy fenolok és polivinil-acetát gyökök reakciójában a fenolról hidrogénatom lép át a gyökre. A fenolok szerkezetének és az oldószer polaritásának függvényében az oldószerrel képzett hidrogénkötés infravörös-spektroszkópiás vizsgálatával, valamint kinetikus deutériumeffektus méréseivel sikerült felderíteni a reakció mechanizmusát. Az eredmények hozzájárultak a kinetikus izotópeffektusok elméletének továbbfejlesztéséhez.

Elektrokémiai kutatások

Az *elektrokatalitikus* és *elektroszorpciós* vizsgálatok az intézet alapítása óta folyó heterogén katalitikus kutatásokból nőttek ki. Az 1960-as évek kutatásai igazolták pl., hogy a vizes fázisú *katalitikus hidrogénezés és elektrohidrogénezés egyenértékűnek* tekinthető.

A Horányi György vezette elektroredukciós kutatások során megállapították, hogy a volfrám-karbid hidrogénező katalizátorként használható. Az elektrooxidációs folyamatok egyik legjelentősebb eredményeként sikerült a *C-vitamin szintézisének* egyik lépését elektrokémiai úton megvalósítaniuk. Úttörő munkát

végeztek a nikkelt-hidroxid elektród szerves elektrokémiai alkalmazásában. A kutatócsoportnak sikerült először kimutatnia az ad-atomok által indukált anion-adszorpciót. Egyszerű és nemzetközileg széles körben alkalmazott radioaktív nyomjelzős módszert dolgoztak ki elektródokon lejátszódó adszorpciós folyamatok *in situ* vizsgálatára.

A heterogén katalitikus reakciók mechanizmusának vizsgálata kapcsán az 1960-as években Szabó Sándor a palládiumozott palládium huzalelektrod-katalizátor tömegéből az annak felületére irányuló hidrogéntranszportot, továbbá a palládiumban oldott hidrogén katalitikus reakciókban való részvételét tanulmányozta. Megállapította, hogy az oldott hidrogén részt vehet a felületi reakciókban, továbbá hogy a felületen adszorbeált és az oldott hidrogén között a hidrogénezés körülményei között is egyensúly alakul ki. Az 1970-es évek elején a figyelem az *elektrokémiai fémadszorpció* felé fordult. Sikerült egy eljárást kidolgozniuk adszorbeált fémekkel módosított (hordozós) nemesfém katalizátorok előállítására.

Folyadékszerkezeti és korróziós kutatások

Az oldószerkezet és elektrolitoldatok diffrakciós szerkezetvizsgálata Magyarországon az 1960–70-es évek fordulóján kezdődött el a Lengyel Sándor vezetése alatt álló MTA Kémiai Szerkezetkutató Laboratóriumában. A röntgendiffrakciós folyadékszerkezet-vizsgálatok meghonosítása Lengyel Sándor, Hajdú Ferenc és Pálinkás Gábor, a világviszonylatban is újszerű folyadék-elektron diffrakciós módszer kidolgozása Lengyel Sándor és Kálmán Erika nevéhez fűződik. A laboratórium beolvasásával a folyadékszerkezet-vizsgálatok a KKKI-ben folytak tovább. Az 1970-es években nemzetközileg is elismert eredményeket értek el a víz és az elektrolitoldatok szerkezetének meghatározásában. Kísérleti úton először határozták meg a víz hidrogénjeinek eloszlásfüggvényeit elektrondiffrakciós módszerrel. *Molekuladinamikai számítógépes szimulációs módszert dolgoztak ki* a víz és a vizes elektrolitoldatok szerkezetének és dinamikájának vizsgálatára. Az 1980-as években a csoport kutatói szerkezeti modelleket készítettek az ionhidratáció jellemzésére, és alkalmazták azokat a nátrium-aluminát oldatok szerkezetének leírására. Ezzel párhuzamosan kidolgozták a Bayer-féle timföldgyártás matematikai modelljét. Az elmúlt több mint két évtizedben a csoport kutatói számos eredményt értek el a hidrogénkötés, valamint az ionszolvatáció törvényszerűségeinek felderítésében, a molekuladinamikai módszer fejlesztésében és alkalmazásában, továbbá oldószerkezetek többszörszámú tulajdonságainak szerkezetük alapján történő értelmezésében. Az 1990-es években a kutatás kiterjedt az oldó-

szerek és oldatok szerkezetének vizsgálatára extrém termodinamikai körülmények között, továbbá a molekuláris folyadékok és keverékek szerkezetének röntgen- és neutrondiffrakcióval, valamint fordított Monte Carlo-szimulációval történő tanulmányozására.

Inhibitor- és felületkémiiai kutatások

Az 1980-as években Kálmán Erika vezetésével indultak meg a szerves foszfonsavak korróziós inhibíciós mechanizmusának vizsgálatára irányuló kutatások. A foszfonsavak az ipari hűtővizekben alkalmazott korróziógátló szerek legfontosabb komponensei. A hatásmechanizmus jobb megértése céljából tanulmányozták a fém-elektrolit határfelületen lejátszódó adszorpciós/deszorpciós folyamatokat. Vizsgálták az acélfelület előkezelésének hatását az oxidréteg kialakulására. Összefüggést állapítottak meg az inhibitorhatás és a fémfelület morfológiája között.

Világszerte folynak a hatékony korróziós inhibitorok kifejlesztésére irányuló kutatások. A kutatócsoport által kidolgozott statisztikai módszerrel összefüggést mutattak ki a molekulák, elsősorban heterociklusos vegyületek, *elektronszerkezete és hatékonysága* között. A felismerés lehetővé tette, hogy újabb, nagyobb hatékonyságú inhibitorokat tervezzenek.

Különösen nagy kárt okozhat a korrózió ott, ahol a berendezések hűtésére vizet alkalmaznak. A kutatócsoport az 1980-as években olyan vegyszereket fejlesztett ki, amelyeket ipari hűtő- és fűtővízkörök, valamint háztartási víz kezelésére alkalmaznak. Kidolgoztak környezetbarát hűtőfolyadék előállítására alkalmas anyagokat is. Az említett vegyszereket – CORIN néven – a KEMOBIL-cég állítja elő. Jelenleg 40 ipari hűtővízkör kezelésére használnak CORIN vegyszereket, amelyeket külföldre is exportálnak.

A korróziós inhibitorok alkalmazása során védekezni kell a hűtővizekben jelenlévő mikroorganizmusok elszaporodása ellen is. A kutatócsoportnak sikerült egy olyan aminosav-származékot előállítania, amely gátolja a korróziót, és egyben biocid tulajdonságú.

Magyarország jelentős természeti kincse a *termásvíz*, amelyben a vízkő kiválásával, illetve a korrózióval kapcsolatos problémák fokozottan jelentkeznek. A kutatócsoport által – az OMFB pénzügyi támogatásával – kifejlesztett vegyszer-kompozíció mindkét folyamat gátlására alkalmas. Megoldották a vegyszer üzemszerű gyártását is.

A *felületek mikroszkopikus jellemzése*, a különböző felületi folyamatok mechanizmusának atomi, illetve molekuláris szinten történő követése mind techno-

lógiai, mind tudományos szempontokból egyre jelentősebb. A pásztázó, tűszondás mikroszkópok (pásztázó alagútmikroszkóp és atomierő-mikroszkóp) lehetővé teszik vezető és szigetelő tulajdonságú felületek μm - és nm -es tartományban történő, morfológiai és a fizikai sajátosságokra vonatkozó vizsgálatát. A kutatócsoport az országban az elsők között honosította meg 1994-ben ezeket a vizsgálati módszereket. A mérőberendezések lehetőséget nyújtanak szilárd/gáz, illetve szilárd/folyadék határfelületen lejátszódó folyamatok nyomon követésére, így pl. elektrokémiai folyamatok *in situ* megfigyelésére. A berendezéseket sikerrel alkalmazták tiszta fémek és ötvözetek felületén lejátszódó korróziós folyamatok és korróziós inhibitorok hatásmechanizmusának vizsgálatára, polimer felületek morfológiai és reológiai jellemzésére, valamint biológiai minták tanulmányozására.

Az utóbbi időben igen jelentős új kutatási irányzat a fémek felületén lejátszódó önszerveződés jelenségének és az önszerveződött mono- és multirétegek szerkezetének, továbbá korrózióvédő hatásának tanulmányozása, amelybe a kutatócsoport 1998-ban kapcsolódott be. Az önszerveződő molekulákkal történő felületmódosítás új távlatokat nyit a korrózióvédelemben.

Gázkinetikai és fotokémiai kutatások

A gázkinetikai és fotokémiai kutatások a Szegedi József Attila Tudományegyetemen működött MTA Gázkinetikai Tanszéki Kutatócsoport Budapestre költözése után, 1979-től indultak meg a KKKI-ben Márta Ferenc és Bérces Tibor vezetésével.

A kémiai folyamatok mechanizmusának pontos ismerete igényli az azokat felépítő elemi reakciók szerepének tisztázását. Ez leghatékonyabban ún. *direkt reakciókinetikai kísérleti technikák* alkalmazásával végezhető el. Az impulzus-lézer fotolízist és a gyors áramlásos módszert alkalmazó kísérleti technikákat a kutatócsoportnak többéves fejlesztőmunkával sikerült kidolgoznia. Az e módszerekkel végzett kinetikai kutatásaik eredményei nemzetközi elismerést váltottak ki, és lehetővé tették a gyakorlati szempontból is jelentős kémiai folyamatokban (pl. légköri folyamatok, égések) fontos szerepet játszó elemi reakciók kinetikai paramétereinek meghatározását.

A gázkinetikai kutatások jelenleg három kérdéskörhöz kapcsolódnak: légkör-kémia, égések és lángok kémiája, új fényforrások kifejlesztését elősegítő kutatások.

A *légkörkémiaili kutatások* a szerves légszennyezők troposzferikus lebomlásában szerepet játszó *szabad gyökök* reakcióival, halokarbonokat helyettesíteni képes anyagok légköri folyamataival és új, környezetkímélő ipari oldószerek légköri

reakcióival foglalkoznak. A várt eredmények alapján megítélhető lesz pl., hogy ezek az anyagok milyen mértékben járulnak hozzá az *ózonlyuk* keletkezéséhez (a sztratoszférában) és a veszélyes ózon, valamint a peroxi-acetil-nitrát típusú légszennyezők képződéséhez (a troposzférában).

Az *égések és lángok kémijának kutatása* jelenleg elsősorban az úgynevezett alternatív, környezetbarát üzemanyagok égésének tanulmányozásával foglalkozik. Ilyen anyagok alkalmazása jelentősen csökkenti a gépjárművek által kibocsátott káros égéstermékek mennyiségét. Kiemelkedő e tekintetben a *metanol* – mint ígéretes, környezetbarát üzemanyag – égésmechanizmusának vizsgálata. E munka során a kutatócsoportnak sikerült meghatározni a metanolmolekulában lévő *C-H kötés erősségének* új, pontos értékét. Az adatokat több termokémiai gyűjtemény is átvette.

Mind a légkörkémianak, mind pedig az égések és lángok kémijának a tanulmányozását nemcsak kísérleti, hanem kvantumkémiai és egyéb elméleti módszerekkel is végzik.

A *gázkinetikai* kutatások új területét képezik a fényforrások, halogénlámpák működésével kapcsolatos vizsgálatok, együttműködésben a General Electric Tungstram Rt kutatóival. A brómatomok detektálása és reakcióiknak tanulmányozása elősegíti a *halogénlámpák* működési mechanizmusának megismerését és ezáltal hosszabb élettartamú, gazdaságosabban működő fényforrások kifejlesztését.

A *fotofizikai és fotokémiai* kutatások során vizsgálták az ultrabolya fény hatására képződő, rövid élettartamú köztitermékeket. A nemzetközileg is jegyzett kutatás bebizonyította, hogy a gerjesztett és az alapállapotú ketonok kölcsönhatásakor képződő *dimer* (excimer) döntő szerepet játszik az alifás ketonok fotokémijában.

Az 1990-es években a *molekulaszerkezet és a fluoreszcenciás sajátosságok* közti kapcsolat felderítése képezi a fő feladatot. Így például a naftálimidek fluoreszcenciájának tanulmányozása során egy új típusú, kettőslumineszcencia-jelenséget sikerült felfedezni. A gerjesztett fluorenon-származékok energiavesztési mechanizmusának vizsgálata révén elért eredmények *új fluoreszcenciás jelzőanyagok, fotoiniciátorok és fotostabilizátorok tervezésében* használhatók fel. Az újabb kutatások során sikerült kimutatni, hogy a szingulett gerjesztett fluorenon olyan jelzőanyag, amely képes szelektíven detektálni a mikrokörnyezetével létrejövő, dipólus jellegű és hidrogénhíd-kölcsönhatások erősségét. A fluorenonnak ezt a különleges tulajdonságát sikeresen alkalmazták a gyógyszer-, az élelmiszer- és a kozmetikai iparban széles körben használt *ciklodextrinek* üregének vizsgálatára.

Az utóbbi években a fotofizikai kutatások annak megállapításával foglalkoznak, hogy a hidrogénhídkötés miként befolyásolja a fény hatására végbemenő átalakulásokat. Az elért eredmények segítik a napsugárzás által a biológiai rendszerekben okozott változások megértését, illetve a *napenergia-hasznosítás* hatásfokának javítását.

A fotokémia területén dolgozó kutatók az oxigén egy speciális, rövid élettartamú, nagyon reakcióképes módosulatának, a citotoxikus tulajdonságú *szingulett oxigénnek* élettani szempontból fontos reakcióival is foglalkoznak. A citotoxikus hatást egyes esetekben a napfény idézi elő. Ugyanakkor, megfelelő körülmények között, éppen a citotoxikus tulajdonság révén érhető el rákellenes hatás. Egyes speciális esetekben a reagáló anyagok térbelileg inhomogén eloszlásban találhatóak, amikor nem érvényesek a hagyományos kinetika törvényszerűségei. Az ilyen rendszerek vizsgálata a sejtekben lejátszódó fotokémiai folyamatok modellezése révén jól kiegészíti a fotokémiai kutatásokat.

Makromolekuláris kémiai kutatások

A KKKI-ben annak megalapítása óta folynak a makromolekuláris kémiai és fizikai kémiai kutatások. Az első, háromfős kutatócsoportot Hardy Gyula vezette. 1957-től kezdve Tüdős Ferenc is részt vett a bővülő létszámú kutatócsoport munkájában. (Később ő lett a csoport vezetője.) A kutatások elsődleges területe a *gyökös polimerizáció* kinetikája volt, ezen belül az inhibíció folyamatának kutatása kapott különös hangsúlyt. A molekuláris inhibitorok viselkedésében tapasztalt, valamint egyéb látszólagos anomáliák vezettek a *forrógyök-hipotézis* kialakulásához, amely egyértelmű magyarázatot adott a kísérleti eredményekre, és nagy visszhangot keltett a nemzetközi tudományos életben. A későbbiekben létrejött a Makromolekuláris Kémiai Osztály, amelynek négy csoportjában polimerizációkinetikai, kopolimerizációs, polimerdegradációs, reológiai, polimerfizikai, -kémiai és polimerhordozóhoz kötött bioaktív vegyületekkel kapcsolatos kutatások folytak. A polimerdegradációs vizsgálatok a PVC, valamint a poliolefinek termikus és termooxidatív degradációjára terjedtek ki, s a későbbiek során polimerstabilizációs vizsgálatokkal bővültek.

A Pukánszky Béla vezetésével folyó kutatások fő területei jelenleg a következők: poliolefinek degradációja és stabilizálása, határfelületi jelenségek heterogén polimerrendszerekben, kis molekulájú anyagok transzportja polimerekben, polimerek reaktív feldolgozása.

A kutatócsoport gyakorlati célú eredményeire példaként említjük a *csomagolásra használt polietilénfóliák* stabilizátorreceptúrájának kidolgozását. A korábban széleskörűen alkalmazott adalékok ugyanis az egészség- és környezetvédelmi előírások szigorodásával elavultak. Az új technológia a polimerfeldolgozók körében is sikert aratott. A munkából jelentős tudományos eredmények is születtek. A csoport kutatói vizsgálták a polimer ömledékben a feldolgozás során lejátszódó kémiai folyamatokat, a polimer szerkezete és tulajdonságai közötti össze-

függéseket, valamint a polimer ömledék stabilitását meghatározó tényezőket is. Az együttműködésben részt vett és jelenleg is részt vesz a Clariant Co. (Franciaország) adalékgyártó cég. A munka jelentős részét új stabilizátorok kifejlesztése képezi.

Az *Iván Béla* vezetésével folyó vizsgálatok főbb területei a következők:

- a kváziélő karbokationos polimerizáció tanulmányozása;
- amfifil kotérhálók: új szintéziseljárások kidolgozása, az új anyagok szerkezetének, tulajdonságainak tanulmányozása, különös tekintettel a bioanyagként történő alkalmazásra.

A kutatócsoportnak sikerült a világon elsőként alternáló hidrofíl és hidrofób láncszegmensekből viszonylag széles összetétel-tartományban *amfifil kotérhálókat* szintetizálnia. Pozitron-annihiláción alapuló új módszert dolgoztak ki és alkalmaztak az amfifil kotérhálók duzzadási dimanikájának vizsgálatára. Sejtletapadási vizsgálataik azt mutatják, hogy ezek az új anyagok másként viselkednek, mint az irodalomban eddig leírt rendszerek.

Elméleti kémiai, anyag- és molekulaszervezeti kutatások

Röntgendiffrakciós kristály- és molekulaszervezet-kutatások

Hazánkban a nemzetközi színvonalat megközelítő röntgendiffrakciós vizsgálatok az első félautomata Philips pordiffraktométer 1959-ben történt üzembe állításával kezdődhettek el. Náray-Szabó István – Sasvári Kálmán (1957), majd Kálmán Alajos (1958) csatlakozásával – a KKKI-ben újakezdte a Budapesti Műszaki Egyetemen 1947-ben megszakadt röntgendiffrakciós kutatásait. Elsősorban a többkomponensű polikristályos rendszerek (pl. talajok) diffraktometriás vizsgálatával és kvantitatív fázisanalízisük kidolgozásával foglalkozott. Tanítványai 1974–85 között a „Náray-Szabó-Péterné-Kálmán” néven leírt módszer segítségével sok ezer talajminta elemzését végezték el Magyarország agyvasványterképeinek elkészítéséhez.

A röntgendiffrakciós *kristályszerkezet-kutatásokat* a KKKI-ban honosították meg Magyarországon. Ebben fontos előrelépést jelentett az Enraf-Nonius CAD-4 típusú diffraktométer üzembe helyezése (1979). A Kelet-Európában elsőként (1979) Magyarországon elérhető, a gyógyszertervezési munkában is egyre fontosabb Cambridge Crystallographic Data Base elnevezésű adatbank – amelynek az intézet a nemzeti alközpontja – jelenleg már kétszázezernél több szerves vegyület kristályszerkezetét regisztrálja. A KKKI kutatócsoportja az elmúlt évtizedek során számos gyógyszer (pl. Arduan, Cavinton, Cimetidin,

Deprenyl, Famotidin, Morpholep, No-Spa) szerkezetét határozta meg, felhasználva az adatbázis lehetőségeit is.

1965-től az ELTE Szerves Kémiai Tanszékével alakítottak ki együttműködést, amelynek keretében az N-acil-szulfiliminekből a kén oxidációs állapotától függően létrejövő egyszeres és többszörös S-N kötések természetét tisztázták. Ezt követte a legegyszerűbb stabil spirozulfurán szerkezetének röntgendiffrakciós bizonyítása, majd az ún. „nem kötött” S...O atomkapcsolatok vizsgálata. 1970-ben kezdődött el a fémorganikus vegyületek szerkezetének kutatása. A koronaéterek kutatása fokozatosan vezetett el ahhoz a gondolathoz, mely a kristályokat szupramolekulaként kezeli. A *szupramolekuláris kémiába* beilleszthető mind a polimorfok (szupramolekuláris izomerek), mind az izostrukturális halmozatok leírása, s ez elősegítheti mind a homo-, mind a heteromolekuláris kristályokban a molekulakomplementaritás lehetséges formáinak megértését. A kutatócsoport kidolgozta az izostrukturalitás fokának heteromolekuláris rendszerekre is alkalmazható számítási módszerét. Legújabb vizsgálataik szerint a szimmetriavándorlásokkal együtt szupramolekuláris jelenségnek tekinthető a nem kristallográfiai szimmetriák megjelenése is.

NMR-spektroszkópiai kutatások

A magmágneses rezonancia- (NMR-) spektroszkópia a korszerű molekula- és anyagszerkezet-kutatás egyik legfontosabb és leggyorsabban fejlődő fizikai módszere.

Az NMR-spektroszkópiai Csoport 1964-ben alakult meg Radics Lajos vezetésével, s itt helyezték üzembe az első hazai NMR-spektrométert. A nagyszámú, eredményesen megoldott szerkezetvizsgálati feladat közül kiemelkedő jelentőségű a szubsztituált tetrahydro-izokinolinium sók térkémi törvényszerűségeinek meghatározása.

A szerkezetkutatásokban igen nagy előrelépést hozott az ország első Fourier-transzformációs, számítógép-vezérelt NMR-spektrométerének felállítása 1973-ban. 1973–84 között nagyszámú modellvegyület szisztematikus vizsgálatával elméleti és empirikus összefüggéseket állapítottak meg a szén-13 spektrumadatok és a vizsgált rendszerek kémiailag és térkémiailag jellemzői között. Úttörő vizsgálatokat végeztek az aromás kationok NMR-spektroszkópiailag sajátságainak elektron szerkezeti magyarázatával és a többszörös szubsztitúciós hatások elméleti értelmezésével összefüggésben.

Az 1980-as évek nagy technikai újdonsága a kétdimenziós NMR-spektroszkópia és a nagy mágneses tér együttes alkalmazása. Ez a technika a KKKI-ban 1985-ben vált elérhetővé az országban elsőként egy modern, 400 MHz-es,

multinukleáris NMR-spektrométer üzembe állításával. Az ezt követő időszak kutatási tevékenysége elsősorban a közepes (500–2000 Dalton) móltömegű szerves és bioorganikus molekulák teljes (3D) szerkezetének meghatározására irányult. Kiemelendők azok a kutatások, melyeket a csoport az új, természetes anyagok – antibiotikumok, alkaloidok, poliszacharidok, peptidek, kisebb proteinek stb. – teljes szerkezetmeghatározása terén végzett.

Neszmélyi András fejlesztette ki a több alapegységből álló molekulák oldatban kialakuló szerkezeteinek vizsgálatára a longitudinális *relaxációs idők* gradienst meghatározó NMR-spektroszkópiai módszert. Ezt eredményesen alkalmazták szénhidrátok, glikokonjugáltak (flavonoid- és szteroidglikozidok), lipopoliszacharidok és ciklodextrin-komplexek tanulmányozásában.

Optikai spektroszkópiai kutatások

Az optikai spektroszkópiai kutatások 1956-ban indultak meg a KKKI-ban Varsányi György vezetésével. A kísérleti infravörös (IR) spektroszkópiai munka 1957 tavaszán kezdődött meg egy *prizmás, egysugarú* infravörös spektrométerrel. Ezt a műszert 1967-től egy *diffrakciós rácsos* készülék váltotta fel. Az IR-vizsgálatokat jól kiegészítő Raman-spektroszkópiai mérések 1976-ban kezdődtek meg egy *lézergyesztéses Raman*-spektrométerrel. Jelenleg egy Fourier-transzformációs infravörös (FT-IR) és egy FT-Raman spektrométer, valamint egy gázkromatográfiás (GC) elválasztástechnikával csatolt FT-IR műszer áll a csoport rendelkezésére.

A kutatócsoport *alapkutatásokat* végzett a molekulaszervezet, a rezgésmódok és a spektrális paraméterek közötti összefüggések feltárása, illetve *alkalmazott kutatásokat* részben a hazai szerves kémiai kutatások, részben az ipar – elsősorban a gyógyszeripar – feladatainak megoldása céljából. Ez utóbbiak közül jelentősek az 1964–67-ben az ún. *klóramfenikol szabadalombitorlási per* kapcsán Holly Sándor által végzett vizsgálatok, melyek alapvetően járultak hozzá a pernek a magyar gyógyszeripar számára kedvező kimeneteléhez. A szerkezetfelderítési munkák közül a néhány ezer szteránváz (köztük a közismert *Flucinar* és *Apulein* kenőcsök hatóanyaga), a több száz izokinolin-, valamint indolváz vegyület (pl. a *Cavinton* hatóanyaga), továbbá a tiokarbamid és tioszemikarbazid származékok szerkezetmeghatározását, illetve a metabolizmuskutatásokhoz a GC/FT-IR módszer eredményeivel való hozzájárulást érdemes kiemelni.

A spektrumok részletes értelmezése céljából végzett ún. *normálkoordináta-számításokhoz* kapcsolódott az infravörös elnyelési sávok *intenzitásának* és *polarizációs* sajátságainak kísérleti és elméleti vizsgálata (Keresztury Gábor). Az

1970-es években a molekulakristályok orientált rétegeinek infravörös elnyelési spektrumait vizsgálták lineárisan polarizált fényvel, újabban pedig nematikus folyadékkristályban oldott, *uniaxiálisan orientált* molekulákat tanulmányoznak. Az észlelt sávok polarizációs viselkedését a *kvantumkémiai módszerekkel* számított erőterek felhasználásával végzett normálkoordináta-analízis eredményeivel vetették egybe. Bebizonyosodott, hogy a ma rendelkezésre álló, magasabb szintű, ún. *ab initio*, illetve *sűrűségfunkcionál*-módszerek segítségével igen közel kerülhetünk az infravörös spektrumok alapvető jellegzetességeinek gyakorlatilag teljes leírásához.

Tömegspektrometriai kutatások

A tömegspektrometriai kutatások hazánkban az 1960-as évek végén indultak meg az MTA Szerkezeti Kémiai Kutatócsoportjában Tamás József irányításával. A csoport 1972-ben került a KKKI-hez. Mára a Tömegspektrometriai Laboratórium Közép-Európa egyik legjobban felszerelt laboratóriumává vált. Az 1970–80-as években a kutatások elsősorban a *molekulák szerkezete és a tömegspektrum közötti összefüggések* megismerésére irányultak. A csoport munkájának irányítását 1995-től Vékey Károly vette át. Az 1990-es években a hangsúly áttevődött a tandem tömegspektrometriára, valamint a tömegspektrométerben lejátszódó kémiai reakciók részletes megismerésére. Idetartozik a kvantumkémiai módszerek alkalmazása, a reakciótermékek relatív kinetikus energiájának meghatározása és az ún. *kinetikus módszer modellezése*. Speciális szoftvert dolgoztak ki a tömegspektrometriás reakciók energetikai viszonyainak feltérképezésére. Munkájuk során számos szerves vegyület, foszfor- és fluorszármazék, biomolekula (peptidek, oligoszacharidok, oligonukleotidok) szerkezetét határozták meg. Hazai viszonylatban elsőként vizsgálták nagy molekulatömegű vegyületeket gyors atombombázásos (FAB), mátrixsegítette lézerdeszorpciós (MALDI) és elektronáramlásos (ES) ionizációs módszerekkel. Közreműködtek gyógyszerek hatóanyagainak, tisztaságának vizsgálatában, a minőségbiztosítás új módszereinek kidolgozásában, gyártási problémák megoldásában, farmakokinetikai mérésekben, a bioekvivalencia meghatározásában, új diagnosztikai lehetőségek kidolgozásában és a metabolitkutatásban.

Az egri Borászati Kutatóintézzel együttműködésben különböző módszereket dolgoztak ki a magyar *borok aromaanyagainak* azonosítására. Az eredményeket a borok eredetvédelmében, minőség-ellenőrzésében lehet felhasználni. Foglalkoztak muzeális viasz tárgyak, festékek kötőanyagai és enyvek tömegspektrometriás vizsgálatával is. Eredményeiket a Nemzeti Múzeum sikerrel alkalmazta

a Magyarország 1100 éves fennállásának tiszteletére megrendezett kiállítás tárgyainak restaurálásakor.

Elektronspinrezonancia-spektroszkópiai kutatások

Az ESR (Elektron Spin Rezonancia) spektroszkópiai csoport kezdetben Mohos Béla, majd Rockenbauer Antal irányításával az 1960-as évek elején honosította meg Magyarországon ezt a korszerű szerkezetvizsgálati módszert. A mérési eljárás az elektronok mágneses tulajdonságán alapul: paramágneses anyagokban a külső mágneses tér hatására szétváló energianívók között rezonanciaabszorpciót lehet létrehozni megfelelő frekvenciájú mikrohullámú sugárzás segítségével.

A szabad gyökös vizsgálatok egyik fontos célja olyan módszerek kidolgozása volt, amelyek lehetővé teszik rövid élettartamú gyökök kimutatását és azonosítását. Az ESR-csoport már évekkal a nitrogén-oxid-molekula jelentős biológiai szerepének felismerése előtt vizsgálta, hogy a molekula milyen gyökös reakciókban vehet részt, hogyan reagál különböző telítetlen szénhidrogén-vegyületekkel. A rövid élettartamú gyökökből stabilis nitroxidgyököt képező (spincspadázás) nitrozovegyületekről kimutatták azok kettős jellegét, ami a nitrozovegyületek gyökiniciáló képességében mutatkozik meg. A biofizikában széleskörűen alkalmazott pirrolidingyűrűs nitroxidvegyületek szerkezeti és konformációs tulajdonságainak elemzésére új módszert dolgoztak ki. Kifejlesztettek egy számítógépes eljárást, amely a molekulák egyes részei bonyolult mozgásainak tanulmányozására alkalmas, mivel lehetővé teszi a sok specieszből felépülő spektrumok (pl. réz-aminosavak) szétbontását. A molekuláris dinamika leírására szolgáló eljárást sikeresen alkalmazták molekulafelismerési módszerek kidolgozásánál.

Elektrondiffrakciós szerkezetkutatások

Hargittai István vezetésével 1973-tól 1979-ig az intézetben nemzetközileg is kiemelkedő színvonalú elektrondiffrakciós szerkezetkutatások folytak, amelyek a csoportnak az MTA Szervetlen Kémiai Kutatólaboratóriumhoz kerülésével szűntek meg a KKKI-ben. Az akkori munkákból kiemelendők a kén-szén és a kén-nitrogén kötés körüli forgási formáknak, illetve gyűrűkonformációknak, a szilícium- és germániumorganikus vegyületek konformációs jellegzetességeinek, valamint az alumínium- és galliumsók molekulakomplexei szerkezetének tanulmányozása során született kutatási eredmények.

Elméleti kémiai és kvantumkémiai kutatások

A kvantumkémiai kutatások meghonosítása az intézetben Ladik János nevéhez fűződik. Az 1960-as években biopolimereket (fehérjéket, DNS-t) vizsgáltak. A szerkezet-hatás összefüggések (QSAR) elméleti alapjait tisztázni kívánó kutatásokat és metodológiai vizsgálatokat is folytattak, elsősorban az elektronkorreláció figyelembevételére. Ladik János F. Martinovval (USA, illetve Svédország) közösen levezette a Löwdin-féle „extended Hartree-Fock” (EHF) módszer egyenleteinek egyszerűsített változatát. Az EHF-módszer teljes kidolgozását Mayer István végezte el.

A számítógépek elterjedésével a nemzetközi szakmai közvélemény figyelméből kiszorultak a *kémiai jelenségek kvalitatív fizikai értelmezésével* kapcsolatos szempontok, pedig ezek vizsgálata révén érthetjük meg a molekulák elektronszerkezetének alapvető vonásait olyan fogalmak segítségével, mint pl. a hibridizáció vagy az elektronegativitás. A Chemical Hamiltonian Approach (CHA) formalizmus keretében felírt energiapartícióból kiindulva Mayer Istvánnak sikerült olyan kötésrend- és vegyértékindexeket definiálnia, amelyeket könnyen meg lehet határozni egy kvantumkémiai számítás eredményei alapján, s amelyek közvetlenül megfeleltethetők a kötésrend (multiplicitás) és az atomi vegyérték kémiai fogalmának. Ezeket a paramétereket (főleg a kötésrendeket) ma már széles körben használják különböző kémiai kérdések elméleti tárgyalásánál.

Az 1970–80-as években Gyarmati István és Lengyel Sándor a termodinamika hullámelméletének alkalmazása, az elemi reakciók homogén kinetikája nemlineáris termodinamikai elméletének kidolgozása területén végzett nemzetközi színvonalú kutatásokat.

Az elméleti kémiai kutatások Lendvay Györgynek a csoporthoz való csatlakozásával a kémiai reakciók kinetikájának és dinamikájának elméleti vizsgálatával bővültek. Ezek a vizsgálatok arra hivatottak, hogy elméleti oldalról segítsék a *kémiai szerkezet és a reakcióképesség*, konkrétan a szerkezet és a reakció sebessége kapcsolatának megértését az összetett kémiai folyamatok modellezése révén. A vizsgálatok olyan, gyakorlati fontosságú területekre is kiterjednek, mint a légkörben és az égések során lejátszódó gyökreakciók kinetikája, a tömegspektrometriában előforduló ionbomlások, kis molekulák és atomok reakcióinak dinamikája, valamint az erősen gerjesztett molekulák ütközéses energiaátadási folyamatai. Az utóbbiakkal kapcsolatban megállapították, hogy a nagy rezgési energiát hordozó molekulák inert partnerrel ütközve legvalószínűbben kis energiaadagot veszítenek, de nem elhanyagolható mértékben igen nagy energiaadagok átadása is lehetséges. Meghatározták az energiaátadási valószínűség függvényalakját, melyet utóbb külföldi kísérletek is igazoltak. A folyamatban lévő

kutatások egyik legizgalmasabb problémája annak felderítése, milyen módon lehet szabályozni, hogy egy molekulának csak adott része reagáljon.

Kémiai analitikai és környezetanalitikai kutatások

A kromatográfiás, illetve a szerves mikro- és radioanalitikai kutatások az intézet megalakulásától kezdődően a szerves, később a bioorganikus kémia területéhez kapcsolódtak.

Az 1960–70-es években a radio- és a mikroanalitikai metodikai kutatások mikro- és „atmoszferikus” izotóp-gázanalitikai módszerek kifejlesztésére és automatizálására irányultak Mlinkó Sándor majd Gács István vezetésével. A szerves vegyületek szén-, hidrogén- és kéntartalmának mikroanalízisére, illetve ^{14}C , ^3H és ^{35}S izotóppal jelzett szerves vegyületek és biológiai eredetű anyagok gázfázisú radioaktivitás-mérésére kidolgozott eljárások, elvi újdonságuk mellett, gyakorlati mérés technikai háttérrel biztosították a biológiailag aktív vegyületek kutatásához.

Az 1980-as években, a korszerű folyadékszintillációs mérőberendezések megjelenésével, a folyadékszintillációs minta-előkészítés és annak automatizálása került a középpontba. A kutatócsoport által a ^{14}C és/vagy ^3H izotóppal jelzett, biológiai eredetű minták radioaktivitás-mérésére kidolgozott eljárást és berendezést számos izotóplaboratórium jelenleg is használja. Ugyancsak bel- és külföldi gyakorlati alkalmazást nyert az élelmiszerek természetes tríciumtartalmának folyadékszintillációs ellenőrzésére kifejlesztett *automatikus minta-előkészítő* berendezés.

1993-ban a Kromatográfiás Csoport kivált a Bioorganikus Kémiai Osztályból, és önálló szervezeti egységként működött tovább. Az intézeti folyadék- és gáz-kromatográfiás szolgáltatási feladatok ellátása mellett a csoport fő kutatási területe a *kémiai szerkezet és kromatográfiás retenció* közötti összefüggések vizsgálata lett. A későbbiekben a következő témákat indították: új, nagy teljesítményű folyadékkromatográfiás oszloptöltetek fejlesztése, elválasztási sajátságaik felderítése és alkalmazásuk a gyógyszer-, a környezetvédelmi és az élelmiszer-analitikában, többváltozós matematikai-statisztikai módszerek alkalmazása a kromatográfiás adatértékelésben, valamint molekuláris kölcsönhatások kromatográfiás vizsgálatának lehetőségei. A kutatásokat korábban Vajda Miklós irányította, majd Valkó Klára, jelenleg Forgácsné Tóth Eszter vezeti. Az 1990-es évek elejére a csoport kutatóinak sikerült megvalósítani egy ún. on-valve mintadúsítási technikát. Ennek révén új, egyszerű környezetanalitikai eljárásokat dolgoztak ki.

A Környezetkémiai és Korrózióvédelmi Laboratóriumot 1997-ben akkreditálták.

Informatikai fejlesztés és szolgáltatás

Az intézeti számítógépes hálózat kifejlesztésének első terveit és lépéseit Neszmélyi András dolgozta ki, illetve tette meg. Az informatikai színvonalban döntő változást hozott az 1990-es években több ütemben kiépült helyi hálózat. Nagy sebességű optikai gerincre csatlakozva mintegy 300 számítógép működik a helyi hálózatban, amely kapcsolódik az internethez is. A hálózat üzemeltetését és karbantartását a Kémiai Informatikai és Számítástechnikai Csoport végzi (vezető: Radnai Tamás). A csoport feladata a hálózati felügyeleten kívül az intézeti, egyetemek közötti, országos és nemzetközi szintű informatikai szolgáltatás biztosítása is. Ezek között megemlíthető a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetemmel, a Semmelweis Egyetemmel, az Eötvös Loránd Tudományegyetemmel, a debreceni és a szegedi egyetemmel megalakított Chemical Abstracts Hungary elnevezésű konzorcium. Az intézet honlapján keresztül a Chemonet Egyesülettel közösen rendszeresen közzéteszik az országos érdeklődésre számot tartó kémiai vonatkozású információkat. Működtetik továbbá a nemzetközi fotokémiai és fotobiológiai adatbázisokat is.

A kutatási eredmények ipari alkalmazása

Az intézet az 1970–80-as években évente mintegy 10–20 *intézeti tulajdonú* szabadalmat jelentett be Magyarországon. Ez a szám azután fokozatosan csökkent, jelenleg csupán 1–3 bejelentés születik évente. Ennek oka részben a vállalati szerződések számának csökkenése, részben a megbízók ragaszkodása a szerződéses kutatások eredményeként létrejövő szellemi tulajdon kizárólagos birtoklásához.

A KKKI-ben létrehozott szellemi termékek jelentős hasznot eredményeztek mind az iparban, mind a mezőgazdaságban. Példaként csak néhányat említünk meg. Jelenleg is részt vesz az intézet a HEVIZOS márkanévű *Herpes-vírus* elleni kenőcskészítmény előállításában, amelyet a BIOGAL Gyógyszergyár forgalmaz. A gyógyszer 1986 óta kapható hazánkban és számos más országban is. A *kukorica növényvédelmében* kiválóan hasznosítható MG–191 számú vegyület szabadalmát a MONSANTO Co. (USA) vásárolta meg. Magyarországon mintegy 40 vállalatnál, de több más országban is kiváló eredménnyel alkalmazzák az ipari hűtővizek okozta korrózió gátlására azokat a CORIN márkanévű *inhibitorokat*, amelyeket a KKKI-ben fejlesztettek ki. A FERROCOMP olyan vaskészítmény, amely kis dózisban és mellékhatásmentesen igen rövid idő alatt gyógyítja a *vér-szegénységet*. Már 5 éve kapható a patikákban. A zeolittartalmú kőzetekből nyert

töltettel működő, *szennyvizek tisztítására* kidolgozott ZEOFLOCC eljárást Ausztriában, Svédországban, Németországban és Ausztráliában is alkalmazzák. Sikerrel oldották meg motorhajtó anyagok paraffinmentesítését. A katalizátor-adalékokat és a módszert a MOL Rt. hasznosítja.

Az említett, illetve további megvalósított szabadalmak, know-how-k révén előállított termékek becsült forgalma éves szinten átlagosan mintegy 1,5 milliárd Ft.

Kutatói továbbképzés, felsőoktatás, tudományos és állami elismerések

Az MTA kutatóintézeteinek alapvető feladata: *nemzetközi színvonalú tudományos kutatások végzése*. Az intézet vezetői azonban mindig is hangsúlyozták a felsőoktatásban és a posztgraduális képzésben való részvétel szükségességét.

A KKKI 1971-ben az elsők között vezette be azt a „disszertáns-rendszert”, amely a végzett diplomások felvételét szigorú felvételi vizsgához kötötte, és folyamatos szakmai, továbbá nyelvi továbbképzést írt elő. Az 1980-as évektől kezdve egyre több és több kutató vezetett fő- és speciális kollégiumokat, laboratóriumi gyakorlatokat az egyetemeken. Nőtt a diplomamunkát az intézetben készítő egyetemi hallgatók száma, s a kutatók részt vettek a Budapesti Műszaki Egyetem (BME) mérnök-továbbképzési programjaiban is. Elsősorban a BME-vel, valamint az Eötvös Loránd Tudományegyetemmel (ELTE) jöttek létre szoros kapcsolatok, amelyeket már 1976-ban szerződéssel intézményesítettek. Számos közös publikáció (jelenleg is évente mintegy 20-30) mutatja, hogy nemcsak az oktatás, hanem a kutatás területén is eredményes az együttműködés. Az 1990-es évek közepén az intézet megújította szerződéseit a BME-vel és az ELTE-vel, ezáltal intézményesítette együttműködéseit az oktatómunka, a doktoranduszképzés és a kutatás területén. A KKKI több kutatója tagja az egyetemek doktori tanácsainak.

Az intézet és az említett egyetemek öt *közös kutatólaboratóriumot* hoztak létre. Ezek a fizikai kémia, a kémiai technológia, a műanyagkémia, az elektronspinrezonancia-kutatások és a neurokémia területén működnek. Kutatóik közül összesen 38-an oktatnak egyetemeken, többen közülük habilitált doktorai a felsőoktatási intézményeknek. Az 1990-es évek végére a KKKI-ben 40 PhD-ösztöndíjas dolgozik. 1997-től kezdődően indította el az intézet *post doc programját*, amely évente 5-6 tehetséges fiatal kutatónak biztosít további lehetőségeket a tudományos pályán.

Az intézet azon kutatói közül, akik jelenleg is itt dolgoznak, illetve innen mentek nyugdíjba, az *MTA levelező, valamint rendes tagja* Bérces Tibor (1993, 1998), Dénes Géza (1973, 1985), Gyarmati István (1982, 1990), Holló János

(1967, 1976), Kálmán Alajos (1995), Márta Ferenc (1970, 1976), Pálinkás Gábor (1995), Schay Géza († 1991) (1945, 1954) és Szántay Csaba (1970, 1982). *Akadémiai Díjat* kapott Bérces Tibor (1980), Dénes Géza (1967), Gál Dezső (1985), Gyarmati István (1970), Holló János (1963), Kalló Dénes (1983), Kálmán Alajos (1975), Márta Ferenc (1969), Mayer István (1998), Ötvös László (1961), Pálinkás Gábor (1992) és Tömösközi István (1983). *Széchenyi-díjat* kapott Kálmán Alajos (1994), Ötvös László (1990) és Szántay Csaba (1999), Kossuth-díjat pedig Schay Géza (1952, 1956).

Állami Díjban részesült Bérces Tibor (1985), Földes Péterné (1978), Gyarmati István (1975), Holló János (1975), Márta Ferenc (1985) és Szántay Csaba (1975). A *Magyar Köztársasági Érdemrend középkeresztjével* tüntették ki Szántay Csabát (1996), tiszti keresztjével pedig Gál Dezsőt (1996). A *Magyar Népköztársaság Babérkoszorúval Díszített Zászlórendjét* Márta Ferenc (1989) és Schay Géza (1985) kapta meg, a *Magyar Népköztársasági Érdemrend V. fokozatával* Holló Jánost (1952) és Schay Gézát (1951) tüntették ki.

Az intézet számos kutatója részesült külföldi akadémiai, illetve egyetemi elismerésben. Így Holló János a Finn (1984), a Német (1984) és a Lengyel (1991) Tudományos Akadémia külső tagja, a Francia Akadémia Pálmarend-lovagja (1968), továbbá díszdoktora a Bécsi Műszaki Egyetemnek (1973), a Berlin Charlottenburgi Műszaki Egyetemnek (1984), a Budapesti Műszaki Egyetemnek (1991) és a Kertészeti és Élelmiszer-ipari Egyetemnek (1991). Márta Ferenc külső tagja az Orosz és a Cseh Tudományos Akadémiáknak, tiszteletbeli doktora az Odesszai Állami Egyetemnek (1975) és díszdoktora a József Attila Tudományegyetemnek (1999), Kalló Dénes a Veszprémi Vegyipari Egyetem (1999), Pálinkás Gábor a BME díszdoktora (2000), Schay Géza pedig külső tagja volt az NDK Tudományos Akadémiájának, díszdoktora a BME-nek (1982) és megkapta az *Ordre pour Mérite de Recherche et Invention* parancsnoki keresztjét (1963).

Nemzetközi kapcsolatok

Az 1950-es években az intézetnek csupán a Szovjetunióval, illetve a kelet-európai országokkal lehettek tudományos kapcsolatai. Az 1960-as években kezdett kiépülni az együttműködés a nyugati országokkal. A következő évtized közepétől a KKKI-ben működött a szocialista országok oxidációs vizsgálatok céljára létesített bázislaboratóriuma.

Az intézet kiváló nemzetközi kapcsolatainak is köszönhető, hogy az 1980-as évek közepétől az 1990-es évek közepéig tartó, gazdaságilag igen nehéz időket tudományos kutatási kapacitásának megőrzésével, sőt bizonyos fokú minőségi fejlesztésével vészelhette át.

Az intézet munkatársai számos nemzetközi szervezetben töltenek be vezető pozíciókat. Így pl. a következőkben: International Society of Electrochemistry, International Committee on Natural Zeolites, International Isotope Society, International Society for the Study of Xenobiotics, IUPAC Chemical Kinetics, Organic Chemistry Commission, European Society for Photobiology, European Federation of Corrosion, European Society for Mass Spectrometry, több COST Bizottság stb. Tizenöten tevékenykednek 24 nemzetközi folyóirat szerkesztőbizottságában, öten szerkesztőként, illetve főszerkesztőként.

Az elmúlt két évtizedben mintegy 50-60 együttműködési témát kutattak külföldi kollégákkal közösen. Számos közösen megjelentetett publikációt eredményeztek például az *oldatszerkezet-kutatás* területén a mainzi Max Planck Intézettel (Németország), a *makromolekuláris* kémiában az Akroni Egyetemmel (USA), a *spektroszkópia* területén a Rudjer Boscovič Intézettel (Zágráb, Horvátország), a belgiumi (Leuven) Katolikus Egyetemmel *zeolitikutató*sokban, a CNRS Természetes Szerves Anyagok Intézetével (Gif-sur-Yvette, Franciaország) *kémiai szerkezetvizsgálatok és természetes vegyületek szintézise* témákban, az elméleti kémiában a North Western Egyetemmel (USA), a *kinetika és katalíziskutatásban* a CNRS Molekuláris Anyagok Laboratóriumával (Thiais, Franciaország) és a Kémiai Fizikai Intézettel (Moszkva, Oroszország), a *fémorganikus* kémiai kutatások területén a Texasi Egyetemmel (USA), a *koronaéter*-kutatásokban a Regensburgi Egyetemmel és a *heterociklusos* vegyületek röntgendiffrakciós vizsgálata területén a Novi Sad-i Egyetemmel folytatott együttműködések.

Az 1990-es évektől kezdődően az intézet erőteljesen bekapcsolódott a nemzetközi tudományos és kutatási alapítványok pályázataiba. Évente mintegy 3-4 új, nagy, nemzetközi projectnek résztvevői (pl. a COST, PHARE, INCO-COPERNICUS, EU-4, EU-5 Framework, ACCORD stb. programokban).

A legutóbbi évtizedben az intézet igyekszik egyre aktívabban részt venni a külföldi székhelyű gyógyszeripari és vegyipari vállalatok fejlesztési problémáinak megoldásában. Mind a szakmai, mind a pénzügyi vonatkozásokat tekintve különösen jelentősek a Höchst AG, a Fluntera AG (Németország), a Clariant GmbH (Franciaország, Svájc, Németország), az Air Products & Chemicals Inc. (US), a RICE Friuli Ric. Chim. (Olaszország), a W. R. Grace Co. (US), DuPont (US) cégekkel folytatott közös munkák.

★

A KKKI igazgatóságának *szervezetirányítási politikája* mindig is a tudományos értekeknek igyekezett prioritást adni. Ezt szolgálta az 1975-ben bevezetett intézeti működési rend, amely több átalakításon ment át az idők folyamán, de lényegét

tekintve ma is érvényes. Az említett irányítási rendszernek legfontosabb kezdeményezése az volt, hogy a tudományos szervezeti egységeket a kutatások eredményeit felmutató publikációk számának, a megjelenés helyének, valamint a közlemények visszhangjának (az idézeteknek) a figyelembevételével értékelje, és az akadémiai támogatás jelentős részét az említettek alapján ossza szét. A KKKI belső tudományos életében igen fontos rendezvény az évente megtartott Intézeti Szakmai Napok.

Az intézet kutatói mintegy 220-260 tudományos publikációt jelentetnek meg évente. Az 1980-as években ezeknek mintegy 70%-a, az elmúlt évtizedben pedig mintegy 80%-a a kémia tudományának legjobb nemzetközi folyóirataiban látott napvilágot. Évente mintegy 1400 független idézet tanúsítja az intézet kutatói által publikált információk nemzetközi hatását.

KÉMIAI KUTATÓKÖZPONT

Anyag- és Környezetkémiai Kutatólaboratórium

Írta

Szépvolgyi János

MTA KÉMIAI KUTATÓKÖZPONT
ANYAG- ÉS KÖRNYEZETKÉMIAI KUTATÓLABORATÓRIUM

Igazgató: Szépvölgyi János
1025 Budapest Pusztaszeri út 59/67.

Telefon: 325-7896

Fax: 325-7892

Postai cím: 1525 Budapest Pf. 17

E-mail: szepevol@chemres.hu

Honlap: <http://www.chemres.hu/akkl>

Kutatók száma: 20

a tudomány doktorainak és az MTA doktorainak száma: 5

a kandidátusok száma: 6

a PhD-fokozattal rendelkezők száma: 2

a 35 év alatti kutatók száma: 5

PERIODIKÁK:

Az MTA KK AKKL évkönyve (évente)

TUDOMÁNYOS RÉSZLEGEK:

Anyagkémiai Osztály, Környezetkémiai Osztály

A kutatólaboratórium megalakulása és története

A jelenlegi intézmény az MTA Kémiai Kutatóközpont Anyag- és Környezetkémiai Kutatólaboratóriuma (AKKL) 1998. január 1-jén alakult meg, az akadémiai kutatóhálózat konszolidációjának keretében. (A laboratórium a Kémiai Intézet épületében kapott helyet.) Az intézet története ugyanakkor 1955-ig nyúlik vissza: ekkor jött létre az ELTE-n az MTA Szeretlen Kémiai Tanszéki Kutatócsoportja Lengyel Béla vezetésével. A kutatócsoportot 1973-ban az MTA Központi Kémiai Kutatóintézet Szeretlen Kémiai Osztályává szervezték át. Ebből az osztályból fejlődött ki és alakult meg 1976-ban az MTA TTKL Szeretlen Kémiai Kutatólaboratóriuma (SZKKL). Az SZKKL 1997 végéig működött, amikor is jogutódként létrejött az AKKL.

Az SZKKL tudományos igazgatója 1976–93 között Székely Tamás, 1994–97 között Szépvölgyi János volt. Az AKKL igazgatója Szépvölgyi János.

Az 1975-ös alapító okirat szerint az intézet feladata tudományos kutatások végzése kondenzált fázisok (szilárd testek) belsejében és felületén lejátszódó kémiai folyamatok megismerése céljából. A feladatkör illetően megfogalmazása, amely nagymértékben támaszkodott a korábbi szakmai előzményekre, hosszabb időn keresztül megfelelő keretet biztosított a kutatómunkához.

Ami a szakmai előzményeket illeti: Lengyel Béla üvegszerkezeti kutatásaiból kiindulva, az 1950-es években kezdődött hazánkban a szilikátok, valamint a szerves sziloxánok kutatása. Ez később más szeretlen polimer rendszerek szintézisével és szerkezetük, valamint tulajdonságaik vizsgálatával egészült ki. A modellanyagok nagy termikus stabilitása és bonyolult szerkezete szükségessé tette a kísérleti, elsősorban is a termikus anyagvizsgálati módszerek fejlesztését. Ennek kapcsán honosodott meg az intézetben a termogravimetria-tömegspektrometria (TG-MS), továbbá a pirolízis-gázkromatográfia-tömegspektrometria (Py-GC-MS).

Ezeket a módszereket a későbbiekben szintetikus szerves polimerek, szénfeleségek és biomasszák szerkezetkutatásában is alkalmazták. A kutatások metodikai súlyát növelte, hogy saját hardver- és szoftverfejlesztések eredményeként mód nyílt reakciókinetikai vizsgálatok végzésére is.

Erdey-Grúz Tibor, majd Dévay József elektródfolyamat-kinetikai munkáiból indult ki az eredetileg Veszprémben, majd az SZKKL keretében működő Elektrokémiai Kutatócsoport tevékenysége. A munkák gerincét kezdetben az elektrokémiai folyamatok kinetikájának leírása és mechanizmusának felderítése képezte. A későbbiekben – gyakorlati igényeket is szem előtt tartva – a korrózió elleni védelemmel kapcsolatos, továbbá egyes anyagi rendszerek elektrokémiai tulajdonságainak felderítésére irányuló kutatások kerültek előtérbe. A vázolt tudományos célok elérése érdekében speciális, elsősorban a Faraday-torzítás és az elektródimpedancia mérésére alapozott elektrokémiai mérőműszereket és eszközöket is kifejlesztettek.

Az 1970-es évek elején a Szervetlen Kémiai Tanszéki Kutatócsoport foglalkozni kezdett néhány elméleti és gyakorlati szempontból egyaránt fontos szervetlen szilárd anyag szintézisével, a felületi sajátságok és a reaktivitás összefüggésének elméleti vizsgálatával. Az anyagszintézissel kapcsolatos kutatások első modelljei a halogenideken keresztül megvalósuló transzportfolyamatok voltak.

Az SZKKL-ben az 1980-as évek második felében kezdődtek meg a hazai plazmakémiai kutatások, amelyek során először különleges tulajdonságú, nanodiszperz kerámiaporok termikus plazmában történő előállításának kémiai és műveleti kérdéseit tanulmányozták. A kutatások célja a termikus plazmában lejátszódó kémiai folyamatok értelmezése, a szintézis paraméterei és a termékjellemzők közötti kapcsolatok felderítése volt.

A fenti témák nagy részénél a tudományos közelítésmód fontos feltétele volt a reakciókban szereplő vagy azokban keletkező szilárdtestek felületi összetételének, elektronszerkezetének és reaktivitásának jellemzése. E célból az SZKKL-ben bevezették az XPS (ESCA) módszert. A konkrét feladatok megoldásán túlmenően a kutatások kiterjedtek az XPS módszer továbbfejlesztésére is, elsősorban a mennyiségi jellemzésre, valamint egyenetlen felületek, továbbá porminták vizsgálatára irányulóan.

Az 1980-as évek elején indultak meg az SZKKL-ben azok a kutatások, amelyek néhány, mennyisége és/vagy minősége miatt fontos környezetterhelő anyag (kohászati hulladékok, vörösiszap, galvániszap, színesfémalakok) feldolgozási, valamint ártalmatlanítási technológiáinak megalapozását tűzték ki célul.

Az évtized végére ugyanakkor mind nyilvánvalóbbá vált, hogy a művelt tudományterületek belső fejlődése és a kutatások finanszírozásában bekövetkezett változások miatt az intézet kutatási tematikáját tovább kell korszerűsíteni. A kutatások súlypontja az 1990-es évek elejétől ezért mindinkább az anyagtudomány és a környezetvédelem egyes kémiai problémáinak vizsgálata felé tolódott el. E változások tükröződnek az AKKL nevének megválasztásában, valamint az intézet alapító okiratában is.

Az AKKL-t az MTA azzal a céllal hozta létre 1998-ban, hogy az intézet az anyag- és környezeti kémiai kutatások területén eredményes és gazdaságos kutatási tevékenységet folytasson, kihasználva a Kémiai Kutatóközpont nyújtotta szakmai együttműködési és gazdasági előnyöket.

Az AKKL-ben a kutatások két osztály, az Anyagkémiai Osztály (vezetője Szépvölgyi János) és a Környezetkémiai Osztály (vezetője Várhegyi Gábor) keretei között folynak. Az előbbi osztályon három (Felületkémiai, Elektrokémiai és Korróziós, valamint Plazma- és Lézerkémiai) az utóbbin belül két (Környezettechnikai, valamint Termoanalitikai) csoport működik. A kutatólaboratóriumban jelenleg tevékenykedő vezető kutatók: Bertóti Imre, a kémiai tudomány doktora, Blaszó Marianne, a kémiai tudomány doktora, Lengyel Béla, a kémiai tudomány doktora, Mink György, a kémiai tudomány kandidátusa, Nemes László, a kémiai tudomány doktora, Szépvölgyi János, a kémiai tudomány kandidátusa, Várhegyi Gábor, a kémiai tudomány doktora.

Az AKKL létszáma 25, ebből 20 kutató.

Kutatási célkitűzések

Az AKKL-ben folyó anyagtudományi és anyagtechnológiai kutatások – célszerűen kiválasztott modellek esetén – az anyagok összetétele, mikroszerkezete, tulajdonsága és előállítási módja közötti kapcsolatrendszer egyes kémiai részleteinek feltárására irányulnak. A vizsgálatok kiterjednek az összetétel, a szerkezet és a tulajdonságok alkalmazás, illetve felhasználás közbeni változásaira is. A környezeti kémiai kutatások célja olyan kémiai és fizikai-kémiai összefüggések feltárása, amelyek elősegítik a természeti környezetet az eddigieknél kevésbé vagy elhanyagolható mértékben terhelő termékek, eljárások és technológiák megalkotását, mindenekelőtt a hulladékkezelés és -feldolgozás, továbbá az energia-termelés és -felhasználás területén.

Az anyagtudományban az utóbbi években jelentős eltolódás tapasztalható az ún. nanoszerkezetek kutatásának irányába. Ezek olyan anyagi rendszerek, amelyek jellemző méretei az 1–1000 nm ($1 \text{ nm} = 10^{-9} \text{ m}$) tartományba, ennek is az alsó szegmensébe esnek. Méretükből és tulajdonságaikból adódóan különleges funkciók megvalósítására képesek. Az AKKL-ben folyó anyagkémiai kutatások főként ilyen típusú anyagok létrehozására és vizsgálatára irányulnak, a következő területeken:

- gyorsított ion- és atomsugarakkal létrehozott felületi reakciók tanulmányozása,

– nanoméretű kerámia- és fémporok szintézise és kezelése termikus plazmában,

– lézerrel keltett grafitplazmák és egyenáramú plazmakisülések vizsgálata.

A környezetkémiai kutatások fő célja szélesebb értelemben a különböző anyagok környezetre gyakorolt hatásainak felderítése és megértése, majd az így szerzett ismeretekre alapozva a káros környezeti hatások minimalizálása, tudományos, műszaki, gazdasági és környezeti szempontok együttes figyelembevételével. Az AKKL kutatói által folytatott kutatások jól illeszkednek ehhez az értelemezéshez. Az anyagtudományi és a környezetkémiai kutatások közötti átmenetet azok a témák képviselik, amelyek az elektródimpedancia-spektroszkópia és egyéb váltóáramú módszerek alkalmazására irányulnak a korróziós folyamatok vizsgálatában. Kifejezetten környezetkémiai vonatkozásúak a következő témák:

– ásványi szenek környezetbarát erőműi tüzelésének és biomasszaanyagok energetikai hasznosításának megalapozása,

– polimerek hőbomlási reakcióinak, valamint veszélyes hulladékok termikus plazmában történő kezelésének tanulmányozása,

– nagy hatékonyságú napenergiás módszerek kutatása és fejlesztése.

Az anyagtudomány és a környezettudomány feladatait, lehetőségeit és perspektíváit, valamint a kémiának ezekben játszott szerepét tekintve kellően indokoltnak tűnik az intézet azon szándéka, hogy hosszabb távon is e két tudományterületen kíván tevékenykedni. A konkrét kutatási témák természetesen folyamatosan változnak szakmai, kutatásszervezési és kutatásirányítási okokból is. A Kémiai Kutatóközpont működése kedvező feltételeket teremt interdiszciplináris, a kémia és a társtudományok több területét átfogó kutatási projektek indítására.

Jelentősebb eredmények

Az intézetben folyó kutatások lényeges vonása, hogy a tudományos problémákat komplex módon, többféle kísérleti technika együttes alkalmazásával igyekeznek megoldani. Ezért mindig is nagy súlyt helyeztek a kísérleti lehetőségek bővítésére, kutatási infrastruktúrájuk folyamatos korszerűsítésére. Az utóbbi években három jelentősebb metodikai fejlesztést hajtottak végre az intézetben:

– továbbfejlesztették a felületmódosítási és felületvizsgálati kísérleti lehetőségeket;

– üzembe helyeztek egy olyan termikus plazmareaktort, amelyben nagylaboratóriumi léptékben lehet plazmakémiai és technológiai kutatásokat végezni;

– megépítettek egy speciális, nagynyomású mérésekre alkalmas termikus vizsgálati berendezést.

Az AKKL jelentősebb eredményei közé tartozik a szilárd testek felületi sajátságai és reaktivitása közötti összefüggések számos részletének felderítése, különböző modellek esetén. Elsők között mutatták ki, hogy a gázok elválásztására szolgáló polimer membránok szelektivitása részecskesugaras kezeléssel megnövelhető. Különböző szervesetlen anyagi rendszerek (pl. fémek és fémoxidok) esetében értelmezték a felület ion- és atomsugaras bombázása során lejátszódó kémiai és anyagszerkezeti változásokat.

Az elektrokémiai kutatások során figyelemre méltó eredmények születtek a korróziós folyamatok mechanizmusának és kinetikájának mérésére alkalmas, az elektródfolyamatokat elhanyagolható mértékben zavaró módszerek megalapozásában és továbbfejlesztésében.

Bizonyították, hogy a nagyfrekvenciás termikus plazmák alkalmasak különleges szerkezetű és tulajdonságú kerámia- és fémporok előállítására, és hogy az így kapott, nanoméretű kerámiaporokból nagy hőállóságú és mechanikai szilárdságú szerkezetű kerámiák készíthetők.

Természetes és szerves makromolekulák hőbomlásának kutatása kapcsán jelentős eredménynek tekinthetők a folyamatok finom részleteinek megismerésére alkalmas metodikai fejlesztések, továbbá azok az elméleti és kísérleti megállapítások, amelyek a vizsgált rendszerekben lezajló átalakulások mechanizmusának és kinetikájának számos lényeges aspektusára vonatkoznak.

Új elven, a korábbiaknál jobb energiahasznosítási fokkal működő napenergiás desztillációs berendezést fejlesztettek ki, és meghatározták annak műveleti és technológiai jellemzőit.

A kutatólaboratórium helye a tudományos életben

Mindkét hivatkozott alapító okirat az intézet feladatául tűzte ki, hogy aktívan működjék közre az alapkutatási eredmények gyakorlati hasznosításában. E tevékenység különösen az 1980-as években volt igen intenzív: az intézet ebben az időszakban több mint 30 szolgálati szabadalom tulajdonosa volt. Az ezekben leírt anyagok és eljárások jelentős hányadát iparilag is előállították, illetve megvalósították.

A hazai iparban a rendszerváltást követő változások nagymértékben visszavették az intézet tudományos eredményeinek hazai gyakorlati hasznosítását. Az utóbbi években némi javulás tapasztalható e vonatkozásban, elsősorban néhány nagyvállalattal (GE-TUNGSRAM, IKARUS, DUNAFERR) kialakított kutatási-fejlesztési együttműködés eredményeként.

Az intézet az alapításától kezdve jelentős szerepet játszott a hazai szerves kémiai, majd később az anyagtudományi és környezetkémiai kutatásokban. Az intézet kutatói az MTA számos tudományos bizottságában, illetve munkabizottságában tevékenykedtek, illetve tevékenykednek, sok esetben vezető (elnöki, illetve titkári) pozícióban. Ezenkívül más hazai szakmai szervezetek munkájában is tevőlegesen működnek közre. A hazai kémiai kultúra fejlesztéséhez az egyetemi és a posztgraduális képzésben való részvétellel, továbbá a szélesebb közvéleménynek szánt tanulmányok megjelentetésével járulnak hozzá.

Az AKKL-ben jelenleg dolgozó 19 kutató közül öten a kémiai tudományok doktori, heten kandidátusi, illetve PhD-fokozattal rendelkeznek. Szakterületükön valamennyien elismert szakemberek. Erre utal, hogy rendszeres felkérést kapnak a tudományos minősítésben való közreműködésre, akár mint bírálók, akár mint bizottsági tagok. Egyik munkatársunkat az Országos Találmányi Hivatal elnöke a Kiváló Feltalálói Díj aranyfokozatával tüntetette ki.

A nemzetközi szakmai elismertség egyik jeleként az AKKL munkatársait több ízben kérték fel nemzetközi tudományos konferenciákon plenáris, illetve meghívott előadások megtartására. Az intézet kutatói tagok több nemzetközi szakmai szervezetben (American Institute of Chemical Engineers, International Solar Energy Society, FEANI, The Combustion Institute), valamint nemzetközi folyóiratok (*Surface Engineering, Journal of Analytical and Applied Pyrolysis, Fullerene Science and Technology*) szerkesztőbizottságaiban is tevékenykednek.

Oktatás, tudományos továbbképzés

Az intézet kutatói hosszabb idő óta részt vesznek az egyetemi oktatásban is: több egyetemen (BME, ELTE, VE) tartanak előadásokat, speciálkollégiumokat, vezetnek laboratóriumi gyakorlatokat, és témavezetőként diploma-, valamint PhD-dolgozatok elkészítését irányítják. Az intézet és a BME Vegyészmérnöki Kara 1995-ben együttműködési megállapodást kötött a korábbi informális kapcsolatok szervezetté tétele érdekében. A megállapodás a kutatók egyetemi oktatásban való részvételére, közös laboratóriumok létrehozására, valamint közös kutatási projektek indítására terjed ki. A BME és a kutatólaboratórium 1997-ben közösen létrehozták a hazai felületmérnök-képzés bázislaboratóriumát, amely az AKKL-ben működik. A konzorciumhoz a veszprémi, a miskolci és a soproni egyetem is csatlakozott. 1999 elejétől az AKKL a Veszprémi Egyetem Szilikát- és Anyagmérnöki Tanszékének társintézeteként mint az egyetem kihelyezett tanszéke is funkcionál.

Nemzetközi kapcsolatok

A külföldi kutatóhelyekkel való együttműködés már az 1970-es évektől fontos eleme volt a kutatólaboratóriumban folyó szakmai munkának. Ezek az együttműködések lehetőséget adtak arra, hogy a kutatók hozzájussanak olyan metodikákhoz, amelyek Magyarországon nem álltak rendelkezésre, továbbá hogy bővüljenek a nemzetközi tudományos közösségbe történő beilleszkedéshez elengedhetetlenül szükséges formális és informális kapcsolatok.

Az 1970-es éveket e vonatkozásban elsősorban a kétoldalú (akadémiák közötti) együttműködések jellemezték. Később több, az UNIDO, illetve az OMFB által szponzorált kutatási programban vettek részt. Az 1990-es években viszont főként az európai közösségi programok biztosítottak szervezeti és nem utolsósorban anyagi háttérrel a kutatási együttműködésekhez. 1992–99 között hét EU (PECO, COPERNICUS, INCO, TEMPUS) kutatási programban vett részt partnerként a kutatólaboratórium. Ezenkívül számos kétoldalú (MTA–CNR, CNRS, DFG, MITI) és egyéb (US–Hungarian, USAID) programban is közreműködtek a kutatólaboratórium kutatói.

A vendégkutatóknak és ismert szakembereknek az intézetben tett látogatásai, az AKKL kutatóinak külföldi tanulmányújtjai és rendszeres részvételük a nemzetközi konferenciákon ugyancsak a kapcsolatrendszer fontos elemei közé tartoznak.

★

Az AKKL munkatársai által elért tudományos-szakmai, valamint metodika-fejlesztési eredmények, a szakmai továbbképzésben és minősítésben elért sikerek ismeretében joggal állítható, hogy az intézmény eddig messzemenően megfelelt az alapításakor megfogalmazott elvárásoknak. Jelentős mértékben és magas színvonalon járult hozzá a szervesen kémiai, az anyagtudomány és környezettudomány egyes kutatási és fejlesztési problémáinak megoldásához. A kutatólaboratórium történetének elmúlt 24 évében az ott dolgozó közösség mind szakmai, mind gazdasági vonatkozásban bizonyította életképességét, azt, hogy gyorsan és megfelelően képes reagálni a belső és külső körülmények változásaira.

KÉMIAI KUTATÓKÖZPONT

Izotóp- és Felületkémiái Intézet

Írta

Tétényi Pál

MTA KÉMIAI KUTATÓKÖZPONT
IZOTÓP- ÉS FELÜLETKÉMIAI INTÉZET

Igazgató: Wojnárovits László
1121 Budapest Konkoly-Thege u. 29-33.

Telefon: 392-2222

Fax: 392-2533

Postai cím: 1525 Budapest Pf. 77

E-mail: wojn@alpha0.iki.kfki.hu

Honlap: <http://www.iki.kfki.hu>

Tudományos Tanács. Elnöke: Schay Zoltán

Kutatók száma: 59

az akadémikusok száma: 1

a tudomány doktorainak és az MTA doktorainak száma: 13

a kandidátusok száma: 13

a PhD-fokozattal rendelkezők száma: 7

a 35 év alatti kutatók száma: 18

TUDOMÁNYOS RÉSZLEGEK:

Felületkémiiai és Katalizátorkutató Osztály, Katalízis- és
Nyomjelzéstechnikai Osztály, Nukleáris Kutatások Osztálya,
Sugárhatáskémiai Osztály, Spektroszkópiiai Osztály,
Sugárbiztonsági Osztály

Az intézet megalakulása és működése

Magyarországon 1954-ben kezdődött meg a mesterséges radioaktív izotópok alkalmazása importált izotópokkal. Az alkalmazás néhány év alatt elérte a tudományos kutatás, az orvosi gyakorlat (diagnosztika és terápia) és a gazdaság (ipar és mezőgazdaság) területét.

Az izotópok importálásával és a felhasználókhoz történő eljuttatásával a Magyar Tudományos Akadémia Matematikai és Fizikai Osztályának Szaktitkarságán dolgozó fizikus, Veres Árpád foglalkozott. Vezetésével néhány év alatt egy kis csoport alakult ki, amely az Országos Onkológiai Intézetben működött az 1955-ben alakult Országos Atomenergia-bizottság (OAB), illetve annak Izotópalkalmazási Szakbizottsága felügyeletével (elnök: Straub F. Brunó akadémikus). A csoport teljes körű nyilvántartást vezetett az országba behozott izotópokról, amelyek importját – a felhasználási cél ismeretében – az Izotóppalkalmazási Szakbizottság engedélyezte. Így megfelelő áttekintése is volt az országban folyó izotóppalkalmazási tevékenységről.

Az Országos Atomenergia-bizottság vezetői az izotópok alkalmazását a műszaki haladás fontos eszközének tekintették, ezért a bizottság elnökségének 1959 júniusában elfogadott határozatával 1959. augusztus 1-jével megalakult az OAB *Izotópelosztó Intézete*. Az ezt létrehozó OAB-elnökségi határozat szerint az intézetnek a hazai izotóppalkalmazás bázisává kell válnia: folytatni az ország ellátását izotópokkal, országos izotópnnyilvántartást vezetni, támogatni az izotópok felhasználását, kapcsolatot tartani az egyes szakterületek bázislaboratóriumaival és kutatásokat végezni izotópok felhasználásával. Működésének kezdetekor az intézet létszáma 15 fő volt.

Az intézet igazgatói voltak: Tétényi Pál (alapító igazgató) 1959–70, 1975–77; Földiák Gábor 1970–75, 1987–91. (főigazgató); Veres Árpád 1977–91 (tudományos igazgató); 1977–86 (igazgató); Zsinka László 1992; Paál Zoltán 1993–98; Wojnárovits László 1998-tól.

Igazgatóhelyettesek: Veres Árpád 1959–77; Földiák Gábor 1963–70, 1975–79; Zsinka László 1977–91; Goldek Ferenc és Wojnárovits László 1993–98; Lázár Károly 1999-től.

Az intézet felügyeleti szerve 1959–66-ig az OAB, 1967-től a Magyar Tudományos Akadémia. Neve 1961-től az OAB, ill. 1966-ban az MTA Izotópinvézetete, majd 1988-ban MTA Izotópkutató Intézetére változott.

1998-tól Izotóp- és Felületkémiai Intézet néven az MTA Kémiai Kutatóközpontja (KK) egyik intézményeként működik.

Eredeti feladatköre a következő volt:

- izotópforgalmazás és -nyilvántartás,
- izotópkalmazás elősegítése,
- kutatás izotópok alkalmazásával, illetve alkalmazásuk céljából.

E feladatok az 1960–70-es években jelentős mértékben bővültek az izotópkészítmények előállításával és izotóplaboratóriumok tervezésével. Az MTA felügyelete révén pedig az intézet kutatási tevékenysége iránt nőttek az igények. A tervezési feladatkör az 1970-es évek végén megszűnt. A hatósági feladatok végzését az MTA intézeteként is folytatta, ebben a tekintetben a felügyeletet továbbra is az OAB látta el. Az 1980-as években az intézet feladata lett a nukleáris fegyverek terjedését korlátozó nemzetközi egyezmény („atomsorompó egyezmény”) hazai végrehajtásával kapcsolatos tevékenység végzése, a nukleáris anyagok forgalmának ellenőrzése, nyilvántartása is, ugyancsak az OAB felügyelete alatt, a Nemzetközi Atomenergia-ügynökség- (NAÜ) ellenőrzések hazai teendőinek szervezése.

1993-tól az intézet közvetlen gazdasági célú tevékenysége nagy részének beszüntetésére kényszerült, miután az életbe lépett új rendelkezések értelmében költségvetési intézmények vállalkozói tevékenysége nem haladhatja meg az intézmény bevételeinek 30%-át. Ezzel megszűnt a hosszú évek alatt kiépült intézeti kutatási-fejlesztési vertikum.

1998-tól az intézet nem teljes körű felelőse a nukleáris anyagok ellenőrzésének: egy hazai nukleárisanyagkörzet-felelős teendőit látja el. Továbbra is végzi azonban a sugárzó anyagok nyilvántartásával, átadásának és szállításának engedélyezésével kapcsolatos hatósági tevékenységet.

Az intézetnek az 1960-as években kialakult szervezete a feladatoknak megfelelően:

- Szervetlen Kémiai Osztály: izotópok, zárt sugárforrások előállítása, izotópkémia.
- Szerves Kémiai Osztály: radioszánnal és tríciummal jelzett vegyületek előállítása.
- Fizikai Kémiai Osztály: katalízis, sugárhatás-kémiai kutatások, sugártechnológia.

- Izotópalkalmazási Osztály: ipari nukleáris elektronika, technológiai folyamatok vizsgálata izotópos nyomjelzéssel, radioaktív hulladékok kezelése és tárolása.
- Fizikai Osztály: magfizikai és sugárvédelmi kutatások, az intézet sugárvédelmi ellenőrzése, az intézet hatósági tevékenységét alátámasztó kutatások.

Kisebb-nagyobb változások mellett (mint a fentieknek többé-kevésbé megfelelő főosztályi szervezet, ezen belül működő iránymenkenti tudományos osztályok) ez a szervezet maradt fenn az 1990-es évekig. Ekkor az izotóptermelés és -alkalmazás az intézetből kiváló Izotóp Intézet Kft. profiljába került (tulajdonosok: MTA, KKI, magántulajdonosok). Az izotópkereskedelem céljára már az 1980-as években létrehozott, az intézet leányvállalataként működő IZINTA is kft.-vé alakult. (Tulajdonosok: KK, magántulajdonosok.)

Az intézet jelenlegi tudományos osztályai: Felületkéimiai és Katalizátorkutató Osztály, Katalízis- és Nyomjelzéstechnikai Osztály, Spektroszkópiái Osztály, Sugárhatáskéimiai Osztály, Nukleáris Kéimiai Kutatások Osztálya, Sugárbiztonsági Osztály.

Tudományos kutatások

Az intézet létrejötte és működése szorosan kapcsolódott az atomenergia békés alkalmazásának az 1950-es években hazánk számára is megnyíló lehetőségeihez. 1955-ben az első, majd 1958-ban a második, az ENSZ égisze alatt megrendezett világkonferencia (International Conference on Peaceful Uses of Atomic Energy) áttekintette az alkalmazás összes lehetséges területét.

Az atomerőművek abban az időszakban még csecsemőkorukat élték, így a másodlagos alkalmazások, különösen az izotópok különböző célú felhasználása volt az elsődleges cél. A magyar sajátosságoknak megfelelően a gazdasági (főleg ipari) alkalmazás elősegítése volt hangsúlyos, amit az általános állami fejlesztési szemlélet mellett az is indokolt, hogy az orvosi alkalmazás az orvosok spontán kezdeményezőkézsége folytán gyorsan fejlődött külön segítség nélkül is.

A hazai atomerőmű létesítése miatt – az 1970-es évektől – az izotópalkalmazásra kevesebb figyelmet fordítottak az állami szervek. Az intézet helyzetét hátrányosan befolyásolta az Országos Atomenergia-bizottság központi szerepének megrendülése. Ugyanakkor az intézetnek az MTA felügyelete alá helyezése, amely időben egybeesett több intézeti vezető doktori tudományos fokozatának megszerzésével, megnövelte az intézet tudományos orientációjának lehetőségeit, és megszabadította bizonyos fölösleges országos szervezési gondoktól.

Az atomerőművi programban az intézet – eltérő tevékenységi területe miatt – csak marginális szerepet játszott ugyan, de maga az erőmű léte az egzotikum-ból a valóságba vitte át a nukleáris kultúrát a szélesebb műszaki-gazdasági közvélemény szemében is. Ennek is köszönhetően az 1970-es években az izotóptechnika széleskörűen elterjedt, főleg az iparban. Hozzájárult ehhez a gazdasági szemlélet általános erősödése is ebben az időben. Egyúttal azonban a tudomány továbblépett az orvosi biológiai módszerek, az immunanalitika irányába. Ez a hagyományos orvosi izotópkalkalmazás perspektíváinak szűkülésével járt, az intézet azonban képes volt a folyamathoz alkalmazkodni.

Az 1980-as években egyrészt az atomfegyverek elterjedésének megakadályozását célzó nemzetközi egyezmények révén előtérbe került a hatósági ellenőrző tevékenység – illetve az ehhez szükséges technikai feltételek – biztosítása, amelynek terén az intézet bizonyos tapasztalatokkal már rendelkezett. Másrészt, a csernobili baleset következtében, növekedett a szkepszis az atomenergia felhasználásával szemben (ehhez hozzájárulhatott a nyersolajárak relatív csökkenésének megindulása – amit csak időnként szakított meg egy-egy esemény, mint pl. az iraki agresszió). Az ellenőrzési igényeket tovább növelte a Szovjetunió összeomlása, a nukleáris lefegyverzésre vonatkozó megállapodások, valamint a környezetvédelem igényeinek növekedése és az atomenergetika-ellenesség erősödése hazánkban is. Jelenleg az 1993 előtti nukleáris kapacitás nagyobb hányada az Izotóp Intézet Kft. keretében működik.

E körülmények között az intézet alapvetően az ellenőrzési technikák fejlesztésével, a természetes közegben lejátszódó izotópmigráció vizsgálatával, valamint a számottevő tartós radioaktivitást nem iniciáló prompt gamma-aktivációs analitika megvalósításával és alkalmazásával foglalkozik. Utóbbi természetesen a KFKI Atomenergia Kutatóintézetében működő atomreaktor berendezésein történik.

Gyakorlati kutatások

Az intézetben folyó kutatások az OAB-felügyelet időszakában főleg gyakorlatorientáltak voltak. Központi feladatot képezett az izotópok előállítása a Csillebércei Kutatóreaktorban besugárzott célsanyagokból. A legfontosabb izotópok előállítási technológiájának kidolgozása mintegy 5-6 év alatt befejeződött. Ez elsősorban komplexkémiail és elválasztástechnikai kutatásokat igényelt.

Az 1970-es évek végén az intézeti kutatás és fejlesztés az izotópos medicina nagy paradigmaváltását követve áttért a radioimmunológiai készletek (kitek) fejlesztésére, az 1990-es években pedig sikerült a legújabb izotópos terápiai igényeket is kielégíteni hazai készítményekkel.

Ugyancsak többszöri irányváltás jellemezte a szerves kémiai kutatásokat: a kezdeti, tríciummal és radioszénnel jelzett vegyület-előállítását követte a radiofoszforral és radioaktív kénnel jelzett vegyületek szintézismódszereinek fejlesztése, majd a molekuláris biológiai célú fejlesztés.

Ugyancsak gyakorlatorientált volt az ipari izotópalkalmazási módszerek fejlesztése: izotópvezérlésű elektronikus mérő-szabályozó berendezések, ipari defektoszkópok, az ipari folyamatok izotóp-nyomjelzéses vizsgálata játszották a főszerepet az 1960-70-es, bizonyos mértékig még az 1980-as években is. Ezek az alkalmazások azonban mára nagyrészt elvesztették időszerűségüket. Jelenleg a sugártechnikai alkalmazás főleg a többcélú ipari besugárzó berendezések, teleterápiás „kobaltágyuk” fejlesztését, készítését, üzembe helyezését igényli, továbbá igen egyszerű sugárzás-, illetve sugárdózismérőket.

Elméleti célú kutatások

A gyakorlat által vezérelt kutatások mellett az intézetben az 1960-as évek elejétől kifejezetten *elméleti célú kutatások* is indultak, amelyek az intézet akadémiai felügyelet alá kerülése után felerősödtek, a közvetlen gazdasági célú kutatások többségének a gazdasági társaság keretei közé kerülésével pedig az intézet alapvető tevékenységévé váltak. E kutatások fő irányait ismertetjük az alábbiakban.

Heterogén katalízis és felületkémia

Eredetileg a kutatások fő irányát a szénhidrogének fémkatalizált reakcióinak izotóp-nyomjelzéses mechanizmusvizsgálata képezte. Az 1970-es években a fémpor katalizátorokról a hordozós (alumínium-oxid, szilícium-oxid, zeolit) katalizátorokra tértek át, majd a reakciók köre bővült egyszénatomos vegyületek (metán, szén-monoxid), továbbá a kéntartalmú vegyületek átalakulásainak tanulmányozásával. A kutatások kiterjedtek a korszerű fizikai felületvizsgáló technikák (infravörös és elektronspektroszkópia) alkalmazásával a felületi adszpecieszek szerkezetének kutatására, a legutóbbi időben pedig speciális módszerekkel készített, jól definiált katalizátorrendszerek szintézisére és működésük atomi szintű megértésére, illetve befolyásolására irányultak.

Sugárhatás-kémia

A kutatások fókuszpontjában a kezdeti szakaszban a szénhidrogén-radiolízis állt, majd, miután az országban a korábban több helyen is folyó sugárkémiai kutatások nagyrészt megszűntek, az intézet vált e kutatások gyakorlatilag egyetlen hazai labo-

ratóriumává. Ezért a sugáriniciált polimerizáció, biopolimerekkel analóg hidrogének előállítására és cellulózanyagok sugárkezelése is a kutatások témakörébe került.

Nukleáris kutatások

A nukleáris diszciplínák művelése részben a gyakorlati tevékenységhez közvetlenül kapcsolódó nukleáris mérés-technika (sugárintenzitás, sugárenergia) fejlesztésére, részben a gamma-sugárzással létrehozott magizomeria tanulmányozására irányult. Művelésük jelenleg is folyik, a tematika bővült a következő főbb irányokban:

- nukleáris hulladékok migrációja a talajban,
- nukleáris fűtőelemek hasadóanyag-tartalmának, kiegészi szintjének és hűtési idejének meghatározása,
- termo- (radio) lumineszcencia alkalmazása sugárdózisok mérésére,
- prompt gamma aktivációs analitika fejlesztése kémiai elemzések céljára.

Spektroszkópia

Az 1970-es évek elején – részben a felületkémiai és katalízis-, részben a szerves kémiai kutatásokhoz kapcsolódva – indult az infravörös spektroszkópiára épülő kémiai szerkezetkutatás, amely az utóbbi évtizedben kibővült a környezetanalitikai módszerek fejlesztésével.

A kísérletes szerkezetvizsgálat mellett jelentős szerepet játszik az elméleti számításokra épített kutatás, különösen a sűrűség-funkcionálanalízis (DFT).

Kutatási koncepció

Az intézet kutatási koncepciója – távlataiban és rövid távon – a következő alapelvekre épül:

- a) Elsődleges igény az eredmények nemzetközi megmérettetése és elismertsége. Ez biztosítja a tematika és az alkalmazott módszerek korszerűségét, a megoldások színvonalát.
- b) A problémák zöménél többoldalú megközelítés, különböző módszerek alkalmazása érvényesüljön (fizikai, fiziko-kémiai, nukleáris, izotóp- és sugárkémiai, felületkutatási, spektroszkópiái).
- c) Az intézet két alapvető irányban folytatja kutatásait:
 - nukleáris és izotópkémia,
 - határfelületek szerkezete és katalitikus tulajdonságai.

A témák kiválasztásánál és kidolgozásánál a kutatók törekszenek a két terület eszközeinek, egyes módszereinek alkalmazására.

d) A kutatások csatlakoznak a Kémiai Kutatóközpont következő fő kutatási irányaihoz:

- felületkémia és -katalízis,
- különböző módon aktivált kémiai folyamatok,
- polimerkémia és -fizika,
- környezeti és analitikai kémia,
- anyag- és molekulaszervezet,
- nukleáris kémia.

A rövid távú kutatási koncepciót az alábbiakban vázoljuk.

Nukleáris és izotópkutatás

1. Magfizika: új magspektroszkópai módszerek kidolgozása; magizomer gerjesztés gamma/gamma reakcióval.

2. Nukleáris elemanalitika: hideg neutronokkal végzett prompt gamma aktivációs analitikai módszerek fejlesztése; új spektroszkópai adatbázis létrehozása (NAÜ-együttműködés).

3. Nukleáris biztonság és sugárvédelem: új módszerek kidolgozása fűtőelemek dúsítási és kiegészi szintjének meghatározására. Nukleáris hulladékok karakterisztikus izotópjai talajban lejátszódó migrációjának vizsgálata.

4. Sugárhatás-kémia, sugárfizika, magkémia: nagy ionizáló sűrűségű részecskék nyomvonalában végbemenő fizikai és kémiai folyamatok vizsgálata; polimerek és biopolimerek kutatása; a szilárdtest-dozimetria fejlesztése; mikropórusos rendszerek vizsgálata az *in situ* Mössbauer-spektroszkópia módszerével.

Határfelületek szerkezete és katalitikus tulajdonságai

1. Felületek felépítése és szerkezeti tulajdonságai: katalizátorok határfelületének molekuláris szintű megértése, tudományos alapú tervezésük, a felületi reakcióképesség kiépítése.

2. Felület–szubsztrátum kölcsönhatás vizsgálata: különböző morfológiájú fémek (egykristályok, fólia, fémpor) adszorpciós képességének összehasonlítása, a felületi fém–szubsztrátum kölcsönhatás és a fémek katalitikus tulajdonságai közötti különbségek értelmezése felületkutatási módszerek által szolgáltatott adatok alapján. Az 1. és 2. pont alatt felsorolt kutatásokhoz alkalmazott módszerek: X-Ray Photoelectron Spectroscopy (XPS), Ultraviolet Photoelectron Spectroscopy (UPS), Transition Electron Microscopy (TEM), Scanning Tunneling Microscopy (STM), XRD, TPR, TPD, Auger Electron Spectroscopy (AES), elektronkilépési munkaváltozás (electron work function charge), szelektív kémiai szorpció.

3. Heterogén katalitikus reakciók vizsgálata: katalizátorok összetételének, fizikai és elektronállapotának, adszorpciós készségük és katalitikus tulajdonságaik

összefüggéseinek, a reagáló molekulák szerkezete és katalitikus reakcióképességük közötti kapcsolatok tanulmányozása. Katalitikus reakciók mechanizmusának vizsgálata izotópos nyomjelzéssel. Katalizátorok: kétfémes, fém-fémoxid, fémszulfid rendszerek. Főbb reakciók: C_1 -átalakulások, telítetlen szénhidrogének hidrogénezése, telített szénhidrogének vázátrendezése, környezetvédelmi fontosságú reakciók: oxidáció, kén-nitrogén-oxid- (denox) és oxigénmentesítés.

Jelentősebb eredmények

Izotóptermelés

A szerves izotópvegyületek és zárt sugárforrások termelése 1961-ben egy ideiglenes laboratóriumban kezdődött el a Központi Fizikai Kutatóintézet (KFKI) Magkémiai Főosztálya által kidolgozott technológiák alapján. 1966-ban az intézet keretei között megkezdte működését az „A” szintű (tehát a legnagyobb radioaktivitású és radiotoxicitású sugárzó anyagokkal történő műveletekre alkalmas) izotóp-előállító üzem az akkori követelményeknek mindenben megfelelő színvonalon. Az 1970-es évben már 7750 izotóptételt szállított az intézet hazai és külföldi megrendelőknek.

Az 1960–70-es években az intézet munkatársai kidolgozták az akkor szükséges legfontosabb izotópok előállítási technológiáit. A technológiai fejlesztés azóta is folyamatos.

Így a nagy tömegű jód-, technécium- és más készítmények, irídium, kobalt és más sugárforrások előállítási módszereinek fokozatos fejlesztése mellett történt meg az áttérés az ismertetett további készítménytípusok (pld. immunoassay kitek) előállítási technológiájára.

A technológiai eljárások fejlődése szükségessé tette a berendezések fejlesztését is, különös tekintettel a termékek humán célú felhasználására. Az Izotóp-üzem épületében létrejött egy GLP (Good Laboratory Practice) minősítésű, steril preparátumok előállítására alkalmas laboratórium. Az Izotóp Intézet Kft. 1998-tól alkalmazza az ISO 9001 minőségbiztosítási rendszert.

Sugártechnika

A kutatások két β -sugárforrás segítségével indultak. 1968-ban az intézet üzembe helyezte a munkatársai által kifejlesztett, nagy 3PBq (80000 Ci) névleges aktivitású kobalt γ -besugárzó berendezést, amely alkalmas mind kutatási, mind fél-

üzemi besugárzásokra. Ezt követte a 4MeV-es lineáris elektrongyorsítóval üzemelő impulzusradiolízis-mérőlaboratórium létesítése 1985-ben. A számítógép vezérlésű berendezés 80–2600 ns időtartamú elektronimpulzusok előállítására alkalmas.

Katalízis-, felület- és szerkezetkutatás

A szokványos laboratóriumi adszorpciós és katalitikus vizsgálati módszerek, kromatográfiás és tömegspektrometriás termékelemzés mellett az izotópos nyomjelzés (deutérium, trícium, radioszén, radioaktív kén) alkalmazása az intézeti katalitikus kutatási technika egyik jellemző vonása. A deutérium és radioszén együttes alkalmazására épülő „kettős” jelzés módszere lehetővé tette a felületi közti állapotok és az adszorpciós/deszorpciós egyensúly együttes tanulmányozására.

Az 1970-es évektől kezdődően az intézetben növekvő szerepet kaptak a sokrétű felületfizikai vizsgálati módszerek: elektron- (UPS, XPS, AES) és infravörös spektroszkópiai módszereket alkalmaztak mind a távoli, mind a közepes IR-tartományban. A Mössbauer-spektroszkópia segítségével pedig a hordozós (pl. zeolit) katalizátorok vas-, illetve ónatomjainak oxidációs és koordinációs viszonyait tanulmányozták.

A Fourier-transzformációs infravörös spektroszkópia módszerét a felületi szerkezetek mellett fémkomplexek szerkezetvizsgálata céljából is alkalmazzák.

Mind a felületi adspecieszek, mind a komplexek szerkezetvizsgálata céljából kiterjedt kvantumkémiai számítások is folynak a sűrűségfüggvény-elméletre alapuló módszer segítségével.

Nukleáris mérés technika

Az intézetben általában sikerült a nukleáris mérés technika adott időszakban korszerűnek tekintett műszereit beszerezni mind a sugárintenzitás és -dózis mérés, mind a sugárzási energiaeloszlás mérése terén. Az intézeti tevékenység speciális igényeinek kielégítésére került sor egyedi fejlesztésekre, úgymint:

- alacsony háttérű mérések technikájának kidolgozása a magfotóeffektus mérése és módszerkénti alkalmazása céljából;
- sugárdózis mérés, ezen belül kémiai dózismérés (alkoholos klórbenzolból radiolízis során képződő sósav mennyiségének meghatározása nagyfrekvenciás vezetőképesség-mérés útján, valamint termo [radio]lumineszcencia

jelenségén alapuló meghatározás). A kémiai módszer az amerikai szabványba is bekerült. A lumineszcenciás mérés előnye többek között, hogy extrém körülmények között is alkalmazható. E módszer megbízható voltát mutatja, hogy a NASA űrhajóin is felhasználták;

- lágy béta-sugárzó izotópok aktivitásának folyamatos mérése átáramlások rendszerben radiogázkromatográfia-termékelemzés céljára.

A legjelentősebb eredmények:

1. Gamma-részecskékkel kiváltott magfotóeffektus kimutatása stabil atommagok 43 izomerjének fotoaktivációs gerjesztése útján és számos magfizikai adat kísérleti meghatározása. A módszert több területen is alkalmazzák (többek között asztrofizikai nukleoszintézis vizsgálata, gamma-lézerek fejlesztése, fém-érmék, numizmatikai tárgyak vizsgálata).

2. A molekulaszervezet meghatározó szerepének bizonyítása a szénhidrogének sugárbomlásában: kis különbségek a radiolízisnek kitett molekulák szerkezetében a bomlás irányát (termékeit) nagymértékben befolyásolják, annak ellenére, hogy a besugárzás energiája 5-6 nagyságrenddel meghaladja a kémiai (szén-szén, szén-hidrogén) kötések energiáját. E szerkezeti hatás a sugárbomlás kezdeti lépéseinél is fellép.

3. Kvantitatív emissziós mérésekre alkalmas emissziós-abszorpciós FTIR méréstechnikai (Fourier Transformation Infra Red Spectroscopy) módszer kidolgozása: a módszer lehetőséget ad hordozós fémkatalizátorok mellett elektrokatalizátorok és fémporok (kormok) esetében is kisfrekvenciás adszorbátum-szubsztrátum rezgések meghatározására.

4. Sűrűség-funkcionálmélet alkalmazásával és mátrixizolációs mérések segítségével számos új, eddig ismeretlen fém-ligandum rendszer (átmenetifém-komplex) azonosítása.

5. A katalitikus rendszer koncepciójának kidolgozása különböző szénhidrogének fémeken lejátszódó adszorpciója és átalakulási mechanizmusának izotópnymjelzéses felderítése és elemzése alapján. A koncepció értelmében a kémiai reakciók kinetikáját (azonos termodinamikai és sztöchiometriai feltételek mellett) megváltoztató katalitikus hatást a reagáló molekulák és a fémkatalizátor közötti kölcsönhatás eredményeképpen kialakuló *katalitikus rendszer* fejti ki. A reakciók irányát és sebességét a rendszer egészének természete, a fémkatalizátor és a reakciókomponensek jellege határozza meg.

6. A felület szerkezete (morfológia, elektronszerkezet, pl. vegyértéksáv) és reakcióképessége (aktivitás és szelektivitás) közötti összefüggés értelmezése a nanométer átmérőjű fémrészecskék felületének atomi szintű tanulmányozása alapján. A határfelület szerepének tisztázása többek között a zeolit üregeiben előállított kétfémes, a Si (100) felületén lézerablációval létrehozott Co-, Pt-,

Cu-, Ag-, Au-nanorészecskék által alkotott katalitikus rendszereknél, illetve amorf fémötvözetek katalitikus viselkedésénél a C_1 molekulák (CO és CH_4) átalakításában.

7. Szublimációs, majd kromatográfias eljárás kidolgozása a 99-es rendszámú metastabilis technécium elválasztására a 99-es rendszámú molibdéntől. Technéciumgenerátor kifejlesztése és technéciumjelzésre alkalmas szervespecifikus készletek (kitek) előállítási módszerének kidolgozása.

8. A molekuláris biológiai kutatás részére nagy fajlagos radioaktivitású nukleotidok teljes választéka szintézismódszereinek kidolgozása, különös tekintettel a 32 és 33 tömegszámú foszforral, 35 tömegszámú kénnel jelzett nukleotidokra, valamint a nem radioaktív Genefix termékcsalád kifejlesztése szelektív immobilizálás céljára, ami számos alkalmazást (jelzett egyszálú DNS/RNS-próbák, PCR-quantifikálás, DNS/RNS-kötő fehérjék izolálása, egyszálú DNS előállítása stb.) tesz lehetővé. Az alkalmazási protokollok kidolgozása.

9. Radioimmunoassay kutatás keretében nagy hatékonyságú eljárások kidolgozása radiojóddal jelzett nanomennyiségű vegyületek, pikomól, femtomól koncentrációjú bioaktív mediátorok elválasztása céljából. A megoszlási hánycsúcsra, illetve a sztöchiometrikus modell érvényességére építő eljárások alkalmazásának bizonyítása, továbbá prosztanoid, eikozanoidok szerepének tisztázása egyes élettani, biológiai folyamatokban (orvoskutatókkal közösen).

10. Prompt neutron-gammaaktivációs analitikai (PGAA) módszer bevezetése és továbbfejlesztése. Ehhez szükség volt: a) PGAA spektrum könyvtár létrehozására csaknem az összes kémiai elemre; b) a Hypermet PC spektrumanalizáló szoftver kifejlesztésére; c) alkalmazási módszerek kidolgozására, többek között ipari – nem radioaktív – nyomjelzéses vizsgálatokra, régészeti leletek összetételének, többkomponensű katalizátorok kémiai összetételének meghatározására.

A tudományos eredmények hasznosítása

Az intézetben folyó nukleáris kutatások túlnyomó többségének eredményei – mint az eddigi példák is mutatják –, a gyakorlatban hasznosultak.

A szervesetlen kémiai, komplex kémiai és elválasztástechnikai kutatások gyakorlati eredménye az izotópkészítmények előállítása volt. Az intézet évtizedeken át kielégítette a hazai igényeket mindazokból a preparátumokból, amelyek előállítását a KFKI kutatóreaktorának kapacitása lehetővé tette. A reaktor rekonstrukciójának időtartama alatt is biztosította az ellátást a legfontosabb készítményekből importált radionuklidok feldolgozása útján. A hazai célú gyártás mellett – évről évre növekvő mértékben – sor került exportra is. Kiemelkedő eredmény

volt a technéciumgyártás licencének és termelési technológiájának exportja Finnországba. A szerves kémiai kutatások gyakorlati eredménye volt a nagyszámú radioszénnel és tríciummal jelzett szerves vegyület, majd a foszforral és radioaktív szénnel jelzett nukleotidok előállítása.

Az intézeti kutatások kiemelkedő eredményeit és egyúttal folyamatos gyakorlati alkalmazását reprezentálják a radioimmunoassay kitek, pajzsmirigyhormonok, szteroidok és prosztaglandinok. A radioizotópos jelzési technikán túlmenően sor került a fluorescens-immunoassay kitek kidolgozására és üzemszerű előállítására is. A kutatási és fejlesztési tevékenység ötvöződéseként kiemelkedő példái, a jódjelzett vegyületek kromatográfiája, az arachidonsav-metabolizmus biológiai szerepe és a radioimmunoassay elmélete terén elért eredmények, a több mint tíz szabadalom elnyerése és a nagyszámú készítmény folyamatos előállítása. E magas színvonalú kutatásnak, az ennek révén szerzett tudásnak köszönhető, hogy az intézet – illetőleg 1992 után az Izotóp Intézet Kft. – képes volt megtartani és dinamikusan növelni piacát a kelet-európai piac összeomlása után is: 1998-ban egyedül az immunoassay-preparátumok termelési értéke 207 millió forint – 74%-ban export – volt.

A kémiai és lumineszcens dozimetria széles körben elterjedt a gyakorlatban is. 1999-ben kezdődött meg például a paksi atomerőmű primerköri dóziszviszonyainak „feltérképezése”. A sugárkémiai kutatások és az intézeti besugárzó-állomás létesítése terén szerzett tapasztalatok üzemszerű kobaltbesugárzó berendezések tervezését és létesítését tették lehetővé hazai és külföldi felhasználók számára, többek között Afganisztánban, Törökországban, Vietnamban, Romániában és Jordániában.

Az intézet elektronikai fejlesztéseinek eredményeként mintegy 3000 szint-, határérték-, vastagságmérő és egyéb ipari ellenőrző berendezés áll a kutatók rendelkezésére. A nukleáris kutatások eredményeinek nagy hányada az Izotóp Intézet Kft. keretében realizálódik jelenleg, az intézetben is folynak azonban – a már említett – gyakorlati felhasználást is eredményező kutatások (PGAA, dozimetria, anyagmozgás természetes közegben). Az intézeti magfizikai, radiokémiai kutatások eredményei és programozási tapasztalatai alkalmazhatók a nukleáris ellenőrzés módszereinek fejlesztésében és a hatósági ellenőrzés napi működésében. Az intézeti spektroszkópiai kutatások egy része nagy érzékenységgű környezet-analitikai módszerek kifejlesztésében hasznosult.

A kutatások gazdasági hatását az egész 40 éves időszakra nehéz megítélni. 1986–91 között az intézet átlagos évi bevétele vállalkozói tevékenységből 200 millió forint volt, akkori költségvetési támogatásának több mint kétszerese. A közvetlen termelési értékben, illetve az ún. intézeti eredményben kimutatható hatás a forint értékvesztése, a forint/dollár akkori időben irreális értékaránya

miatt 1999-ben használhatatlan. Legcélszerűbb az Izotóp Intézet Kft. jelenlegi adatai alapján érzékeltetni, hogy milyen mértékű tevékenységet alapozott meg az intézetben folyó kutatás: 1998-ban a kft. bevétele közel 1,5 milliárd Ft volt, melynek mintegy kétharmada exportból származott. Az eladott készítmények száma 80 000. Az export 53%-a az EU, 8% Kelet-Európa, 6% Amerika, 17% a Távol-Kelet, 16% a Közel-Kelet országaiba, összesen 37 országba irányult. A közvetlen gazdasági eredmény mellett figyelemre érdemes a közvetett nemzetgazdasági haszon, például a műszerek vagy a gamma-defektvizsgáló berendezések révén elért megtakarítás, valamint a gyógyászati célú felhasználás biztonsága is.

Az intézet helye a hazai tudományos életben

Az előző fejezetekben ismertetett izotópkémiai, nukleáris fizikai és termelőtevékenysége és hatósági feladatainak ellátása révén az intézet átfogó szerepet töltött be a magyar izotópkalmazásban. Az 1990-es években bekövetkezett szervezeti változások következtében ez a szerepe visszaszorult ugyan, de a nukleáris és sugárzó anyagok forgalmának ellenőrzésében, a teljes országos izotópnnyilvántartás vezetésében, a hatósági feladatok ellátásának technikai támogatásában ma is fontos szerepet játszik. Egyedi kutató- és tudományos szolgáltatómunkát folytat a nukleáris analitika terén. Gyakorlatilag ez az egyetlen hazai kutatóintézmény, amely sugárkémiai kutatásokat folytat. Több akadémiai doktori és kandidátusi értekezés készült e tudományterületen, a sugárhatás-kémiával foglalkozó akadémiai és kémikus egyesületi szervezetben fontos szerepet játszanak e laboratórium kutatói. Az intézetben működik az ország egyik legjelentősebb katalitikus és felületkémiai kutatóiskolája, amelyben 6 akadémiai doktori értekezés, 12 kandidátusi, illetve PhD-disszertáció, valamint nagyszámú egyetemi doktori értekezés készült. Az e területen dolgozó kutatók jelentős szerepet játszanak a Magyar Tudományos Akadémia Katalízis- és Szilárdtest-kémiai Munkabizottságaiban.

Az intézeti munkatársak tollából 1999 végéig több mint 3300 publikáció, köztük 30 monográfia, könyv, könyvfejezet készült.

Külön említést érdemel három alapvető – intézeti munkatársak által írt – idegen nyelven is megjelent monográfia: *Az izotópok ipari alkalmazása* (szerkesztette és a 17 tagú szerzőcsoportot irányította Földiák Gábor), Földiák Gábor, Cserép György, György István, Rodek Magda, Wojnárovits László: *Szénhidrogének radiolízise* (magyar, angol, orosz; angol 1981), Rózsa Sándor: *Nukleáris mérések az iparban*, valamint *A kémia újabb eredményei* című akadémiai sorozatban megjelent nyolc kötet, továbbá több nemzetközi konferenciáról ké-

szült *Proceedings* és a *Studies in Surface Science and Catalysis* sorozatban megjelent több monográfia szerkesztése.

Az intézet kutatói aktív szerepet játszanak a hazai tudományos közéletben: 36 akadémiai bizottsági, illetve munkabizottsági tagságot töltenek be a Kémiai, illetve Fizikai Tudományok Osztálya mellett működő bizottságokban, ketten az MTA Közgyűlése által választott bizottságok tagjai. Az intézetben az MTA 1 rendes tagja és 1 közgyűlési doktor-képviselő, a Magyar Mérnökakadémiának 2 tagja dolgozik, egyéb hazai tudományos testületekben 9 helyet foglalnak el intézeti munkatársak. Jelentős mértékű az intézeti kutatók részvétele az MTA Fizikai-Kémiai, Radio-kémiai Bizottságában, valamint a Katalízis-munkabizottságban.

A kutatók közül Állami Díjban részesült Guzzi László (1983), Paál Zoltán (1983), Tétényi Pál (1983), Akadémiai Díjban Tétényi Pál (1967).

Akadémiai Ifjúsági Díjat kapott Matusek Károly (1967), Böszörményi László (1985), Zsoldos Zoltán (1987), Kisfaludy Gábor (1988), Hoffer Tamás (1991) Zsoldos Zoltán (1992), Pápai Imre (1996). A Magyar Köztársasági Érdemrend tiszti keresztjét Guzzi László (1993) nyerte el.

Az intézet kutatói a következő külföldi elismerésekben részesültek: American Standards of Testing of Materials (plaket): Kovács András (1995), Digilab Users Award, Düsseldorf: Mink János (1982), Alexander von Humboldt Research Award: Mink János (1994), Award of the Friedrich-Emich Medal of the Austrian Society of Analytical Chemistry: Mink János (1995), Tétényi Pál pedig a Királyi (Svéd) Mérnöktudományi Akadémia külső tagja (1987).

Intézeti munkatárs az *Applied Catalysis* folyóirat egyik szerkesztője, és további 9 szerkesztőbizottsági helyet töltenek be az intézeti munkatársak nemzetközi vagy külföldi folyóiratok szerkesztőbizottságaiban.

Az intézetben a Veszprémi Egyetem három kihelyezett tanszéke működik, 1 tanszékvezető egyetemi tanár, 1 egyetemi tanár és 8 c. egyetemi tanár, illetve egyetemi magántanár dolgozik. Általában 10-15 kutató végez rendszeres oktatási tevékenységet.

Egyetemi címeikkel rendelkeznek a következő kutatók: Guzzi László (egyetemi magántanár, BME, címzetes egyetemi tanár, JATE), Földiák Gábor (egyetemi tanár, BME), Mink János (egyetemi tanár, tanszékvezető, Veszprémi Egyetem [VE]), Molnár Gábor (címzetes egyetemi tanár, VE), Paál Zoltán (egyetemi magántanár, BME, címzetes egyetemi tanár, VE, címzetes egyetemi tanár, JATE), Schay Zoltán (egyetemi magántanár, BME), Tétényi Pál (címzetes egyetemi tanár, JATE), Veres Árpád (címzetes egyetemi tanár, ELTE), Wojnárovits László (címzetes egyetemi tanár, VE).

Az intézetben folyamatosan mintegy 8-10 fiatal kutató dolgozik PhD-értekezésén. Az itt dolgozó 13 MTA doktora fokozattal, 20 kandidátusi, illetve

PhD-fokozattal rendelkező kutató túlnyomó többsége a tudományos fokozatot az intézetben szerezte. Többen vesznek részt egyetemi doktori tanácsokban a habilitációs értékelésekben, egy intézeti munkatárs az Országos Doktori és Habilitációs Tanács tagja.

Nemzetközi kapcsolatok

Az intézet rendszeres kapcsolatot tart fenn a bécsi székhelyű Nemzetközi Atomenergia-ügynökséggel. Ez kiterjed egyes intézeti munkák támogatására, a kutatók szakértői közreműködésére, az ügynökség megbízásából végzett konkrét fejlesztési munkákra. Az intézet több-kevesebb rendszerességgel szervez nemzetközi dozimetriai tanfolyamokat az ügynökség megbízásából.

Az intézet az 1990-es években mintegy 40 nemzetközi kutatási együttműködésben vett részt, így többek között European Cooperation in the Field Scientific and Technical Research (COST), Magyar–Amerikai Kutatási Alap (MAKA), Pays Européenne Central et Oriental (PECO) programokban, és több sokoldalú (többek között egy COST-program) vezetője.

Jelentős szerepet tölt be nemzetközi tudományos összejövetelek szervezésében. Példaképpen említhetők a rendszeresen ismétlődő „Tihany” Sugárhatáskémiai Szimpóziumok, a „Pannónia” Közép-európai Katalízis Szimpózium, a Magyar–Osztrák Vibrációs Spektroszkópiai Szimpóziumok, a több mint 1000 résztvevővel 1992-ben rendezett 10. Nemzetközi Katalízis Kongresszus. 1995–99-ben az intézet 9 nemzetközi tudományos konferenciát (szimpóziumot) rendezett, összesen mintegy 1800 résztvevővel. Kutatói rendszeresen vesznek részt meghívott, illetve plenáris előadóként rangos nemzetközi konferenciákon. Rendszeresen tartanak informális előadásokat is külföldi kutatóhelyeken. Az intézetet jelentős számban keresik fel látogatók. Évi 15–20 előadást tartanak itt ismert külföldi tudósok.

★

Az elsődlegesen gyakorlati célokkal kis csoportból létrehozott intézet (1959) mintegy 10 év alatt képes volt mind a gyakorlati feladatok megoldására, mind a legfontosabb egyedi laboratóriumok, berendezések létesítésére, mind megfelelő tudományos színvonalat képviselő kapacitás kiépítésére. Ebben különböző okok játszottak szerepet, különösen:

- a szakterület felívelő pályája,
- a jelentős külső támogatás,

- a munkatársak rendkívül fiatal volta, az intézet tevékenységének kezdeti időszakában és az 1980-as évekig folyamatos „feltöltődés” fiatal kutatókkal,
- az a körülmény, hogy a munkatársak a kezdeti időszakban különböző munkahelyekről, akadémiai és ipari kutatóintézetekből, valamint vállalatoktól kerültek az intézetbe.

Az intézet évtizedeken át sikeresen ötvözte a gyakorlati feladatok teljesítését az igényes kutatómunkával. A tapasztalatok azt mutatják, hogy a tudományos kutatás és a fejlesztő-termelő tevékenység egy szervezetbe tömörülése mindkét tevékenység eredményességére pozitív hatású, olyan esetben is, amikor a kutatótevékenység nem közvetlenül kapcsolódik tematikailag a fejlesztéshez és a termeléshez. A fejlesztő- és termelőtevékenység feltétlenül igényelt közvetlen tudományos háttérrel is, az ilyen szakági vertikum létrehozása elengedhetetlen feltétele volt a termékek versenyképességének. Ez különösen az 1990-es években bizonyosodott be: az intézet, 1993-tól a kft., képes volt helytállni rendkívül nehéz körülmények között, éles versenyben a hazai és a nemzetközi piacokon is, a kelet-európai piacok összeomlása ellenére. Ehhez szükség volt arra is, hogy a vállalati formában is folytatódjék a kutatás és fejlesztés.

Az intézeti eredményesség további lényeges eleme a rugalmas alkalmazkodás mind a tudományos, mind gyakorlati tevékenységben a változó trendekhez. Ennek feltétele volt a széles körű, jól kiépített hazai és nemzetközi tudományos, műszaki és gazdasági kapcsolatrendszer.

A tapasztalat azonban azt is megmutatta, hogy a kutatóintézeti forma és mentalitás egy szinten már túlhaladottá vált a vállalkozási tevékenység számára, ezt bizonyítja, hogy 6 év alatt a vállalkozási formában a bevételek reálértékben az 1993. évinek mintegy háromszorosára nőttek.

A kutatótevékenység is új formába került az Akadémia intézethálózatának konszolidációja keretében: az intézet a Kémiai Kutatóközpont egyik intézményeként folytatja tevékenységét 1998 óta. Ebben a döntésben az Akadémiát szorító külső körülmények mellett bizonyos szerepet játszott az a tény is, hogy a kft. kiválását követő néhány év alatt az intézet még nem tudta teljesen kialakítani az új helyzetnek megfelelő markáns, sajátos, egységes kutatási profilt.

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA KUTATÓINTÉZETEI

- Atommagkutató Intézet (*Kovách Ádám*)
Állatorvos-tudományi Kutatóintézet (*Mészáros János*)
Balatoni Limnológiai Kutatóintézet (*Heródek Sándor–Elekes Károly*)
Csillagászati Kutatóintézet (*Balázs Lajos*)
Filozófiai Intézet (*Horváth Pál*)
Földtudományi Kutatóközpont (*Marosi Sándor–Póka Teréz–Verő József*)
Irodalomtudományi Intézet (*Bodnár György*)
Jogtudományi Intézet (*Péteri Zoltán*)
Kémiai Kutatóközpont (*Vinkler Péter–Szépvölgyi János–Tétényi Pál*)
Kísérleti Orvostudományi Kutatóintézet (*Szabó Dezső*)
Közgazdaságtudományi Kutatóközpont (*Kovács János Mátyás–Koltay Jenő–Ványai Judit*)
Központi Fizikai Kutatóintézet (*Bartha László–Gadó János–Gyulai József–Janszky József–Jéki László–Lukács József–Szabó György–Tompá Kálmán–Vértesy Gábor*)
Mezőgazdasági Kutatóintézet (*Veisz Ottó*)
Művészettörténeti Kutatóintézet (*Tímár Árpád*)
Néprajzi Kutatóintézet (*Flórián Márta–Paládi-Kovács Attila*)
Növényvédelmi Kutatóintézet (*Gáborjányi Richard*)
Nyelvtudományi Intézet (*Kiss Lajos*)
Ökológiai és Botanikai Kutatóintézet (*Borhidi Attila–Galántai Miklós*)
Politikai Tudományok Intézete (*Balogh István*)
Pszichológiai Kutatóintézet (*László János*)
Régészeti Intézet (*Török László*)
Regionális Kutatások Központja (*Horváth Gyula*)
Rényi Alfréd Matematikai Kutatóintézet (*Csirmaz Erzsébet*)
Számítástechnikai és Automatizálási Kutatóintézet
(*Strehó Mária–Szász Áron*)
Szegedi Biológiai Központ (*Chikán Ágnes*)
Szociológiai Kutatóintézet (*Tamás Pál–Tibori Tímea*)
Talajtani és Agrokémiai Kutatóintézet (*Várallyay György–Németh Tamás*)
Történettudományi Intézet (*Glatz Ferenc*)
Világ gazdasági Kutatóintézet (*Inotai András*)
Zenetudományi Intézet (*Tallián Tibor*)

A Magyar Tudományos Akadémia kutatóintézet-hálózata félszáz esztendő.

Az egyetemi oktatástól független kutatóintézetek tömeges alapítása a 20. századi tudományfejlődés eredménye. A 20. századé, amikor a kutatás a napi életfeltételeink újratermelésében és javításában – mind a technikai, mind az egészségügyi, mind a kulturális életkörülményeink újratermelésében – nélkülözhetetlenné lett. Nélkülözhetetlen, így kifizetődik a függetlenített főállású kutatók tömeges alkalmazása és adott célokra szerveződött kutatóintézetek létrehozása.

A századelőn mind az Egyesült Államokban, mind Európában kialakulnak a nagy kutatóközpontok. Európában a legismertebbek: a Kaiser-Wilhelm-Gesellschaft (1911) és a francia CNRS (1939) kutatóhálózata. Magyarországon 1920 után alapítják az első kutatóintézeteket állami erőből, sajátos módon a társadalom-, mindenekelőtt a történettudomány területén. Ezt a természettudományok területén csak gyenge kezdemények követik – elsősorban a magánszférában. Az állami alapítású „tudományos nagyüzem”-et, amely a kor kultuszminiszterének, gróf Klebelsberg Kunónak volt az álma, majd paradox módon a szovjet rendszer valósította meg 1949 után.

A Szovjetunió a fejlett nyugati társadalmak termelési, katonai előnyét – tanulva a németek példáján – a tudományos kutatás intenzitásának erősítésével kívánta behozni. E célra kiterjedt kutatóintézet-hálózatokat hozott létre. Hasonló megfontolások vezették a szovjet megszállás alá került közép-kelet-európai államok tudománypolitikáját 1949 után. Közöttük a magyar tudománypolitikát is: nagy költségfordítással, a már meglévő kis műhelyekre, kis kutatói közösségekre alapítva hoznak létre intézeteket. Egy részükben a közvetlen állami-hatósági feladatok teljesítéséhez szükséges alkalmazott kutatásokat folytatnak miniszteriális felügyelet alatt, másik részük alapkutatási célokkal az Akadémia felügyelete alá kerül.

Az akadémiai intézethálózat létrehozásának ideológiai-politikai céljait már elmosta a történelem (1990). A politikai-gazdasági változások, mindenekelőtt a tulajdonviszonyok megváltozása, az állami közalkalmazottakat sújtó társadalmi válság pedig megrázta mind a természet-, mind a társadalomkutató intézeteket. A századelőn már felismert alapelv azonban érvényes maradt a politikai rendszer leváltása után is: az intenzíven működtetett tudományos nagyüzem a közösség termelési és kulturális erő kifejtésének első számú segítője, modernizációs motorja lehet.

Így gondolkodott az Akadémia vezetése 1990 után, amikor a rendszerváltozás viharaiiban megőrizte kutatóhálózatát. És ez az alapelv vezette az 1997-ben megindított intézetkonszolidációs programot, amelynek célja: az intézethálózatot a nemzetgazdaság, a nemzeti érdekek szolgálatában tartani; a piacgazdaság körülményeihez igazítani; megállítani a szétesést; megállapítani az államilag garantált kutatói létszámot, rendbe hozni az alapellátást, majd rendezni a kutatói béreket, korszerűsíteni a műszerellátottságot. És közben közös erővel korszerűsíteni a tudományos menedzsmentet...

Ennek a folyamatnak egyik része az a törekvésünk, hogy az intézetek készítsék el a maguk „önéletrajzát”. Mutatkozzanak be a kutatói közösségeknek, az oktatói és a termelési szférának. És egyben – mint minden önéletrajz közben teszi az ember – vessenek számot a maguk erejével, hiányosságaival, tennivalóival. Hogy magunk határozzuk meg, autonóm módon, korszerűsítéseink útjait, az új célok elérésének legeredményesebb módszereit.