Fizikai-kémia

A fizikai kémia az anyagok és kémiai folyamatok mérhető tulajdonságainak meghatározásával és az azokat jellemző törvényszerűségek feltárásával foglalkozik. A hazai kutatóhelyeken az elmúlt 30 évben az anyag- és molekulaszerkezet, az elméleti kémia, az elektrokémia, a katalízistudomány, a kolloidkémia, a koordinációs kémia, a reakciókinetika és a fotokémia területén folytak különösen sikeres kutatások. A legfontosabb eredmények az ország hat legnagyobb egyetemén és két MTA kutatóintézetben születtek. A legtöbb kutatóhelyen több szakterületen alakultak ki nemzetközileg is elismert iskolák.

Az 1990 előtti kutatási struktúra örökségeként a legnagyobb fizikai-kémiai kapacitás az ezredforduló előtti és utáni évtizedben az MTA KK-ban (KKKI) és jogutódaiban (MTA TTK) koncentrálódott. A kutatóközpontban az említett területek mindegyikében születtek maradandó eredmények. A kvantumkémia alkalmazói világszerte széles körben használják a Mayer-féle kötésrend és vegyérték-indexeket. Az indexek alkalmasak a molekulák kötési viszonyainak jellemzésére. Népszerűségüket bizonyítja, hogy számos, a nemzetközi piacon vezető kvantumkémiai szoftverbe is beépítették azokat. Nemzetközi hírű a Központban folyó polimorfia kutatás. Az elektrokémia területén új váltóáramú módszereket fejlesztettek ki korróziós folyamatok jellemzésére. A korróziós inhibitorokról szerzett kutatási eredmények alapján technológiát fejlesztettek ki kazánok korrózióvédelmére, amely széleskörű ipari alkalmazást nyert. Az elektromos kettősréteg átrendeződéseinek kinetikájával kapcsolatos különlegesen pontos mérési eredményeik alapul szolgálnak a jelenség megértését célzó, világszerte folyó modellvizsgálatokhoz. A heterogén katalízis területén fémmel katalizált reakciók kinetikai leírásában születtek jelentős eredmények. Az optikailag aktív molekulák fémmel katalizált szintézisében is nemzetközileg jegyzett eredményeket értek el. Az Intézet sokáig a hazai zeolitkutatás központja volt. Szintetizáltak és úttörő módszerekkel szisztematikusan módosítottak különféle zeolitokat, meghatározták katalitikus tulajdonságaikat és használták őket környezetvédelmi szempontból fontos reakciók (deNO_x és SCR reakciók) katalízisében. Egyik katalizátorukat a MOL krakküzemében hasznosították. Sikereket értek el üzemanyagcellákban használható szénmonoxid-tűrő katalizátorok fejlesztésében. A központban működő nemzetközi hírű reakciókinetikai iskola kutatói meghatározták számos, a légkörkémiában fontos elemi kémiai reakció sebességi együtthatóját. Elméleti kémiai módszerekkel feltárták a molekulák ütközéseiben lejátszódó energiaátadást jellemző törvényszerűségeket. Fotokémiai és fotofizikai módszerekkel különleges kinetikájú reakciókat jellemeztek, és a gyógyszerkémiában alkalmazható szupramolekuláris rendszereket fejlesztettek ki.

Az MTA KFKI és jogutódjaiban *(*Energiatudományi Intézet, EK, MTA Wigner FK*)* folyó heterogén-katalízis kutatás során nemzetközileg jegyzett eredményeket értek el a fémkatalizálta szénhidrogénreakciók körében. Bevezették a katalitikus rendszer fogalmát, ami a nemzetközi szakirodalomban is elterjedt. Sikeresen kombinálták a fém- és a zeolitkatalízist kis molekulák átalakítására, és a folyamatok mechanizmusát is megállapították. A Paksi Atomerőmű üzemeltetésének támogatására jellemezték az atomerőművi korróziós folyamatokat. Általánosították az elektródkinetikai törvényeket fraktálgeometriájú határfelületek esetére, ami nemzetközi visszhangot keltett. Unikális elektrokémiai fémleválasztási módszert fejlesztettek ki mágneses és nem-mágneses multirétegek előállítására. Jellemezték a kapott multirétegek magnetotranszport sajátságait és a bevonatok mélységi komponens-eloszlását.

A BME kutatói a fizikai kémia több területén folytatnak sikeres kutatásokat. Nemzetközi hírnévre tart számot az Egyetemen működő, Lendület- és ERC támogatással folytatott kvantumkémiai módszerfejlesztés. Mivel a kidolgozott programjaikat szabadon elérhetővé tették, a módszereiket a nemzetközi közösségben széles körben használják. A

kolloidkémia területén orvosbiológiai alkalmazás céljából biokompatibilis mágneses polimer géleket, továbbá intelligens üvegeket és reszponzív lágy anyagokat állítottak elő. Az eredmények alapján több szabadalmat is benyújtottak. Szén alapú, hab szerkezetű funkcionális nanoszerkezeteket és speciális bevonatokat állítottak elő, és a pórusrendszer módosításával új, előnyös tulajdonságokat alakítottak ki. Jellemezték a felület kémiai tulajdonságainak szerepét 2D és 3D geometriájú szenek viselkedésében. Az ELTE kutatóival együttműködésben repülő- és űrjárművek szigetelésére alkalmas ultrakönnyű, jó hőszigetelő anyagokat állítottak elő. A szálas, nanopórusos, porózus szerkezetüket 1600 ºC-ig megőrző alox anyagok tesztelése jelenleg zajlik a világűrben.

Az MTA-BME Anyag- és Molekulaszerkezeti Kutatócsoportban, amely 2011-ig működött, nemzetközileg is vezető elektrondiffrakciós molekulaszerkezet-kutatások folytak. Ezeket magas színvonalú kvantumkémiai számításokkal kombinálták. Eredményeik elsősorban a szubsztituens-hatás szerkezeti következményeinek, a gáz/szilárd szerkezeti különbségeknek, „szokatlan" szervetlen szerkezetek kialakulásának és a Jahn-Teller hatás következményeinek feltárásában, valamint a VSEPR modell továbbfejlesztésében születtek. Eredményeiket nemcsak rangos folyóiratokban, hanem több helyen egyetemi tankönyvként alkalmazott monográfiákban is közölték.

A DE-en és elődintézményeiben folyó koordinációs kémiai kutatások eredményei jelentősen hozzájárultak egyes fémionok lehetséges szerepének megismeréséhez bizonyos neurodegeneratív megbetegedések (Alzheimer-kór, Parkinson kór, prion betegségek stb.) kialakulásában és lefolyásában. Felderítették különféle természetes és szintetikus hidroxámsavak fémmegkötő sajátságait, a fémion-szelektivitásukat befolyásoló tényezőket oldat- és szilárd fázisban, célzottan fémtartalmú potenciális gyógyszermolekulák kifejlesztése érdekében. Szintetizáltak és jellemeztek számos várhatóan rákellenes hatású, részben hipoxia-aktivált fémkomplexet. A nemzetközi élvonalba tartoznak az orvosi képalkotó diagnosztikában (MRI, PET) és terápiásan (nukleáris medicina) használható fémkomplexek szintézisét és jellemzését célzó kutatásaik. Számos ígéretes nyíltláncú és makrociklusos poliaza-polikarboxilát, -polifoszfonát, -polifoszfinát és -poliamidát komplexet fejlesztettek, melyekre külföldi gyógyszergyárak is felfigyeltek. Emellett NMR krioporozimetriás módszerrel meghatározták fontos gyógyszerhordozó dendrimerek szerkezetét, hidratáltságát, stabilitását, specifikus kölcsönhatásait a biológiai közeggel. Nagy időfelbontású kísérleti módszerek és az általuk továbbfejlesztett kiértékelési technikák alkalmazásával felderítették számos összetett szervetlen kémiai reakciórendszer kinetikáját és lehetséges mechanizmusát. Az oxidációs folyamatok vizsgálatával kapott eredményeiket felhasználják a vegyiparban. A DE vizes közegű fémorganikus katalízis terén elért eredményei a Szervetlen kémia és anyagtudomány fejezetben olvashatók.

Az ELTE egyik erőssége a kvantumkémiai módszerfejlesztés. Kidolgozták a focal-point analysis technikát, az első nagypontosságú, hibabecsléssel kiegészített ún. kompozit elektronszerkezet-számítási módszert, amely alapul szolgált további hasonló eljárások kifejlesztéséhez. Megalkották a spektroszkópiai hálózatok elméletét és a MARVEL (Measured Active Rotational-Vibrational Energy Levels) eljárást, amelyet külföldön is széles körben használnak a nagyfelbontású és ultraprecíz módszerekkel kapott forgási-rezgési spektrumok rendszerezésére. E témakörben végzett igen pontos számításaik eredményei egyediek a nemzetközi irodalomban. Az egyetem nagyhírű elektrokémiai iskolájában speciális, *in situ* alkalmazható radioaktív nyomjelzéses technikát és többszörös szimultán voltammetriás vizsgálati módszereket fejlesztettek ki, és segítségükkel felderítették több elektrokémiai folyamat mechanizmusát. Számos vezető polimert szintetizáltak, és felderítették redoxifolyamataik mechanizmusát. Elvégezték a perklorát ionok elektrokémiai redukciós folyamatainak kimerítő vizsgálatát. Korszerű berendezésekkel megállapították a szilárd fémes fázist tartalmazó elektródok mechanikai feszültségállapotát leíró törvényszerűségeket. Intenzív

kolloidkémiai kutatásaik során előállítottak és szabadalmaztattak biodegradábilis, nanoszerkezetű, szabályozott hatóanyagleadásra képes gyógyszerhordozókat. A nano-konstrukciók eredményesek voltak *in vitro* és *in vivo* kísérletekben, növelve a reuma és a tuberkulózis kezelések hatékonyságát. Az UV és látható tartományban egyaránt transzparens alumínium-oxid nanoréteget állítottak elő, amely a LightTech Kft-ben biológiai úton tisztított szennyvizek gyógyszermaradványainak fotokatalitikus eltávolítására kifejlesztett technológia alapjául szolgál. A reakciókinetika területén kidolgozták az összetett reakciómechanizmusok kiértékelési módszertanának matematikai alapjait, és jelentősen továbbfejlesztették a kinetikai paraméterbecslés, mechanizmusépítés és modellredukció módszereit. Az új módszerekkel elvégezték számos, ipari szempontból fontos égési folyamatra vonatkozó, mintegy száz év alatt publikált eredmények minden korábbinál alaposabb átfogó kiértékelését.

A VE-n és utódintézményében, a PE-n ipari célokra heterogén katalitikus eljárásokat dolgoztak ki, ezek közt legjelentősebb a zeolitkatalízis alkalmazása üzemanyagok és adalékaik előállítására. Homogén katalízis-vizsgálataik egyik fő eredménye vastartalmú oxidoreduktáz enzimek szintetikus modellezésére alkalmas Fe(IV)O és Fe(III)(μ-O_2)Fe(III) komplexek előállítása és alkalmazása az enzimműködés mechanizmusának feltárására. Szisztematikus eljárást dolgoztak ki fémionok sztereoaktív koordinálására, amellyel tervezhető tulajdonságú hatékony enantioszelektív katalizátorokat állítottak elő. Sikeres modellszámításokat végeztek a sejtműködésben fontos ioncsatornák jellemzésére. Felderítették ruténium-komplexek egyes családjainak és átmenetifémek porfirinkomplexeinek fotokémiai tulajdonságait és alkalmazhatóságukat fotokatalitikus célokra.

A PTE-n szervetlen vegyületek egzotikus reakcióinak kinetikai vizsgálatában értek el nemzetközileg jegyzett eredményeket. A matematikai reakciókinetika területén a BME, DE és PTE kutatóival együttműködésben kiterjesztették a sztochasztikus reakciókinetika elméleti alapjait és konkrét példákon keresztül kidolgozták a kísérleti információkkal való összehasonlítás módszertanát. Bebizonyítottak több, a kémiai reakciórendszerek sztöchiometriájára és kinetikájára vonatkozó alapvető matematikai tételt.

Az SZTE-n és elődintézményeiben nemzetközileg elismert eredményeket értek el a heterogén katalízis mechanizmusának vizsgálatával. Ismereteik alapján módosított fémkatalizátorokat terveztek és állítottak elő prokirális vegyületek királis termékekké alakítására. Érdemben hozzájárultak a fémkatalízis egyik nagy problémájának, a hordozó-katalizátor kölcsönhatás jelenségének felfedezéséhez és magyarázatához. Újfajta zeolitokat szintetizáltak és jellemeztek, és alkalmazták őket sav- illetve báziskatalízist igénylő reakciókban. Nemzetközi figyelmet keltettek a szén, illetve titanát nanocsövek katalitikus szintézisében, továbbá réteges vegyületek katalitikus hatásmechanizmusának felderítésében elért eredményeik is. Elektrokémiai iskolájuk egyik fontos eredménye, hogy meghatározták az elektromosan vezető szerves polimerek előállításának és redoxi folyamatainak mechanizmusát. *In situ* kombinált elektrokémiai technikák szinkronizált alkalmazásával meghatározták a gyakorlatban alkalmazható gyors vezetővé alakulás kritériumát. A Lendület program és az ERC támogatásával felépült egy nemzetközi mércével is versenyképes kutatócsoport, amelynek fő területe a szén-dioxid elektrokémiai és fotoelektrokémiai úton történő átalakításának vizsgálata. A csoportnak sikerült azonosítani néhány fontos szerkezet-hatás összefüggést, és nemzetközi visszhangot váltottak ki a szén-dioxidot átalakító elektrokémiai cellák méretnövelése területén elért eredményeik. Az egyetem kolloidkémiai iskolájának sikerei közé tartozik terápiára és diagnosztikára is alkalmas mágneses nanorészecskék tervezése és előállítása és alkalmaz-hatóságuk felderítése. Szerkezeti modellt javasoltak és minősítették a grafit-oxid határfelület fizikai-kémiai tulajdonságait. A biokoordinációs kémiai kutatásaik eredményei alapján több gyógyszer született, közülük gyógyszertári forgalomba került a sebgyógyulást segítő cink-hialuronát. Előállítottak és jellemeztek számos antidiabetikus hatású fémkomplexet, neurodegeneratív betegségekben felhasználható terápiás szereket, rákellenes fémkomplexeket,

toxikus fémionok megkötésére alkalmas peptideket és fehérjéket és bizonyos genetikai hibák korrekciójára alkalmas mesterséges nukleázokat. Felderítették a kifejlesztett, humán terápiára alkalmas vegyületek fizikai-kémiai, szerkezeti és biológiai tulajdonságai közti kapcsolatokat a farmakokinetikai sajátságok, hatásmechanizmus és a kialakuló mellékhatások megértése céljából. Az elméleti reakciódinamika területén új módszert vezettek be az S_N2 reakciók dinamikájának elméleti vizsgálatára, amely egy új, dupla inverziónak nevezett reakcióút felfedezéséhez, a reaktánsok közt kialakuló komplex szerepének megértéséhez és a kísérletekkel minden korábbinál pontosabb egyezéshez vezetett.

Kiemelendő a nemlineáris kémiai dinamikai jelenségek vizsgálata, egy olyan terület, amelyet az ország több kutatóhelyén művelnek nemzetközi szaktekintélyek vezetésével. A BME, a DE, az EK, az ELTE, a PTE és az SZTE kutatócsoportjai térben és időben periodikus kémiai rendszerek tervezett előállítását lehetővé tevő kísérleti módszereket dolgoztak ki, és azokat széles körben alkalmazták a reakciók és transzportfolyamatok közötti kölcsönhatások meghatározására. Jellemezték kémiai és elektrokémiai rendszerek dinamikai instabilitásait és számos példát mutattak káoszszabályozási eljárásokra. A kísérleti tapasztalatok és elméleti megfontolások alapján megfogalmazták a kémiai hullámok univerzális diszperziós törvényét.

Szerteágazó együttműködéseik mellett a hazai fizikai-kémikusok aktívan részt vesznek a nemzetközi tudományos életben. Számos nemzetközi jelentőségű konferenciát szerveztek, és folyóiratok szerkesztőbizottságában, valamint nemzetközi tudományos testületekben töltöttek/töltenek be vezető pozíciókat.

Kiemelkedő hatású közlemények

Bourlinos, A. B., Gournis, D., Petridis, D., Szabó, T., Szeri, A., Dékány, I.: *Graphite oxide: Chemical reduction to graphite and surface modification with primary aliphatic amines and amino acids.* LANGMUIR, 19, 6050-6055 (2003)

Császár, A. G., Allen, W. D., Schaefer, H. F.: *In pursuit of the ab initio limit for conformational energy prototypes.* J. Chem. Phys., 108, 9751-9764 (1998)

Erdőhelyi, A., Cserényi, J., Solymosi, F.: *Activation of CH_4 and its reaction with CO_2 over supported Rh catalysts.* J. Catal., 141, 287–299 (1993)

Fogarasi, G., Zhou, X. F., Taylor, P. W., Pulay, P.: *The calculation of ab initio molecular geometries: efficient optimization by natural internal coordinates and em- pirical correction by offset forces.* J. Am. Chem. Soc., 114, 8191–8201 (1992)

Inzelt, G., Pineri, M., Schultze, J. W., Vorotyntsev, M. A.: *Electron and proton conducting polymers: recent developments and prospects.* Electrochim. Acta, 45, 2403-2421 (2000)

Kállay, M., Surján, P. R.: *Higher excitations in coupled-cluster theory.* J. Chem. Phys., **115**, 2945–2954 (2001)

Kotov, N. A., Dékány, I., Fendler, J. H.: *Layer-by-layer self-assembly of polyelectrolyte-semiconductor nanoparticle composite films.* J. Phys. Chem., 99, 13065-13069 (1995)

Lónyi, F., Valyon, J.: *On the interpretation of the NH_3-TPD patterns of H-ZSM-5 and H-mordenite.* Micropor. Mesopor. Mat., 47, 293301 (2001)

Pajkossy, T.: *Impedance of rough capacitive electrodes*. J. Electroanal. Chem. Interf. Electrochem., 364, 111-125 (1994)

Petrov, V., Gáspár, V., Masere, J., Showalter, K.: *Controlling chaos in the Belousov–Zhabotinsky reaction.* Nature, 361, 240–243 (1993)

Szabó, T., Berkesi, O., Forgó, P., Josepovits, K., Sanakis, Y., Petridis, D., Dékány, I.: *Evolution of surface functional roups in a series of progressively xidized graphite oxides*. Chem. Mater., 18, 2740–2749 (2006)

Tajti, A., Szalay, P.G., Császár, A.G., Kállay, M., Gauss, J., Valeev, E.F., Flowers, B.A., Vazquez, J., Stanton, J.F. *HEAT: High accuracy extrapolated ab initio ihermochemistry,* J. Chem. Phys., 121, 11599–11613 (2004)

Turányi, T.: *Sensitivity analysis of complex kinetic systems. Tools and applications.* J. Math. Chem., 5, 203–248 (1990)

Hazai rendezésű nemzetközi konferenciák

International Symposium on Metal Complexes, 2019, Debrecen/Hajdúszoboszló
35th International Conference on Solution Chemistry, 2018, Szeged
3rd AMOC (Anharmonicity in Medium-Sized Molecules and Clusters) Conference, 2018, Budapest
1st International Conference on Reaction Kinetics, Mechanisms and Catalysis, 2018, Budapest
11th Conference on Colloid Chemistry – New dimensions of colloids. 2018, Eger
14th Joint European Thermodynamics Conference, 2017, Budapest
Mathematics in (bio)Chemical Kinetics and Engineering 2017, Budapest
EUROBIC-13 13th European Biological Inorganic Chemistry Conference, 2016, Budapest
33th European Congress on Molecular Spectroscopy (EUCMOS-2016), 2016, Szeged
7th European Combustion Meeting – ECM2015, 2015, Budapest
3rd Topical Workshop: Taming Uncertainty in Combustion Chemistry: Experiments and Models, 2015, Budapest
GK2014, International Symposium on Gas Kinetics and Related Phenomena, 2014, Szeged
CESTC 2014, Central European Symposium on Theoretical Chemistry, 2014, Nagybörzsöny
2nd European Colloquium on Inorganic Reaction Mechanisms, 2014, Debrecen
23rd Colloquium on High-Resolution Molecular Spectroscopy, 2013, Budapest
EUCO-CC9 - 9th European Conference on Computational Chemistry, 2013, Sopron
Debrecen Colloquium on Inorganic Reaction Mechanisms 2013, Debrecen
10th Conference on Colloid Chemistry - Innovative systems for sustainable development, 2012, Budapest
T4 Conference: Turbulence, transfer, transport, and transformation: interactions among environmental systems, 2012, Budapest
4th European Conference on Chemistry for Life Sciences, 2011, Budapest
10th International Symposium on Applied Bioinorganic Chemistry, 2009, Debrecen
Central European Symposium on Theoretical Chemistry, 2009, Dobogókő
Molecular Quantum Mechanics: Analytic Gradients and Beyond, A Conference in Honor of Professor Peter Pulay, 2007, Budapest
9th Conference on Colloid Chemistry – Colloids for nano- and biotechnology, 2007, Siófok
SAMO 2007, International Conference on Sensitivity Analysis of Model Output, 2007, Budapest
20th Conference of the European Colloid and Interface Society and 18th European Chemsitry at Interfaces Conference, 2006, Budapest
22nd European Crystallographic Meeting, 2004, Budapest
4th International Vanadium Symposium, 2004, SzegedCESTC 2004, Central European Symposium on Theoretical Chemistry, 2004, Tihany
NATO Advanced Research Workshop, Theory of Chemical Reaction Dynamics, 2003, Balatonföldvár
28th International Conference on Solution Chemistry, 2003, Debrecen
XIX. IUPAC Symposium on Photochemistry, 2002, Budapest
18th International Conference on Raman Spectroscopy (ICORS-2002), 2002, Budapest
8th Conference on Colloid Chemistry, 2002, Keszthely
14th International Symposium on the Photochemistry and Photophysics of Coordination Compounds, 2001, Veszprém
5th International Symposium on the Interdisciplinary Regional Research Conference, 2001, Szeged

EUCO-CC3 – Third European Conference on Computational Chemistry, 2000, Budapest
Third International Conference of the Kolloid-Gesellschaft, Adsorption and nanostructures – From theory to application, 2000, Budapest
Inorganic Reaction Mechanisms Meeting 97, 1998, Debrecen
COST-ESF Workshop on Biological and Medicinal Aspects of Metal Ion Speciation, 1998, Szeged
23th European Congress on Molecular Spectroscopy (EUCMOS), 1996, Balatonfüred
NATO Advanced Research Workshop on Nanoparticles in Solids and Solutions. An integrated approach to their preparation and characterization, 1996, Szeged
7th Conference on Colloid Chemistry in memoriam Aladár Buzágh, 1996, Eger
10th International Conference on Fourier-transform Spectroscopy (ICOFTS), 1995, Budapest
Aqueous Organometallic Chemistry and Catalysis, NATO Advanced Research Workshop, 1994, Debrecen
6th Conference on Colloid Chemistry in memoriam Géza Schay, 1992, Balatonszéplak

Jelentős nemzetközi pályázatok, együttműködések

NanoS3, Marie-Curie Initial Training Network, *Soft, Small, and Smart: Design, Assembly, and Dynamics of Novel Nanoparticles for Novel Industrial Applications*
Horizon 2020 SMEINST-2-2014, Optilight, *Increasing the efficiency of LED street lighting by 15% via optical design*
Nanobond—*Integration of emerging soft nanotechnology into the functionalisation of textiles* (No: 228490) FP7-NMP-2008-SME-2
ESF Research Networking Programme in Nonlinear Dynamics
ERC Starting Grant, HIGHACCTC: *High-accuracy models in theoretical chemistry* (2008–2013)
ERC Starting Grant, HybridSolarFuels: *Efficient Photoelectrochemical Transformation of CO_2 to Useful Fuels on Nanostructured Hybrid Electrodes* (2017–2021)
ERC Starting Grant, POLYQUANT: *Theoretical developments for precision spectroscopy of polyatomic and polyelectronic molecules* (2020–2024)
ERC Proof of Concept Grant, PID PEC–Flow: *Continuous-flow Photoelectrochemical Cells for Carbon Dioxide Valorization* (2020–2021)
SNSF PROMYS Grant, IZ11Z0_166525: *Molecular quantum dynamics* (2016–2021)

Megadott és bevezetett szabadalmak

A fizikai kémia területén dolgozók több mint 70 szabadalmat jegyeznek. Ezek közül ipari alkalmazást nyertek a következők:

Balázs J., Dékány I., Fülöp J., Menyhárt Jné, Patzkó Á., Szántó F, Várkonyi B.: *Eljárás lipofil bentonit előállítására.* Magyar Szabadalom, 199 348, 1990.
Balázs J., Dékány I., Szántó F., Várkonyi B., Patzkó Á.: *Eljárás fokozott mértékben megnövelt duzzadóképességű organofil bentonitok előállítására*. Magyar Szabadalom, 203 684, 1991.
Balázs J., Dékány I., Bodola M., Dormán J., Drávucz I., Udvardi F.: *Késleltetett hatású szervetlen és/vagy szerves savakat tartalmazó, olajközegű, tenzidmentes mikroemulziók, szénhidrogén-termelő kutak kúttalp körüli zónájának és a hozzátartozó rétegek kezeléséhez.* Magyar Szabadalom, 216 296, 1997.
G. Besenyei, S. Németh, L. Simándi, M. Belák, M. Szabó, J. Dukai, L. Nagy, E. Tömördi, Cs. Söptei, E. E. Diószegi: *Process for preparing N-sulphonyl-ureas,* Assignees: Nitrokémia

Ipartelepek, Fűzfőgyártelep; MTA Központi Kémiai Kutató Intézete, Budapest, US 4,954,628, Sep. 4, 1990.

Bokor F., Kovács T., Szende Gy., Tokár I., Vrabély E., Szántó F., Balázs J., Dékány I., Gáspár P., Várkonyi B.: *Folyékony, alkoholos öntödei forma- és magbevonó kompozíció.* Magyar Szabadalom, 200 123, 1990.

Bokor F., Kovács T., Szende Gy., Tokár I., Vrabély E., Szántó F., Balázs J., Dékány I., Gáspár P., Várkonyi B.: *Folyékony öntödei forma- és magbevonó kompozíció.* Magyar Szabadalom 200 124, 1990.

Engelhardt T., N.Schall, P.Sellmayr, H.Coutelle, I.Dékány, Á.Patzkó: *Verbundmaterial mit Polymermatrix und anionisch interkalierten schichtförmigen Doppelhydroxiden. Composite material with a polymer matrix and anionically intercalated stratified double hydroxides.* Deutsche Patentamt, 198 36 580.2, EU közzététel 2000.02.24.

Fekete, M., Lónyi, F., Papp, J., Pető, L., Tassy, M., Valyon, J.: *Flocculant Agent and Method for Producing of it by Hydrometalurbical Clearing up of Carbonated Iron Ore,* P0700247, 2009. 04. 28.

E. Szalay, Gy. Lugosi, T.U. Kállay, Zs. Nád, I. Jelinek, V. Simonidesz, P. Győry, L. Nagy, M. Lugosi, I. Sánta, G. Besenyei, L. Simándi: *Process for the preparation of pharmaceutical compositions,* Assignee: Chinoin Gyógyszer- és Vegyészeti Termékek Gyára Rt., Budapest, US 4,960,913, Oct. 2, 1990.

G. Reinhardt, M. Seebach, N. Reichardt, L.I. Simándi, T. M. Simándi, G. Besenyei: *Transition metal complexes with oxime ligands used as bleach catalysts,* Assignee: Clariant GmbH, EP 1225215, 24. 07. 2002.

Themesz A., Boda L., Petró J.,....Valyon J., Onyestyák Gy., Hancsók J., Krár M., Nagy G., Varga Z., *Belső égésű motoroknál használható hajtóanyagok és hajtóanyag-adalékok, valamint eljárás ezek előállítására,* P0900739, EP2305778B1, 2016. 12. 07.

Vezető tisztségek nemzetközi szervezetekben

Bérces Tibor: IUPAC Task group Chair
Bombicz Petra: ECA SIG13 munkacsoport társelnök, majd elnök
Bombicz Petra: European Crystallographic Association (ECA) titkár
Császár Attila: IUPAC Division I (Physical and Biophysical Chemistry) titkár és kincstárnok
Császár Attila: MOLIM: Molecules in Motion COST akció elnök
Dékány Imre: Deutsche Kolloidgesellschaft elnökségi tag
Inzelt György: International Society of Electrochemistry Division 1 elnök, majd Division 2 elnök
Jedlovszky Pál: European Molecular Liquids Group elnök
Kálmán Alajos: International Union of Crystallography (IUCr) alelnök
Kálmán Erika: International Society of Electrochemistry főtitkár majd elnök
Náray-Szabó Gábor: Federation of European Chemical Societies and Professional Institutions (FECS) majd European Chemical Society (EuChemS) elnök
Sohár Pál: International Society of Magnetic Resonance ISMAR Council tag
Szalay Péter: European Chemical Society Computational Chemistry Division, elnökhelyettes, majd elnök
Tombácz Etelka: Interfaces Against Pollution, nemzetközi tanácsadó bizottsági tag
Tombácz Etelka: International Humic Substances Society, választmányi tag
Turányi Tamás: IUPAC Task group Chair

Nemzetközi vagy külföldi kitüntetések, díjak

Dékány Imre: Canon Alapítvány díja (1999)

Dékány Imre: Eduard Raphael Liesegang-díj (2000)
Császár Attila: Sir Harold Thompson Award (1997)
Fábián István: Professor Honoris Causa Delhi School of Professional Studies and Research, New Delhi, India (2011); Vasile Goldis Western University of Arad, Románia (2012)
Hargittai István, Dr.h.c., Lomonosov Moscow State University (1994)
Hargittai István, tag, Academia Europae (1994)
Hargittai István, First George A. Olah Lectureship (1996)
Hargittai István, Dr.h.c., University of North Carolina (2000)
Hargittai István, Dr.h.c., Orosz Tudományos Akadémia (2004)
Hargittai Magdolna, Dr.h.c. University of North Carolina (2000)
Hargittai Magdolna, tag, Academia Europaea (2006)
Hargittai Magdolna: Distinguished Women in Chemistry/Chemical Engineering Award, IUPAC (2011)
Inzelt György: Fellow of the International Society of Electrochemistry
Janáky Csaba: ISE Prize for Electrochemical Materials Science (2017)
Kállay Mihály: Medal of the International Academy of Quantum Molecular Science (2009)
Kálmán Alajos: Chemistry Europe Fellowship (2019)
Kiss Tamás: Vanadis Award (2017)
Láng Győző: International Society of Electrochemistry, Tajima Prize (1997)
Náray Szabó Gábor: European Academy of Sciences and Arts választott tag (2019)
Szalay Péter: European Academy of Sciences and Arts választott tag (2019)
Szalay Péter: International Academy of Quantum Molecular Science választott tag (2019)
Tóth János: Lifetime Achievement Award in Mathematics in Chemical Kinetics and Engineering, (2017)
Turányi Tamás: Fellow of the Combustion Institute (2019)
Zrínyi Miklós: Canon Alapítvány díja (2000)

Szerkesztők

Buglyó Péter, Lendvay György