Szervetlen kémia és anyagtudomány

Az elmúlt 30 évben maradandó eredmények születtek a *polimertudomány* területein a hazai kutatóhelyeken. A polimerek kristályosodásának és olvadásának vizsgálata területén a BME-n végeztek iskolateremtő kutatásokat az elmúlt évtizedekben. Legfontosabb eredmények a polipropilén β-módosulatának előállítása tiszta formában és a polipropilén olvadási memória effektusának részletes leírása. Szabadalmaztatott eljárást dolgoztak ki, melyben a tiszta β-polipropilént nagy hatékonyságú gócképző alkalmazásával állítottak elő. Az alkalmazott méréstechnikák a kalorimetria és a termo-optikai mikroszkópos módszerek voltak, melyek során a kristályosodás folyamatát tanulmányozták. A mikroszkópos felvételeik mai napig nemzetközileg is etalonnak számítanak.

Az MTA TTK és a BME közös Polimer Fizikai Kutatócsoportjának tevékenysége a *polimerkeverékek és kompozitok* vizsgálatát fogja át. Különösen kiemelkedőek az ezekben a többalkotós rendszerekben fellépő határfelületi jelenségek törvényszerűségeinek tisztázására irányuló vizsgálatok, és ezek tudományos igényű értelmezése. A polimerek szakítási jellemzőinek összetételfüggését leíró modelljük különösen népszerű és gyakran alkalmazott a polimer kompozitokat kutatók körében. A csoport tevékenységében mindig fontos szerepet játszottak az alkalmazott feldolgozás-technológiai kutatások (PVC stabilizálása, ömledékek folyási tulajdonságai, a feldolgozási paraméterek-szerkezet-tulajdonság hármas kapcsolat felderítése stb.), amelyek az ipar aktuális igényeinek kielégítését is szolgálták. Az utóbbi években fontos eredményeket értek el a nano- és biokompozitok, biológiailag lebomló polimerek, természetes töltő- és erősítőanyagok, valamint az orvosbiológiai jelentőségű polimerek területén is.

Az MTA TTK-n működő Polimer Kémiai Kutatócsoport kiemelkedő eredményeket ért el a polimertudomány több területén is. Vizsgálták a PVC termikus degradációját, és új elméletet dolgoztak ki a PVC stabilizálásának mechanizmusára. Új típusú poliizobutiléneket, illetve poliizobutilénen alapuló szupramolekuláris kölcsönhatással térhálós rendszereket állítottak elő. Új elméletet dolgoztak ki a karbokationos polimerizáció mechanizmusának tárgyalására. Kidolgozták új típusú térhálós polimer rendszerek, az amfifil kotérhálók szintézisének általánosan alkalmazható módszereit, és részletesen vizsgálták ilyen rendszerek tulajdonságait. Kontrollált molekuláris szerkezettel rendelkező amfifil kotérhálókat állítottak elő és jellemezték a tulajdonságaikat.

A *természetes polimerek* kutatása a három évtized alatt nagy változáson ment át. A textil- és papíriparban hagyományosan alkalmazott természetes nyersanyagok területén felgyűlt tudományos tapasztalatokat kiválóan lehetett kamatoztatni a fenntartható fejlődés diktálta új területeken, mind a felfedező, mind az alkalmazott kutatásokban. Elsősorban a természetben a legnagyobb mennyiségben előforduló megújuló nyersanyag, a cellulóz, annak különböző megjelenési formái (pamut, len, különböző fafajták, ipari fű) és kísérőanyagai (lignin, a faanyag összetevői) álltak a kutatások fókuszában. Az alábbiakban felsorolunk néhány példát az ilyen irányú felfedező és innovatív kutatásokra, amelyek többsége nemzetközi, illetve ipari kooperációban folyt: cellulóz fizikai és kémiai módosítása (BME, Linzi Johannes Kepler Egyetem); környezetbarát (enzimes), ipari bevezetést nyert textilipari technológiák (BME); ipari fű papíripari alkalmazása (BME, Mezőgazdasági Kutató-Fejlesztő Közhasznú Társaság, Centre Technique du Papier Grenoble; 2006-ban a Nemzeti Fejlesztési Ügynökség Különdíja); hulladékpapír feldolgozása (BME, Papíripari Kutatóintézet Kft., EcoPaperLoop Projekt, 6 ország részvételével); papíripari szennyvíz új rendszerű biológiai tisztítása (BME, Papíripari Kutatóintézet Kft., 4 ország részvételével); faanyag abiotikus degradációja, aktív fényvédelme, fa ragasztása (Soproni Egyetem, Hamburgi Egyetem, TVK Lakk- és Festékgyára, SOFA Soproni Faipari Rt.); katasztrófavédelmi kesztyű (INNOVATEXT Textilipari Műszaki

Fejlesztő és Vizsgáló Intézet Zrt., European Technology Platform, Fraunhofer Intézet); nanocellulóz előállítása (BME).

Az elmúlt évtizedekben előtérbe került a *felületi jelenségek, vékonyrétegek és nanoszerkezetek* kutatása is. A terület művelői kezdettől fogva nagy figyelmet fordítottak a felületvizsgáló módszerek kifejlesztésére és hazai megvalósítására. Fontos megemlíteni az ilyen irányú kimagasló erőfeszítéseket az MTA MFA-ban, az MTA–SZTE Reakciókinetikai és Felületkémiai Kutatócsoportban, a BME-n, az ATOMKI-ban, a TTK-ban valamint az MTA IKI-ben.

Az MTA MFA-ban vékonyréteg iskolát teremtettek, új transzmissziós elektronmikroszkópos (TEM) módszereket, ionsugaras porlasztási technikát, elektrondiffrakció elemző szoftvert vezettek be. Feltárták vékonyrétegek, nanoszerkezetek kialakulásának alapvető mechanizmusait, in situ TEM- és mikrokombinatorikus vizsgálati módszereket dolgoztak ki. Az MTA MFA-ban súrlódó szögű kis energiás ionbombázásos technikán alapuló nagy mélységi felbontású Auger- továbbá rugalmas csúcs elektronspektroszkópiát (EPES) fejlesztettek ki. Az EPES-t az ISO szabvánnyá minősítette. Az ATOMKI-ban a hazai első röntgen-fotoelektron-spektrométer megépítésével és kémiai analízis céljára alkalmazott röntgen-fotoelektron-spektroszkópiai (ESCA) módszer meghonosításával felületi rétegek és határrétegek szerkezetének kutatása terén értek el kimagasló eredményeket. A SZTE-n működő MTA kutatócsoportban a meglévő elektronspektroszkópiai módszerek mellé nagy felbontású elektron energiaveszteségi (HREELS) és kis energiájú ionszórásos (LEIS) spektroszkópiát vezettek be. A TTK-ban sikeresen alkalmazzák a felület módosítására az röntgen-fotoelektron-spektroszkópiával ellenőrzött hidegplazmás eljárást.

A MTA–SZTE kutatócsoportban és az MTA EK MFA-ban kimagasló eredményeket értek el a kétdimenziós (2D) szerkezetek pásztázó alagút mikroszkópos (STM) jellemzésében. Az SZTE kutatócsoportban bór-nitrid 2D réteget fejlesztettek ki, mely alkalmas fém nanorészecskék kontrollált rögzítésére. Az MTA EK MFA-ban grafén réteg és grafén-alapú eszközök STM-es nanomegmunkálását dolgozták ki és az MTA EK EKBI-vel (MTA IKI utódja) együttműködésben kimutatták, hogy a MoS_2 egyrétegben oxidációs szubsztitúció a katalitikus vízbontás aktivitását jelentősen megnöveli. Az ATOMKI-ban az orvosi implantátumoknál alkalmazott titán felületen nanostruktúrált kalcium-szilikát (CaSi) vékonyréteget hoztak létre elektrosztatikus szórás (electrospray) rétegleválasztási módszer alkalmazásával.

Az MTA–SZTE kutatócsoportban, az MTA IKI-ben, TTK-ban és a BME-n a felületkutatások eredményeit sikeresen alkalmazzák katalizátorok fejlesztésére és a felületen végbemenő technológiai folyamatok mechanizmusának feltárására. A vizsgált katalitikus folyamatok elsősorban új energiaforrások előállítását és a környezetre káros komponensek csökkentését szolgálják. Az MTA Wigner FK-n és a BME-n folyó elméleti számítások kibővítik a felületkutatás eredményeit.

A DE-n, illetve az egyetemen működő MTA kutatócsoportokban úttörő kutatásokat folytattak a *szervetlen kémia* területein. Új ligandum családok (PTA, NHC, szulfonált szalánok) és ezek fémkomplexei, továbbá félszendvics tipusú M-arén komplexek alkalmazását kezdeményezték. Ezek kiváló katalizátorai hidrogénezési, para-hidrogénezési, deuterálási, hidrogénátviteli és redox izomerizációs folyamatoknak. Kiemelkedőek az alkinek és nitrilek hidratálásában és C-C kapcsolási folyamatokban nyert eredményeik. Nagy stabilitású Ru(II)-, Rh(I)- és Ir(I)-katalizátorokkal megvalósították CO_2 és hidrogén-karbonátok hidrogénezését vizes közegben, továbbá a hangyasav bontását H_2-re és CO_2-re. Az eredmények alapján reverzibilisen működő hidrogéntároló rendszereket (hidrogén akkumulátorokat) alkottak meg. Az MTA SZBK kutatóival együttműködésben, nem toxikus vízoldható katalizátorokat alkalmaztak lipid diszperziók, sejtorganellumok és élő sejtek membránjaiban található telítetlen lipidek (zsírsavészterek) hidrogénezésére. Kimutatták, hogy a lipidek hidrogénezése a

membránok megmerevedéséhez vezet, de egyúttal az optimális membránösszetétel helyreállítására irányuló molekuláris folyamatokat is elindít. Ez lehetőséget nyújtott a hidegstressz hatásainak értelmezésére, és egy, a sejtek hőérzékelésére vonatkozó új hipotézis kidolgozására.

A PTE és az MTA–PTE Szelektív Kémiai Szintézisek Kutatócsoportja nagy hatékonyságú, szén-monoxid építőelemet alkalmazó átmenetifém-katalizált karbonilezési reakciókat valósított meg. A fenti homogénkatalitikus eljárásokkal megoldották farmakológiai fontosságú enantiomerek enantioszelektív szintézisét, valamint aromás és heteroaromás vegyületek új funkciós csoportjainak kiépítését. A reakciók mechanizmusának felderítésével megnyitották az utat további, gyakorlati jelentőségű származékok szintézise felé.

Az MTA TTK Kémiai Krisztallográfia Kutatólaboratórium jelentős eredményeket ért el a polimorfia és a szupramolekuláris kémia területén szerves, elemorganikus és komplex vegyületekkel. Kristálymérnöki feladatokat, a szilárd anyag makroszkópikus tulajdonságainak változtatását valósították meg a szerkezeti tulajdonságok finomhangolásán keresztül. Bevezették a „synthon engineering" fogalmát. Az izostrukturalitási indexek kidolgozása, a szupramolekulárisan kiváltott morfotrópia jelenségének felismerése is a csoporthoz fűződik.

Az ELTE munkatársai új, kételektron fragmensből építkező elektronszerkezeti modelleket dolgoztak ki, amelyek tükrözik a molekulák Lewis-szerkezete mögött húzódó elméleti képet. Vizsgálták a modell ún. spin-megszorítás nélküli változatát. Kidolgozták ennek teljes majd részben megszorított variánsát. Foglalkoztak olyan új elektronkorrelációs megközelítésekkel, amelyek kiindulópontját a kételektron fragmens alapú modell fent említett változatai jelentik.

Kiemelkedő hatású közlemények

Barna, P. B., Adamik, M.: *Fundamental structure forming phenomena of polycrystalline films and the structure zone models.* Thin. Solid. Films, 317, 27–33 (1998)

Joó, F.: *Aqueous biphasic hydrogenations,* Acc. Chem. Res., 35, 738–745 (2002)

Pukánszky, B.: *Influence of interface interaction on the ultimate tensile properties of polymer composites.* Composites, 21, 255–262 (1990)

Pukánszky, B.: *Interfaces and interphases in multicomponent materials: Past, present, future.* Eur. Polym. J., 41, 645–662 (2005)

Varga, J.: *Beta-modification of isotactic polypropylene: preparation, structure, processing, properties, and application.* J. Macromol. Sci.-Phys., B41, 1121–1171 (2002)

Varga, J., Mudra, I., Ehrenstein, G. W.: *Highly active thermally stable beta-nucleating agents for isotactic polypropylene,* J. Appl. Polym. Sci., 74, 2357–2368 (1999)

Pető, J., Ollár, T., Vancsó, P., Popov, Z.I., Magda, G.Z., Dobrik, G., Hwang, C., Sorokin, P.B., Tapasztó, L.: *Spontaneous doping of the basal plane of MoS_2 single layers through oxygen substitution under ambient conditions.* Nat. Chem., 10, 1246-1251 (2018)

Hazai rendezésű nemzetközi konferenciák

23th Congress of International Federation of Associations of Textile Chemists and Colourists 2013.

European Conference on Applications of Surface and Interface Analysis 1991.

European Conference on Surface Science Meting 2017.

JTACC+V4 1st Journal of Thermal Analysis and Calorimetry Conference and 6th V4 (Joint Czech-Hungarian-Polish-Slovakian) Thermoanalytical Conference 2017.

18th International Conference on Thin Films & 18th Joint Vacuum Conference 2020.

4th International Conferences on Bio-based Polymers and Composites (BiPoCo) 2018.

International Symposium on Polymer Conetworks, Gels and Membranes – Science, Technology and Applications, Budapest, 2005.

Symposium on Polymer Architecture – From Structure to Functional Control (Budapest, August 30 - September 1, 2006) (in connection with the 1st European Chemistry Congress, Budapest, 2006.

International Conference on Bio-Friendly Polymers and Polymer Additives: From Scientific Aspects to Processing and Applications (BPPA14) Budapest, 2014.

MailScanner has detected a possible fraud attempt from "aki.ttk.mta.hu" International Symposium on Amphiphilic Polymers, Networks, Gels and Membranes (APNGM15) Budapest, 2015.

World Congress on Living Polymerizations and Polymers (LPP16) Budapest, 2016.

Jelentős nemzetközi pályázatok, együttműködések

Korszerű, környezetre ártalmatlan polimerek (Advanced Biofriendly Polymers, POLYFRIEND), EU European Regional Development Fund pályázat, 2012-2014

Megadott és bevezetett szabadalmak

G. Crass, B. Iván, G. Erdődi, Á. Máthé: *Use of Quaternised Dialkylaminoalkyl (Meth)Acrylates as Soil Release Polymers for Hard Surfaces and a Method for Production Thereof*, WO PATENT 03/002620 (2003)

G. Crass, U. Falke, B. Iván, G. Erdődi, Á. Máthé: *Polymers Having Biocidal Activity, Process for Their Preparation and Their Use*, EP PATENT 1331231 (2003)

Nemzetközi vagy külföldi kitüntetések, díjak

Barna B. Péter: American Vacuum Society, Albert Nerken Award (2003)
Barna B. Péter: American Vacuum Society, R.F. Bunshah Award (2015)
Barna B. Péter: IUVSTA Science Prize (2010)
Bazsa György: Sevcsenko Nemzeti Egyetem Kijev, díszdoktor (1999)
Kónya Zoltán: George Hevesy Award, German Chemical Society (2017)
Solymosi Frigyes: Aurel Vlaicu Egyetem, Arad, díszdoktor (2003)
Joó Ferenc: Chemistry Europe Fellowship (2019)
Joó Ferenc: a Spanyol Királyi Kémiai Társaság Premio Hispano-Húngaro Gamboa–Winkler díja (2015)

Szerkesztő

Kállay Mihály