

# A Fizikai Kémiai Tudományos Bizottság

## beszámolója

### a 2020. évben végzett tevékenységéről

(A beszámolóban az évet sújtó COVID járvány miatt az online események is/vagy kerüljenek felsorolásra)

1. A tudományos/állandó/osztályközi bizottság neve:  
Fizikai Kémiai Tudományos Bizottság
2. A tudományos/állandó/osztályközi bizottság tisztségviselői:  
Elnök: Dr. Lendvay György  
Titkár: Dr. Buglyó Péter
3. A tudományos/állandó/osztályközi bizottság ülései : Időpont (online ülés is ide sorolandó), helyszín, a tárgyalt ügyek rövid ismertetése, eseményenként max. 1000 karakter szóközökkel):
4. A tudományos/állandó/osztályközi bizottság 2020. évi legfontosabb rendezvényei rövid leírással. A leírás a rendezvény címén, időpontján és helyszínén kívül tartalmazza a rövid szakmai értékelést, a program társadalmi hatását, amennyiben volt, akkor a visszajelzéseket – pl. sajtóban való megjelenés –, illetve a rendezvény látogatottsági adatait. (Eseményenként maximum 1000 karakter szóközökkel)

A Bizottság tevékenysége online folyt. A fontosabbak ezek közül:

A magyar kémia 30 éve c. összeállításnak a Fizikai-kémiai Bizottságra vonatkozó részének elkészítése

A Polányi-díj kuratóriumának megválasztása, 3 évre vonatkozóan jelölés Polányi Mihály díjra, és a díjak odaítélése. A díjak átadására szervezendő együttes Osztály- és Bizottsági Ülést a járványügyi helyzet miatt várhatóan 2020. májusában tartjuk.

5. Az Al- és munkabizottságok (ha vannak) 2020. évi legfontosabb rendezvényei rövid leírással. A leírás a rendezvény címén, időpontján és helyszínén kívül tartalmazza a rövid szakmai értékelést, a program társadalmi hatását, amennyiben volt, akkor a visszajelzéseket – pl. sajtóban való megjelenés –, illetve a rendezvény látogatottsági adatait. (Eseményenként maximum 1000 karakter szóközökkel)

Az Anyag- és Molekulaszerkezeti Munkabizottság Online Munkabizottsági Ülése, Teams platform, 2020. október 29.

Program:

13:30-13:55 Szabó Péter (Université du Luxembourg): "A polarizálhatóság rendszerméret függése: egy öreg kutya új trükkökkel"

13:55-14:20 Fábri Csaba (ELTE): Born-Oppenheimer közelítés optikai rezonátorban: siker vagy kudarc?

14:20-14:45 Benedek Zsolt (BME): "A mikrokinetikai modellezés, mint híd a kísérleti és számításos kémia között"

14:45-15:00 szünet saját kávéval  
15:00-15:25 Ferenc Dávid: Nem-adiabatikus, relativisztikus és QED korrekciók a He<sub>2</sub><sup>+</sup> rezgési-forgási átmeneteihez  
15:25-15:50 Mester Dávid és Kállay Mihály (BME): Távolságszeparált kétszeres hibrid sűrűségfunkcionál-elmélet gerjesztett állapotú számításokhoz  
15:50-16:15 Paudics Adrien, László Krisztina, Kubinyi Miklós (BME):  
“Adszorpciós kötőhelyek vizsgálata grafénoxidon”  
A sok résztvevőt megmozgató rendezvény online formája lehetővé tette, hogy nemcsak a hazai, hanem a jelenleg külföldön tartózkodó fiatal kutatók bemutassák eredményeiket.

A Reakciókinetikai és Fotokémiai Munkabizottság Online Ülése, 2020. november 6.,  
MTA Zoom platform

Az ülést 10 és 21 óra közt tartották, 20 előadás hangzott el. Az előadók közt köztük három külföldi magyar és három Magyarországon dolgozó külföldi kutató volt.

Az Elektrokémia Munkabizottság ülése 2020. szeptember 18. (a vírushelyzet miatt online). Két PhD hallgató (Kovács Noémi, ELTE és Kecsenovity Egon, SZTE) elővédése, szakmai előadások, aktuális ügyek megbeszélése, össz. kb. 50 résztvevővel.

Program:

- 11:30 Rövid megnyitó (Péter László)
- 11:40 Kecsenovity Egon: Photoelectrochemistry of nanocomposite electrodes for the generation of solar chemicals (PhD elővédés)
- 12:10 Kovács Noémi: Novel approach to a classical electrochemical technique: Applications of the rotating disk system (PhD elővédés)
- 12:40 Láng Győző: A hidegfúzió, avagy az elektrokémia bűnbeesése – visszatekintés 30 év távlatából
- 13:20 Pajkossy Tamás: Voltammogrammmok potenciálprogram-független alakja
- 14:00 Péter László: Elektrolitikusan leválasztott Ni-Mo ötvözetek szerkezete és termikus stabilitása
- 14:40 Zárszó, aktuális ügyek

Az MTA Felületkémiai és Nanoszerkezeti MB, a Katalízis MB, az ELFT Vákuumfizikai, -technológiai és Alkalmazásai Szakcsoport, a Magyar Vákuumtársaság és az MTA Elektronikus Eszközök és Technológiák Tudományos Bizottság közös szemináriumára 2020. szeptember 8. (kedd) 13:00 órakor került sor az online térben, kb. 40-50 résztvevővel. Kilenc előadás közül hármat a Katalízis MB tagjai tartottak. Az összehívott szakmai ülés előnyeire tekintettel a jövőben is tervezünk hasonlókat.

A Katalízis Munkabizottság 2020. december 14-én, online tartotta önálló szakmai ülését, 24 résztvevővel. Ezen 5 szakmai előadás hangzott el, és átadtuk a Dr. Paál Zoltán Katalíziskutatási Alapítvány díját a legjobbnak ítélt, a heterogén katalízis területén született publikáció fiatal szerzőjének (a díjazott Szabó Blanka, ELKH TTK AKI).

A munkabizottsági tevékenység részeként PhD elővédeket tartottak online formában:

- Meena Bashdar Ismael (témavezető: Kaizer József); Pannon Egyetem; címe: Iron and manganese complexes in biomimetic catalytic oxidations (2020.11.26.)
- Balogh Ria Katalin (témavezetők: Gyurcsik Béla, Jancsó Attila); Szegedi Tudományegyetem; címe: Transcriptional activator CueR protein: purification, characterization and potential bioanalytical application (2020.05.29.)
- Heba Alaa Eldeen Hosiny Abd Elhameed (témavezető: Gyurcsik Béla); Szegedi Tudományegyetem; címe: Artificial metallo-nucleases - molecular tools for gene therapy of cancer (2020.08.31.)
- Lukács Márton, (témavezető: Várnagy Katalin); Debreceni Egyetem; címe: Aszparaginsavat, glutaminsavat, hisztidint és ciszteint tartalmazó peptidek átmenetifém-komplexei (2020. 10.22.)
- Oszváth András, (témavezető: Buglyó Péter); Debreceni Egyetem; címe: Ambidentát peptidkonjugátumok kölcsönhatásának vizsgálata platinafémionokkal (2020. december. 7.)
- Bolyog-Nagy Evelin (témavezető: Kathó Ágnes); Debreceni Egyetem; címe: Katalitikus átalakítások vízoldható Ru(II)-foszfin komplexekkel és azok heterogenizált változataival (2020.10.14.)

6. A tudományos/állandó/osztályközi bizottság köztestületi tagjainak díjai (állami és szakmai elismerések az év során)

Gyurcsik Béla: Miniszteri Elismerő Oklevél (2020)  
 Tircsó Gyula: Magyar Érdemrend Lovagkeresztje (2020)  
 Tircsó Gyula: Bolyai János Kutatási Ösztöndíj Kuratóriumának Elismerő Oklevele (2020)  
 Enyedy Éva A.: Bolyai János Kutatási Ösztöndíj Kuratóriumának Elismerő Oklevele (2020)  
 Nagy Péter: Junior Prima Díj, Magyar Tudomány kategória  
 Czákó Gábor: Év Fiatal Kutatója, Szegedi Tudományegyetem  
 Fábri Csaba: ELTE Kémiai Intézet 2020. évi Publikációs Díja  
 Polányi Mihály díj: Biczók László, László Krisztina, Pajkossy Tamás  
 Polányi Fiatal kutatói díj: Jedlovszky-Hajdú Angéla, Kalmár József, Szidarovszky Tamás  
 Sági András: Délalföldi Innovációs Díj – SZAB Érem- 2020, SzTE Innovációs Díj - 2020 , 2020-2021: ÚNKP Bolyai+, 2020 – 2023: Bolyai János Ösztöndíj

7. A tudományos/állandó/osztályközi bizottság kiadványai (a bizottság tagjai által megjelentetett könyvek, tankönyvek, kiemelt cikkek):

Könyv, tankönyv:

A. G. Császár, C. Fábri, From Tunneling Control to Controlling Tunneling (Chapter 4), in Tunnelling in Molecules (Royal Society of Chemistry, edited by

Johannes Kästner and Sebastian Kozuch) <https://doi.org/10.1039/9781839160370-00146>

Ernő Keszei: Reaction Kinetics (An Introduction), Springer, ISBN 978-3-030-68573-7  
Róbert Schiller: Between One Culture (Essays on Science and Art), Springer, ISBN 978-3-030-20538-6

Tóth János, Simon L. Péter: Differenciálegyenletek (Bevezetés az elméletbe és az alkalmazásokba), 3. javított kiadás, Typotex, Budapest, 2020

Inzelt György: Természettudomány háborúban és békeidőben. Kémikusok, találmányok, felfedezések. Typotex, 2020. 324 oldal. ISBN: 978-963-4930-82-2

Pandey, Suresh ; Giovenzana, Giovanni Battista ; Szikra, Dezső ; Baranyai, Zsolt: Positron Emission Tomography (PET) Driven Theranostics In: Sigel, A.; Freisinger, E; Sigel, RKO Metal Ions in Bio-Imaging Techniques, Berlin, Németország : De Gruyter (2021) 500 p

Kiemelt cikkek:

L. Leone, M. Boccalon, G. Ferrauto, I. Fábrián, Z. Baranyai, L. Tei, Acid-catalyzed proton exchange as a novel approach for relaxivity enhancement in Gd-HPDO<sub>3</sub>A-like complexes. *Chem. Sci.*, 11 (2020) 7829-7835. (IF<sub>2019</sub> = 9,346)

R. Botár, E. Molnár, G. Trencsényi, J. Kiss, F. K. Kalman, G. Tircso, Stable and inert Mn(II)-based and pH-responsive contrast agents, *J. Am. Chem. Soc.*, 142 (2020) 1662-1666. (IF<sub>2019</sub> = 14,612)

B. Kutus, X. Gaona, A. Pallagi, I. Pálinkó, M. Altmaier, P. Sipos, Recent advances in the aqueous chemistry of the calcium(II)-gluconate system – Equilibria, structure and composition of the complexes forming in neutral and in alkaline solutions, *Coord. Chem. Rev.* 417 (2020) 213337 (IF<sub>2019</sub> = 15,367)

S. Hager, V.F.S. Pape, V. Pósa, B. Montsch, L. Uhlík, G. Szakács, S. Tóth, N. Jabronka, B. K. Keppler, C. R. Kowol, É. A. Enyedy, Petra Heffeter, High copper complex stability and slow reduction kinetics as key parameters for improved activity, paraptosis induction and impact on drug-resistant cells of anticancer thiosemicarbazones, *Antioxid. Redox Signal.* 33 (2020) 395 (IF<sub>2019</sub> = 7,040)

F. K. Kalman, V. Nagy, B. Váradi, Z. Garda, E. Molnár, G. Trencsényi, J. Kiss, S. Mème, W. Meme, E. Toth, G. Tircsó, Mn(II)-based MRI contrast agent candidate for vascular imaging, *J. Med. Chem.* 63 (2020) 6057-6065. (IF<sub>2019</sub> = 6,205)

Perspective cikk, kiemelve az újság címlapján (front cover), 2020 HOT PCCP article: A. G. Császár, \* I. Simkó, T. Szidarovszky, G. C. Groenenboom, T. Karman, and A. van der Avoird, Rotational-vibrational resonance states,

Phys. Chem. Chem. Phys. 22, 15081-15104 (2020) IF: 3.430

Perspective cikk, kiemelve az újság címlapján (front cover):

G. Czakó, T. Győri, B. Olasz, D. Papp, I. Szabó, V. Tajti, and D. A. Tasi,  
Benchmark ab initio and dynamical characterization of the stationary points of  
reactive atom + alkane and SN<sub>2</sub> potential energy surfaces,  
Phys. Chem. Chem. Phys. 22, 4298 (2020) IF:3.430

Kiemelt cikk (Editor's highlights, Device and materials engineering blog kiemelés):

R. Tóbiás, T. Furtenbacher, I. Simkó, A. G. Császár\*, M. L. Diouf, F. M. J. Cozijn, J.  
M. A. Staa, E. J. Salumbides, and W. Ubachs\*, Spectroscopic-Network-Assisted  
Precision Spectroscopy and its Application to Water,  
*Nature Communications* 2020, 11:1708 IF: 12.121

Z. Benedek, M. Papp, J. Oláh, T. Szilvási, Demonstrating the Direct Relationship  
between Hydrogen Evolution Reaction and Catalyst Deactivation in Synthetic Fe  
Nitrogenases, *ACS Catalysis* 2020, 10, 21, 12555-12568 IF: 12.35

D. Ferenc, V. I. Korobov, and E. Mátyus: Nonadiabatic, Relativistic, and Leading-  
Order QED Corrections for Rovibrational Intervals of  $4\text{He}^{2+}$  ( $X^2\Sigma^+$ ), *Phys. Rev.*  
*Lett.* 2020, 125, 213001 IF: 8.385

A. G. Császár\*, C. Fábri, J. Sarka, Quasistructural molecules, *Wiley Interdisciplinary*  
*Reviews: Computational Molecular Science* 10 (1), e1432 (2020) IF: 8.127

C. Fábri\*, B. Lasorne, G. J. Halász, L. S. Cederbaum, Á. Vibók, Striking Generic  
Impact of Light-Induced Non-Adiabaticity in Polyatomic Molecules, *The Journal of*  
*Physical Chemistry Letters* 11 (13), 5324-5329 (2020), IF: 6.71

Front cover:

T. Furtenbacher, R. Tóbiás, J. Tennyson, O. L. Polyansky, A. A. Kyuberis, R. I.  
Ovsyannikov, N. F. Zobov, and A. G. Császár\*, The W<sub>2020</sub> Database of Validated  
Rovibrational Experimental Transitions and Empirical Energy Levels of Water  
Isotopologues. Part II. H<sub>2</sub><sup>17</sup>O and H<sub>2</sub><sup>18</sup>O with an Update to H<sub>2</sub><sup>16</sup>O, *J. Phys. Chem.*  
*Ref. Data* 2020, 49, 043103. IF: 4.684

2020 HOT PCCP article:

G. Avila, D. Papp, G. Czakó, and E. Mátyus Exact quantum dynamics background  
of dispersion interactions: case study for CH<sub>4</sub>.Ar in full (12) dimensions, *Phys. Chem.*  
*Chem. Phys.* 22, 2792 (2020) IF: 3.430

2020 HOT PCCP article:

D. A. Tasi, T. Győri, and G. Czakó, On the development of a gold-standard potential energy surface for the OH<sup>-</sup> + CH<sub>3</sub>I reaction, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 22, 3775 (2020) IF: 3.430

Invited article to the themed issue on using “The Cambridge Structural Database - A wealth of knowledge gained from a million structures” (inside back cover)

Bombicz P, May NV, Fegyverneki D, Saranchimeg A, Bereczki L: Methods for easy recognition of isostructurality – lab jack-like crystal structures of halogenated 2-phenylbenzimidazoles. *CrystEngComm*, 22, 7193–7203, 2020. IF: 3.382

Varga S, Angyal P, Martin G, Egyed O, Holczbauer T, Soós T: Total Syntheses of (–)-Minovincine and (–)-Aspidofractinine Using Chain of Cascade Reactions, *Angewandte Chemie, Int. Ed.* 2020, 59, 13547–13551 IF: 12.959

Szekrényes, D. P.; Kovács, D.; Zolnai, Z.; Deák, A. Chemical Interface Damping as an Indicator for Hexadecyltrimethylammonium Bromide Replacement by Short-Chain Thiols on Gold Nanorods. *J. Phys. Chem. C* 2020, 124 (36), 19736–19742. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.0c04629>. IF 4,8

Kaptay, G. A Coherent Set of Model Equations for Various Surface and Interface Energies in Systems with Liquid and Solid Metals and Alloys. *Advances in Colloid and Interface Science* 2020, 283, 102212. <https://doi.org/10.1016/j.cis.2020.102212>. IF 9,9

Szabó, T.; Maroni, P.; Szilágyi, I. Size-Dependent Aggregation of Graphene Oxide. *Carbon* 2020, 160, 145–155. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2020.01.022>. IF 8,8

Bakos, L. P.; Karajz, D.; Katona, A.; Hernadi, K.; Parditka, B.; Erdélyi, Z.; Lukács, I.; Hórvölgyi, Z.; Szitási, G.; Szilágyi, I. M. Carbon Nanosphere Templates for the Preparation of Inverse Opal Titania Photonic Crystals by Atomic Layer Deposition. *Applied Surface Science* 2020, 504, 144443. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2019.144443>. IF: 6,18

Miele, Y.; Medveczky, Z.; Holló, G.; Tegze, B.; Derényi, I.; Hórvölgyi, Z.; Altamura, E.; Lagzi, I.; Rossi, F. Self-Division of Giant Vesicles Driven by an Internal Enzymatic Reaction. *Chem. Sci.* 2020, 11 (12), 3228–3235. <https://doi.org/10.1039/C9SC05195C>. IF: 9,35

Lantos, E.; Mérai, L.; Deák, Á.; Gómez- Pérez, J.; Sebők, D.; Dékány, I.; Kónya, Z.; Janovák, L. Preparation of Sulfur Hydrophobized Plasmonic Photocatalyst towards Durable Superhydrophobic Coating Material. *Journal of Materials Science & Technology* 2020, 41, 159–167. <https://doi.org/10.1016/j.jmst.2019.04.046>. IF 6,1

Abdelghafour, M. M.; Deák, Á.; Mérai, L.; Ágoston, Á.; Béltéki, R.; Sebők, D.; Dékány, I.; Janovák, L. Photocatalytic Elimination of Interfacial Water Pollutants

by Floatable Photoreactive Composite Nanoparticles. *Environmental Pollution* 2020, 266, 115285. <https://doi.org/10.1016/j.envpol.2020.115285>. IF: 6,8

Kéri, M.; Forgács, A.; Papp, V.; Bányai, I.; Veres, P.; Len, A.; Dudás, Z.; Fábíán, I.; Kalmár, J. Gelatin Content Governs Hydration Induced Structural Changes in Silica-Gelatin Hybrid Aerogels – Implications in Drug Delivery. *Acta Biomaterialia* 2020, 105, 131–145. <https://doi.org/10.1016/j.actbio.2020.01.016>. IF: 7,24

<https://www.nature.com/articles/s42004-020-00420-y>

Perspective cikk, kiemelve az újság címlapján (front cover):

G. Czakó, T. Győri, B. Olasz, D. Papp, I. Szabó, V. Tajti, and D. A. Tasi  
Benchmark ab initio and dynamical characterization of the stationary points of reactive atom + alkane and SN<sub>2</sub> potential energy surfaces, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 22, 4298 (2020)

2020 HOT PCCP article:

G. Avila, D. Papp, G. Czakó, and E. Mátyus, Exact quantum dynamics background of dispersion interactions: case study for CH<sub>4</sub>.Ar in full (12) dimensions, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 22, 2792 (2020)

2020 HOT PCCP article:

D. A. Tasi, T. Győri, and G. Czakó, On the development of a gold-standard potential energy surface for the OH<sup>-</sup> + CH<sub>3</sub>I reaction, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 22, 3775 (2020)

Gustavo, M. F., Székely, E., & Tóth, J.. Kinetic Modeling of a Consecutive Enzyme-Catalyzed Enantioselective Reaction in Supercritical Media. *\*ACS Omega\**, *\*5\*(41)*, 26795-26806. (2020)

Leone, Loredana ; Boccalon, Mariangela ; Ferrauto, Giuseppe ; Fábíán, István ; Baranyai, Zsolt; Tei, Lorenzo, Acid-catalyzed proton exchange as a novel approach for relaxivity enhancement in Gd-HPDO<sub>3</sub>A-like complexes., *CHEMICAL SCIENCE* 11 : 30 pp. 7829-7835. , 7 p. (2020)

Méltatott cikk: Zombor Miskolczy, Mónika Megyesi, László Biczók, Amrutha Prabodh, Frank Biedermann: Mechanism of cation-induced guest release from cucurbit[7]uril, *Chem. Eur. J.* 26 (2020) 7433-7441

Éva Dóka, Elias S. J. Arnér, Edward E. Schmidt, Tobias P. Dick, Albert van der Vliet, Jing Yang, Réka Szatmári, Tamás Ditrói, John L. Wallace, Giuseppe Cirino, Kenneth Olson, Hozumi Motohashi, Jon M. Fukuto, Michael D. Pluth, Martin Feelisch, Takaaki Akaike, David A. Wink, Louis J. Ignarro, Péter Nagy\*: Comment on “Evidence that the ProPerDP method is inadequate for protein persulfidation detection due to lack of specificity”, *Science Advances* (2020)

Marjetka Jelenc, Maruška Vidovič, Edit Marosi, Péter Nagy, Antonio Federici, Mateja Lamovšek, Tit Albreht: Governance in/of Cancer Care and Stewardship in Cancer Control: Creation of Definitions, *Collegium antropologicum* (2020) 44, 239-243.

Anna-Theresa Mellis, Albert L. Misko, Sita Arjune, Ye Liang, Katalin Erdélyi, Tamás Ditrói, Alexander T.Kaczmarek, Péter Nagy, Guenter Schwarz, The role of glutamate oxaloacetate transaminases in sulfite biosynthesis and H<sub>2</sub>S metabolism, *Redox Biology* (2021) 38, 101800

Djoeke van Dale, Lidwien Lemmens, Marieke Hendriksen, Nella Savolainen, Péter Nagy, Edit Marosi, Michela Eigenmann, Ingrid Stegemann, Heather L Rogers, Recommendations for Effective Intersectoral Collaboration in Health Promotion Interventions: Results from Joint Action CHRODIS-PLUS Work Package 5 Activities, *International Journal of Environmental Research and Public Health* (2020) 17, E6474.

Simon Oberst, Wim van Harten, Gunnar Sæter, Paolo de Paoli, Péter Nagy, Jean-Benoit Burrion, Jozsef Lovey, Thierry Philip (All authors contributed equally to the Results presented in this article), 100 European Core Quality Standards for Centres providing Cancer Care and Research, *Lancet Oncology* (2020) 21, 1009-1011.

Anton Berns, Ulrik Ringborg, Julio E. Celis, Neil K. Aaronson, Hans-Olov Adami, Kathi Apostolidis, Michael Baumann, Yvonne Brandberg, Carlos Caldas, Fabien Calvo, Angelika Eggert, Alexander Eggermont, Carolina Espina, Jérôme Foucaud, Douglas Hanahan, Bengt Jönsson, Mette Kalager, Miklós Kásler, Pamela Kearns, Denis Lacombe, Francesco de Lorenzo, Françoise Meunier, Simon Oberst, Péter Nagy, Thierry Philip, Joachim Schüz, Eric Solary, Peter Strang, Josep Tabernero, Towards a Cancer Mission in Horizon Europe, *Molecular Oncology* (2020) 14, 1589-1615.

Péter Nagy, Eva Doka, Tomoaki Ida, Takaaki Akaike Measuring Reactive Sulfur Species and Thiol Oxidation States: Challenges and Cautions in Relation to Alkylation Based Protocols Antioxidants and Redox Signaling (2020) 33, 1174-1189.

Lucía Álvarez, Valeria Suarez Vega, Christopher McGinity, Vinayak S. Khodade, John P. Toscano, Péter Nagy, Joseph Lin, Carmen Works, Jon M.Fukuto: The reactions of hydropersulfides (RSSH) with myoglobin *Archives of Biochemistry and Biophysics* (2020) 687, 108391.

Virág Bogdándi, Tamás Ditrói, István Zoárd Bártai, Zoltán Sándor, Magda Minnion, Anita Vasas, Klaudia Galambos, Péter Buglyó, Erika Pintér, Martin Feelisch and Péter Nagy\*: Nitrosopersulfide (SSNO-) is a unique cysteine polysulfidating agent with reduction-resistant bioactivity, *Antioxidants and Redox Signaling* (2020) 33, 1277-1294.

Éva Dóka, Tomoaki Ida, Markus Dagnell, Yumi Abiko, Nho Luong Cong, Noémi Balog, Tsuyoshi Takata, Belen Espinosa, Akira Nishimura, Qing Cheng, Yosuke Funato, Hiroaki Miki, Jon Fukuto, Justin R. Prigge, Edward E. Schmidt, Elias S. J.



Arnér, Yoshito Kumagai, Takaaki Akaike, Péter Nagy\*: Control of protein function through oxidation and reduction of persulfidated states, *Science Advances* (2020) 6, eaax8358.

John L. Wallace, Péter Nagy, Troy D. Feener, Thibault Allain, Tamás Ditrói, David J. Vaughan, Marcelo N. Muscara, Gilberto de Nucci & Andre G. Buret: A Proof-of-Concept, Phase 2 Clinical Trial of the Gastrointestinal Safety of a Hydrogen Sulfide-Releasing Anti-Inflammatory Drug, *British Journal of Pharmacology* (2020) 177, 769-777.

Katalin Éva Sikura, Tamás Szerafin, László Potor, Melinda Oros, Péter Nagy, Gábor Méhes, Zoltán Hendrik, Abolfazl Zarjou, Anupam Agarwal, Niké Posta, Roberta Torregrossa, Matthew Whiteman, György Balla, József Balla: Hydrogen sulfide abrogate heart valve calcification: implications for calcific aortic valve disease, *British Journal of Pharmacology* (2020) 177, 793-809.

Varga, Gábor; Sápi, András; Varga, Tamás; Baán, Kornélia; Szent, Imre; Halasi, Gyula; Mucsi, Róbert; Óvári, László; Kiss, János; Fogarassy Zsolt; Pécz, Béla; Kukovecz, Ákos; Kónya, Zoltán, Ambient pressure CO<sub>2</sub> hydrogenation over a cobalt/manganese-oxide nanostructured interface: a combined in situ and ex situ study, *JOURNAL OF CATALYSIS* 386 pp. 70-80 (2020), IF = 7.888

Ochirkhuyag, Altantuya; Varga, Tamás; Tóth, Ildikó Y; Varga, Ágnes Tímea; Sápi, András; Kukovecz, Ákos; Kónya, Zoltán, Cost-effective ion-tuning of Birnessite structures for efficient ORR electrocatalysts, *INTERNATIONAL JOURNAL OF HYDROGEN ENERGY* 45 : 32, pp. 16266-16276 (2020) IF = 4.939

Sahir M. Al-Zurajji, Tímea Benkó, Levente Illés, Miklós Németh, Krisztina Frey, Attila Sulyok, József S. Pap, Utilization of hydrophobic ligands for water-insoluble Fe(II) water oxidation catalysts – Immobilization and characterization, *JOURNAL OF CATALYSIS* 381 pp. 615-625 (2020), IF = 7.888

Varga, G; Kukovecz, Á ; Kónya, Z ; Sipos, P ; Palinko, I, Green and selective toluene oxidation-Knoevenagel-condensation domino reaction over Ce- and Bi-based CeBi mixed oxide mixtures, *JOURNAL OF CATALYSIS* 381 pp. 308-315. , 8 p. (2020)

Szabados, M.; Ádám, A.A.; Traj, P.; Muráth, Sz.; Baán, K.; Béteky, P.; Kónya, Z.; Kukovecz, Á.; Sipos, P.; Palinko, I., Mechanochemical and wet chemical syntheses of CaIn-layered double hydroxide and its performance in a transesterification reaction compared to those of other Ca<sub>2</sub>M(III) hydrocalumites (M: Al, Sc, V, Cr, Fe, Ga) and Mg(II)-, Ni(II)-, Co(II)- or Zn(II)-based hydrotalcites, *JOURNAL OF CATALYSIS* 391 pp. 282-297. , 16 p. (2020)

B. Endródi et al., *Energy and Environmental Science* 2020, 13, 4098–4105.

M. Gálvez-Vázquez et al., *J. Phys. Chem. C* 2020, 124, 3988–4000.

J. He et al., ACS Energy Letters 2020, 5, 1996–2014.

A. Kormányos et. al, Advanced Functional Materials 2020, 30, 2002124.

N. Kovács et. al, Advanced Functional Materials 2020, 30, 2002124.

P. Moreno-García et al., Anal. Chem. 2020, 92, 4301–4308.

### Szabadalmak

Napolitano, Roberta; Lattuada, Luciano; Baranyai, Zsolt; Guidolin, Nicole ; Marazzi, Giuseppe, Gadolinium bearing pcta-based contrast agents, WO 2020030618

Baranyai, Zsolt ; Ghiani, Simona ; Maiocchi, Alessandro ; Hawala, Ivan, Chelating aazta conjugates and complexes thereof, WO2020099398

8. A tudományos/doktori bizottság által lefolytatott habitusvizsgálatok MTA doktora cím pályázatokra (a pályázó neve, a pályázat címe, a habitusvizsgálat eredményessége):

-

9. Egyéb (bármilyen, az előző pontokhoz nem sorolható, a tudományos/állandó/osztályközi bizottsághoz és tagjaihoz kötődő tudományos siker, közfeladathoz (Lsd. az Akadémia közfeladatai) kapcsolódó eredmény – pl. bírálatok, szakvélemények elkészítése, joganyagok (törvények, rendeletek, EUs szabályozások stb.) véleményezésében való közreműködés, szabadalmak, szerkesztőbizottsági tagságok, nemzetközi szervezetekben való tagságok, együttműködések stb. –, a magyar tudományos élet szempontjából jelentős esemény):

### Sikeres MTA doktora védések:

Kathó Ágnes; Átmenetifémek vízdoldható fémorganikus komplexei és katalitikus alkalmazásaik; Debrecen, 2020.12.01.

Enyedy Éva A.; Rákellenes fémkomplexek oldatkémiája és farmakokinetikai viselkedésüket befolyásoló tulajdonságaik; Szeged, 2020.11.28.

### Bizottsági tagság

Joó Ferenc: Chemistry Europe Fellow (Európai Kémiai Társaságok Szövetsége 2020)

Dömötör Orsolya: F fiatal Kutatók Akadémiájának tagja (MTA, 2020)

Bombicz Petra: European Crystallographic Association, SIG13 Special Interest Group on Molecular Structure and Chemical Properties, Chair

Bombicz Petra: Crystallography Reviews T&F főszerkesztő  
Császár Attila: IUPAC Division I, Secretary and Treasurer (2019-2022)  
Császár Attila: IUPAC magyar NAO vezető  
Császár Attila: UNESCO MNB Természettudományi Szakbizottság, tag  
Janáky Csaba: Nemzeti Hidrogéntechnológiai platform  
Láng Győző: EuChemS, Division of Physical Chemistry (Hungarian delegate, treasurer)  
Nagy Péter: az EUHealthSupport Consortium tanácsadója,  
az Antioxidants and Redox Signaling c. folyóirat szerkesztőbizottságának tagja  
a Molecular Oncology c. folyóirat szerkesztőbizottságának tagja  
Nemzeti Népegészségügyi Központ (NNK) Ritka betegségek intézményi szakértő  
Magyarország küldöttje Európai Kutatás és Innovációs Partnerségek a Horizon Programban magyarországi küldöttje  
Regeneratív orvoslás, szövet- és sejtbank szakmai kollégium titkára  
ETT-TUKEB (Egészségügyi Tudományos Tanács – Tudományos és Kutatásetikai Bizottság) tagja  
Inzelt György:  
Journal of Solid State Electrochemistry (Springer): topical editor (conducting polymers, polymer electrolytes).  
ChemTexts (Springer): topical editor (physical chemistry). Electrochemistry Communications (Elsevier): member of editorial board. Journal of Electrochemistry and Electrochemical Engineering: member of editorial board.  
Journal of Serbian Chemical Society: member of editorial board. Russian Journal of Electrochemistry: member of editorial board.  
Péter László: Journal of Solid State Electrochemistry (Springer): member of editorial board.  
Pap József Sándor: MDPI, Reactions – szerkesztő  
Sápi András:  
Európai Katalízis Szövetség magyar küldötte,  
RKMC (Akadémiai Kiadó) társszerkesztő

Tóth János: Szerk. biz. tagság, Érintő (A Bolyai János Matematikai Társulat elektronikus folyóirata)

Egyéb tagságok:

Inzelt György: Fellow of the International Society of Electrochemistry.

Nagy Péter (OOI)

az Európai Onkológiai Akadémia tagja

Society for Free Radical Research -Europe

Society for Redox Biology & Medicine

IARC (International Agency for Research on Cancer) tudományos tanácsának tagja

Tóth János

American Mathematical Society, Society for Industrial and Applied Mathematics

HU-MATH-IN (Magyar Ipari Innovációs Matematikai Szolgáltatási Hálózat, <https://hu-maths-in.hu/>)

Pap József Sándor: SUNERGY initiative – támogató tagság

Sápi András: EUROPACAT 2021 Szervező

Együttműködések:

Miskolczi Zsombor, Megyesi Mónika, Biczók László: Ruđer Boskovic Institute, Zágráb, Horvátország

Nagy Tibor: Combustion Chemistry Centre, National University of Ireland, Írország, Galway

Nagy Tibor: Department of Catalysis and Chemical Reaction Engineering, National Institute of Chemistry, Ljubljana, Slovenia

Lendvai György, Department of Chemistry, University of Helsinki, Finnország

10. Kapcsolatok más szervezetekkel (ipari kapcsolatok, kutatás-fejlesztési együttműködések, civil szervezetekkel való együttműködések, oktatási intézményekkel való együttműködések, kulturális szervezetekkel való együttműködések, egyházakkal való együttműködések, bármilyen az előzőekben nem felsorolt társadalmi szervezetekkel való együttműködések)

Sebőkne Nagy Krisztina: SZTE Mérnöki Kar, Szeged

Miskolczi Zsombor, Megyesi Mónika, Biczók László: Egis Gyógyszergyár Zrt.

Nagy Péter (OOI) 2020-tól kezdődően: egyetemi tanár az Állatorvostudományi Egyetemen

Nagy Tibor: Furukawa Electric Technológiai Intézet Kft.

Sápi András:

2020 – 2023: OTKA SNN\_20-Látható fényel gerjeszthető  $\Pi$ -konjugált polimer/félvezető oxid nanokompozitok alkalmazása szennyvizek fotokatalitikus tisztításában – szenior kutató

2019-2.1.11-TÉT-2019-00090, Nem szokványos katalizátor hordozókkal egy Zöldebb jövőért: Hangolható hierarchikus pórusú polimerek alkalmazása kontrollált méretű fém nanorészecskék hordozójaként CO aktiválási és C-C formálási reakciókban – szakmai vezető

PIACI-KFI-2019-00349, Hierarchikus kamraszerkezetű, kompozit, expandált polisztirol termékek, és gyártástechnológiájuk kifejlesztése – szakmai vezető