

Az MTA Anyag- és Molekulaszerkezeti Munkabizottság 2010. évi beszámolója

Munkabizottságunk e beszámolójában 4 kutatóhely adatait részletezzük, mely kutatóhelyek a munkabizottságban domináns tevékenységet folytatnak. Munkabizottságunk más kutatóhelyekről származó tagjainak adatai más munkabizottságok beszámolójában találhatóak meg.

1. A tudományág hazai helyzete, esetleges hanyatlása

Az anyag- és molekulaszerkezet kutatás jelenlegi hazai helyzete – magyarországi viszonylatban - jónak mondható, bár a kutatásokhoz szükséges műszerezettség fejlesztésére az utóbbi néhány évben csak kevés forrás jutott. Az elmúlt évtized kutatói létszámkorlátozásaiból adódó csökkenést hatékonyan pótolják a doktoránsok és a kutatásba bevont egyetemi hallgatók. Az utóbbiak – a korábbi gyakorlatnak megfelelő „ismerkedés” helyett egyre inkább - komoly kutatómunkát végeznek, s még egyetemi tanulmányaik alatt (a jobbak több) tudományos közlemény társszerzőségét érdemlik ki. A hazai kutatói állomány szaktudását és eredményeit magas színvonalú közleményeik minősítik.

A kutatóhelyek neve: MTA Kémiai Kutatóközpont, Szerkezeti Kémiai Intézet (23 fő)
MTA-BME Anyagszerkezeti és Modellezési Kutatócsoport (5 fő)
ELTE Molekulaspektroszkópiai Laboratórium (5 fő)
MBE Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék (2 fő)

Mely munkabizottságokban vesznek részt a kutatóik:

Anyag- és Molekulaszerkezeti Munkabizottság
Elméleti Fizikai Kémiai Munkabizottság
Elválasztástudományi Munkabizottság
Koordinációs Kémiai Munkabizottság
NMR Munkabizottság
Nukleáris Anyagvizsgáló Munkabizottság
Reakciókinetikai és Fotokémiai Munkabizottság
Szervetlen és Fémorganikus Kémiai Munkabizottság
Spektrokémiai Munkabizottság

Főbb kutatási témák felsorolása:

Biológiai rendszerek szerkezete (enzimek, fehérjék)
Szupramolekuláris kémia – önszerveződő rendszerek
Folyadékok szerkezete
Kémiai reakciók: kinetika, mechanizmus
Fotoaktív anyagok reakciói, alkalmazásai
Spektroszkópiai módszerek orvosi alkalmazásai
Szervetlen molekulák szerkezete
Hialuronsav konformációs viszonyai
Magmozgások variációs alapú számítása
Számítógépes molekuláspektroszkópia
Ab initio termokémia
„Egzotikus” kémiai jelenségek (rezonancia, alagúthatás) vizsgálata
Rezgési színeképek kvantumkémiai módszerekkel való elemzése

A kutatóhelyeken dolgozó
SZKI:

kutatók: 40

Kutatói életkoreloszlás

tárgyév	2010
-34	18
35-49	11
50-	11
Teljes kutató létszám	40

PhD hallgatók: 5 (a 40-ből)
technikusok: 1
diplomázó hallgatók: 2

BME AMKCS:

kutatók: 5

Kutatói életkoreloszlás

tárgyév	2010
-34	3
35-49	1
50-	1
Teljes kutató létszám	40

PhD hallgatók: 1 (az 5-ből)
technikusok: 0.5

ELTE MSL:

kutatók: 5

Kutatói életkoreloszlás

tárgyév	2010
-34	4
35-49	0
50-	1
Teljes kutató létszám	5

Posztdoktor: 1
PhD hallgatók: 2
Egyetemi hallgatók: 2

BME FKAT:

kutatók: 2

Kutatói életkoreloszlás

tárgyév	2010
-34	1
35-49	0
50-	1
Teljes kutató létszám	2

PhD hallgatók: 1

A kutatóhelyeken megtalálható műszerek:

SZKI:

Mágneses rezonancia spektrométerek

- Varian NMR System 600 MHz -es keskenyfuratú NMR spektrométer
- Varian NMR System 400 MHz -es keskenyfuratú NMR spektrométer
- X-sávú CW Bruker EleXsys 500 ESR spektrométer

Tömegspektrométerek

- PE Sciex API 2000 folyadékkromatográffal csatolt tömegspektrométer
- Waters Micro folyadékkromatográffal csatolt tömegspektrométer
- Waters Q-TOF Premier folyadékkromatográffal csatolt tömegspektrométer

Röntgendiffraktométerek

- Rigaku R-Axis RAPID image plate diffraktométer, X-Stream 2000 alacsony hőmérsékletű egység
- Enraf-Nonius turbo CAD-4 diffraktométer, sztereo mikroszkóp

Fluoreszcenciás- és lézertechnikák

- Lézeres villanófény-fotolízis berendezés (Surelite I-10 Nd-YAG lézer gerjesztő fényforrás, Applied Photophysics detektáló egység, Tektronix TDS 210 digitális oszcilloszkóp)
- FL900 Fluoreszcencia-élettartam spektrométer (Edinburgh Instruments) lumineszcencia spektrumának (200-900 nm) és élettartamának (30ps - 1μs) mérésére
- Lumineszcencia-spektrofotométerek és Jobin-Yvon Fluoromax-P)
- Megállított-áramlásos kinetikai egység (Applied Photophysics),
- Fluoreszcencia élettartamot mérő berendezés (Picoquant diódalézer gerjesztő fényforrások, Hamamatsu R3809U-51 detektor, Picoquant Timeharp 100 elektronika)
- Nd-YAG lézer (Quantel Brilliant) + Miniatur száloptikás UV/ látható spektrométer (Ocean Optics, WaveStar U és Ophir Optronics SP2000) + ICCD/spektrográf (Andor Instruments)

Optikai spektrométerek

- Digilab (Varian) FTS-60A IR spektrométer UMA-500 infravörös mikroszkóppal,
- Hitachi F-2500 fluoreszcens spektrofotométert

BME AMKCS, ELTE MSL:

- Számítógépes kluszter

Az elmúlt pár évben a műszerezettségben történt változások:

Eszközök: új készülékek 2004-2006

- NMR spektrométer (Varian 600 MHz, CP-MAS, peptidek, fehérjék vizsgálata REDOR-ral, polimorfia)
- Tömeg-spektrométer rendszer (Waters Q-TOF, HPLC, MALDI, ESI)
- IR_mikroszkóp (Digilab)
- ESR spektrométer (Bruker, CW, EPR/ENDOR)
- Kristály röntgen-diffraktométer (Rigaku)
- Folyadék diffraktométer (Philips X'pert)

Eszközök: új készülékek 2008-2009

- Kiegészítő mérőfejek a Varian 400 MHz NMR spektrométerhez
- Waters NanoAcquity Folyadékkromatográf
- Időfelbontásos spektrofluoriméter (Edinburgh Inst.)
- Cluster bővítés

Az elmúlt pár évben a létszámban történt változások:

MTA KK Szerkezeti Kémiai Intézet

tárgyév	2005	2006	2007	2008	2009	2010
Teljes kutató létszám	68	62	57	53	41	40

Az elkövetkező néhány évben a fenti kérdésekben (létszám, műszerezettség) várható változások:

SZKI: Változás nem várható a jelen körülmények között.

BME AMKCS: műszerezettségben nem várható változás, létszámot illetően egy fiatal kutató kerül felvételre 2011-től (nem munkabizottságbeli távozó kolléga helyére)

ELTE MSL: nem várható változás

2. A munkabizottság tagjainak 2010-ben elért jelentős tudományos-, fejlesztési- és innovációs eredményei (közérthető "sajtó" stílusban)

Biczók László, Megyesi Mónika, Miskolc Zsombor (SZKI): Feltárták a mikrokörnyezet és a szupramolekuláris komplex képződés hatását biológiai és farmakológiai fontosságú vegyületek fény hatására lejátszódó folyamataira.

Czugler Mátyás, Párkányi László, Bombicz Petra, Palló Anna, Holczbauer Tamás (SZKI): Organokatalizátorok sikeres "crystal engineering" vizsgálatai: új asszociátumok előállítása és kristályosítása, organokatalitikus reakciók közti- és végtermék komplexeinek szerkezeti jellemzése. Új Biomimetikus reakciótermék azonosítása és optikai hangolása crystal engineering útján, új ferrocénium vegyületek előállítása és azok Reinecke-sóinak metatézis - szintézise, valamint kristályszerkezetük meghatározása. Fémérje-krisztallográfiai vizsgálatok előkészítése ill. megkezdése. A szilárd fázisú szerkezet és az anyag fizikai és kémiai tulajdonságai közötti kapcsolat mélyebb megértése, polimorfia és izostrukturalitás. Fizikai és kémiai tulajdonságok finom hangolása.

Deák Andrea, Tunyogi Tünde (SZKI): Előállítottak egy olyan arany(I) makrociklust, amelynek a kristályrácsa bár nem tartalmaz nagyméretű pórusokat mégis képes egykristály-egykristály átalakulás során vendégmolekulákat megkötni majd kiengedni. A mechanizmust magyarázták. A kristályrács szelektíven képes szén-dioxidot elnyelni, majd irányított módon kiengedni.

Király Péter, Tárkányi Gábor, Domján Attila (SZKI): Nemfémes hidrogénezési eljárásokat fejlesztettek. Termoreszponzív gélek szerkezetét határozták meg.

Megyes Tünde, Bakó Imre, Bálint Szabolcs (SZKI):

Hidrogénkötéses hálók szerkezetének jellemzése különböző folyadékokban és folyadékegyekben, az ideális elegyektől való eltéréssel kapcsolatos szerkezeti jellemzők feltárására. Oldatban lévő ionok, nagyméretű komplexek és szupramolekulák hatása a folyadékok szerkezetére. Műszerfejlesztés: termosztálható mintatartó, kisszögű mérésekhez alkalmas feltét folyadékfázisban különböző hordozós gyógyszerhatóanyagok szerkezetének vizsgálatához.

Hargittai Magdolna (BME AMKCS)

Elkészítették a Hargittai M, Hargittai I: Symmetry through the Eyes of a Chemist. (Springer, 2010. xii + 520 pp.) 3., bővített kiadását.

Hargittai Magdolna, Varga Zoltán (BME AMKCS):

Megállapították, hogy a diszprózium-trijodid mátrix izolációs rezgési spektroszkópiai vizsgálatok a mátrixban komplex molekulák képződnek a mátrix nemesgáz atomjai és a Dyl₃ között, amelyekben a Dyl₃ mind sík, mind pedig piramisos helyzetet is felvehet. Ezzel a megfigyeléssel értelmezni tudták a spektrumokat. Meghatározták a molekula geometriáját, rezgési jellemzőit és elektronszerkezetét.

Hargittai Magdolna, Varga Zoltán (BME AMKCS):

Megállapították, hogy a vanádium-diklorid elpárologtatása bonyolult összetételű gőzt eredményez, amelyben többféle molekula, többféle elektronállapotban van jelen; ezek szerkezetét és energetikai viszonyait meghatároztuk. A vanádium-triklorid szerkezete gyengén torzult a dinamikus Jahn-Teller hatás következtében.

Császár Attila (ELTE MSL)

Elvégezték a $\text{HD}^{(16,17,18)}\text{O}$ izotopológokra vonatkozó kísérleti nagyfelbontású spektroszkópiai adatok validálását az általuk kifejlesztett MARVEL eljárás, valamint variációs magmozgás számítások segítségével.

Császár Attila, Fábri C, Mátyus E (ELTE MSL)

Olyan számítási eljárásokat dolgoztak ki, melyek segítségével először vált lehetővé teljes és redukált dimenziójú molekulamodellekre lehet variációs alapú rezgési-forgási számításokat végezni, illetve a számított rezgési-forgási hullámfüggvényekhez a megfelelő harmonikus oszcillátor és merev rotátor címkék hozzárendelése.

3. A rokon szervezetekkel, egyesületekkel való kapcsolattartás jellemzése

Európai Molekuláris Folyadék Csoport, Megyes Tünde

Európai Krisztallográfiai Szövetség, Bombicz Petra, titkár

MKE Kristályosítási és Gyógyszerformulálási Szakosztály, Bombicz Petra, vezetőségi tag

MKE Mágneses Magrezonancia-spektroszkópiai Szakcsoport, Tárkányi Gábor

MKE Tömegspektrometria Társaság; Vékey Károly, elnökségi tag

Magyar Elválasztástudományi Társaság, Drahos László, elnökségi tag

Magyar Proteomikai Társaság; Vékey Károly, elnökségi tag

Nemzetközi Krisztallográfiai Unió, Szerkezeti Kémiai Bizottság, Bombicz Petra, vezetőségi tag

Svájci Kémiai Társaság: Császár Attila

4. A munkabizottság tagjainak értekezései és konferencia tevékenysége

A munkabizottság tagjai által szervezett hazai vagy nemzetközi tudományos iskolák, műhelyek és konferenciák adatai

1. táblázat

Anyag- és Molekulaszerkezeti munkabizottsági ülés címe	ülések (és azokon az előadások száma)			külföldi előadók száma	PhD értekezés előzetes vitája	MTA doktora értekezés bemutatása	Részvétel konferencia-rendezésben, db
	< 1 napos	1 napos	több napos				
AMMB	4	0	0	1	2	0	5

2. táblázat

Részvétel konferenciarendezésben, részletek

Anyag- és Molekulaszerkezeti Munkabizottság		
A MB melyik tagja(i) rendezi(k)	rendezvény(ek) címe	helye, időpontja résztvevők száma
Vékey, Drahos (saját szervezés)	28 th Informal Meeting on Mass Spectrometry	Kőszeg, 2010 május 2-6, 120 fő
Vékey, Drahos (saját szervezés)	5. Magyar Proteomika Vándorgyűlés	Kőszeg, 2010 április 30- május 1, 50 fő
Vékey (saját szervezés)	Tömegspektrometria Előadói Napok	Budapest, 2010 március 3, 110 fő
Drahos (szervezőbizottság tagja)	METT vándorgyűlés	Tapolca, 230 fő
Bombicz Petra	26. Európai Kristallográfiai Találkozó	Darmstadt, Németország 2010. augusztus 29. - szeptember 2 1000 fő

Fontosnak tartjuk még megjegyezni, Keresztury Gábor kollégánk a főszerkesztője a "Vibrational Spectroscopy" Elsevier folyóiratnak, mely a rezgési spektroszkópia vezető tudományos folyóirata.