

Kállay-Menyhárd Alfréd – Tátraaljai Dóra – Pukánszky Béla
 – László Krisztina – Bulátkó Anna – Albert Emőke – Tegze Borbála
 – Márton Péter – Hórvölgyi Zoltán – Gyarmati Benjámín
 – Szilágyi András – Hessz Dóra – Kubinyi Miklós – Kállay Mihály

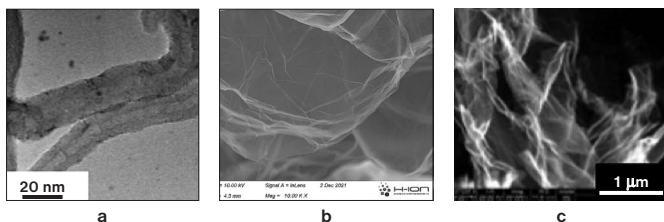
Kutatómunka a Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszéken

Bevezetés

A BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszéke (FKAT) 2007. január 1-én jött létre az 1951 óta működő Fizikai Kémia és az 1953-ban alapított Műanyag- és Gumiipari Tanszék egyesítésével. A Tanszék munkatársai a felületkémia, a koloidika, a polimerkémia, az anyagtudomány, a spektroszkópia és az elméleti kémia területein folytatnak kutatásokat. Ebben az írásban áttekintjük a Tanszék csoportjainak kutatási irányait és az elmúlt évek főbb eredményeit.

Felületkémiai Csoport

A csoport korábbi tevékenységének szerves folytatásaként kutatásainak középpontjában változatlanul a nagy felületű szilárd anyagok adszorpcióhoz köthető viselkedése áll. A kristályos szén nanorészecskék közül a nanocsövek után [1] a grafén-oxid (GO-val) és származékaiával foglalkozunk (1. ábra). A grafén-oxidot, illetve többrétegű változatát a grafit-oxidot hosszú ideig a grafén-előállítás intermedierjének tartották.



1. ábra. Szén nanocső (a), grafén-oxid (b) és redukált grafén-oxid mikroszkópos képe (c)

Mára azonban elnyerte megérdemelt helyét. Hidrofil tulajdonságai miatt feldolgozása lényegesen könnyebb, mint a hidrofób graféné, ugyanakkor utólagos redukív kezeléssel a grafén-szerkezet kielégítő mértékben regenerálható. A vizes szuszpenzióban kereskedelmi forgalomba hozott GO számos szilárd termékhez szolgál kiindulásul (3D nyomtatás, elektródok stb.). Megmutattuk, hogy a nedves oxidatív exfoliációval előállított grafit-

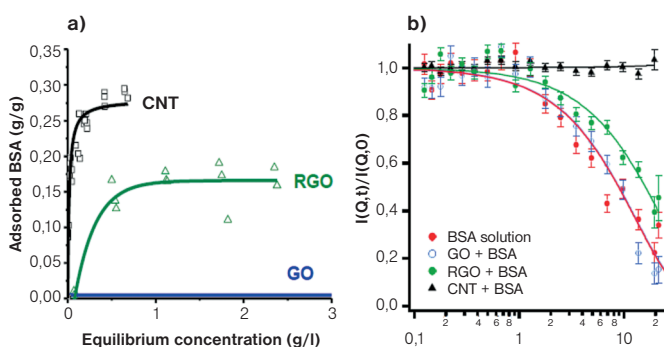
oxid meglehetősen heterogén mind morfológiai, mind pedig kémiai szempontból. [2] Éves nagyságrendű tárolása során a vizes közegben bekövetkező oxidációja miatt reológiai tulajdonságai is változnak (2. ábra). [3]



2. ábra. A többrétegű GO-részecskék szélén lévő, egyébként is oxigénben dús (hidrofil) rétegek további oxidációjának hatására gyengül a van der Waals-kölcsönhatás. Az erősen hidratált egyedi GO-síkok leválnak

Radiofrekvenciás plazmakezelés hatására a grafit-oxidba nitrogénatomokat építhetünk be, amelyek előnyösen módosítják a nitrogénnel dópolt grafit-oxid (elektro)katalitikus aktivitását. [4]

Vizsgáltuk a hidrofil GO és redukált, így hidrofób származékát, valamint szén nanocső kölcsönhatását fehérjékkel is (3. ábra).



3. ábra. BSA adszorpciója vizes közegből szén nanocső (CNT), GO és redukált grafén-oxid (RGO) felületén, 20 °C-on (a); a BSA mobilitásának követése neutron-spinecho módszerrel (b)

Az adszorpció kapacitása jól követi a szén nanorészecskék hidrofobitási sorrendjét: CNT (98,7 atom% szén), RGO (96,4% szén), GO (68,4% szén). A neutron-spinecho mérések megerősítették, hogy a CNT-tartalmú minta teljesen immobilizálta a BSA-t, a hidrofíli GO jelenlétében pedig – kölcsönhatás hiányában – a szabad BSA-hoz hasonló dinamikai viselkedést tapasztaltunk. [5]

Kolloidkémiai Csoport

A Kolloidkémiai Csoport tevékenységében kiemelt szerepet kap a funkcionális nanobevonatok fejlesztése.

Az Európai Unió Horizont 2020 programjának támogatásával nedves kolloidkémiai eljárást dolgoztunk ki a szubsztrátumhoz képest jelentős fényáteresztés-növelést eredményező bevonatok kialakítására. Az eljárás lehetővé teszi a hordozó fényáteresztéséhez képest 7–8% átlagos transzmittancia-növekményt (ÁTN) mutató, stabil, homogén antireflexiós szilikabevonat kialakítását polikarbonát- és üveghordozók felületén egyaránt. A bevonat pórusrendszere zsugorodásának megakadályozására vázerősítő eljárást adaptáltunk, illetve fejlesztettünk. Megállapítottuk, hogy a mintegy 100 nm vastag, mezopórusos (porozitás 18–37%) szilikabevonat normál, kültéri környezeti viszonyoknak kitéve ellenálló, és fényáteresztés-növelése (ÁTN > 8%) öt év után sem csökken. A maximális transzmittanciaérték (98,5%) ugyancsak nem mutatott érdemi változást a vizsgálat időtartama alatt. [6–9] Fényáteresztést növelő és vízlepergető szilikabevonatokat is fejlesztettünk. A 110 nm vastag bevonat (mikroporozitás 40%) átlagosan több mint 7%-kal növelte meg az üveghordozó fényáteresztését ($T_{\max} = 98,5\%$). A bevonatokon mért haladó vízperemszög 95° , a peremszög-hiszterézis $1\text{--}2^\circ$, azaz a felület hidrofób és vízlepergető tulajdonságú. [10–12]

Fotokatalitikus TiO_2 szol-gél bevonatokat állítottunk elő, melyek távolról víz- és levegőtisztításra, illetve a napelemek előállítására használhatók. A mezopórusos bevonatok fotoaktivitását különböző modell-színezékanyagok fotodegradációjával tanulmányoztuk a szilárd-levegő, valamint a szilárd-folyadék határfelületen, ultraibolya és látható fény alatt is. Különböző módszerekkel ezüst nanorészecskéket vittünk be a TiO_2 -bevonatok pórusainak felületére és/vagy mátrixanyagába, és vizsgáltuk ezen részecskék szerepét a fotoaktivitás növelésében. Vizsgálataink során információkat szereztünk a színezék-félvezető kölcsönhatásokról (színezékérzékenyítés), a színezékek bomlási folyamatairól (sebesség, kinetika), fotostabilitásáról, továbbá a színezékaszociáció (pl. dimerek, trimerek kialakulása) szerepéről a folyamatokban. Kimutattuk, hogy a bevonatok pórusrendszerében adszorbeált színezékek mennyisége, illetve az asszociált formák monomerek mennyiségének aránya szabályozható a bevonatok impregnálása során alkalmazott színezékoldat pH-jának, koncentrációjának, az alkalmazott oldószernek a megválasztásával, valamint függ a felületre leválasztott ezüst nanorészecskék tulajdonságaitól is. [13–15]

Előállítottunk olyan fénymoduláló $\text{NaYF}_4:\text{Yb,Tm/Er}$ és $\text{LaF}_3:\text{Yb,Tm/Er}$ kolloid részecskéket, amelyek anti-Stokes-hatást mutatnak, és alkalmasak lehetnek napelemek és fotokatalizátorok hatékonyságának növelésére. A részecskékből kompozitbevonatokat és szuszpenziókat készítettünk, és tanulmányoztuk a 980 nm-es gerjesztés hatására mutatott felkonvertáló emissziójukat. A mintákat színezékoldatba helyezve vizsgáltuk az energiaátadási folyamatokat a felkonvertáló részecskék, a színezék és a félvezető anyag (TiO_2) között. [16,17]

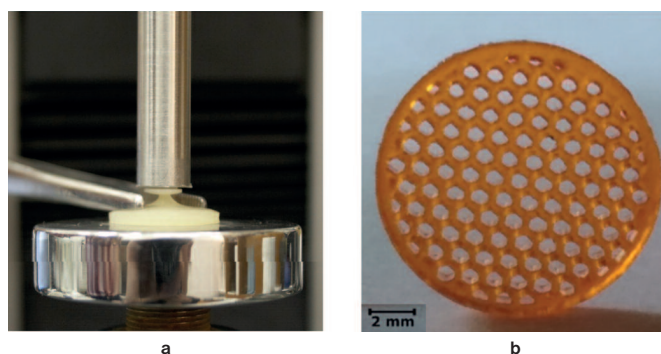
Általunk előállított kitozán-nanobevonatok felületi és tömbi tulajdonságait acilezéssel szabályoztuk. Tanulmányoztuk a bevonatok optikai és duzzadási tulajdonságait, nedvesíthetőségüket és azok időbeli változását. A bevonatok áteresztőképességének változását egy erre a célra fejlesztett többrétegű bevonatrendszeren tanulmányoztuk kationos színezékmolekulákkal (rodamin 6G) szemben. Acetilezést követően a bevonatok áteresztőképessége jelentősen növekedett, melyet a minták elektrokémiai vizsgálatai

(polarizációs tesztek és elektrokémiai impedancia-spektroszkópia) is bizonyítottak. A változást a protonálható aminocsoportok számának és így a polimer töltéssűrűségének csökkenésével magyaráztuk. [18,19] A hosszabb szénláncú acilezést követően azonban a kitozánréteg átjárhatósága egyértelműen csökkent. A bevonatok távolról alkalmazhatóak lehetnek az ideiglenes korrózióvédelemben, a membrántechnológiában és a terápiás eljárásokban szabályozott hatóanyag-leadásra.

Lágy Anyagok Kutatócsoport

A Lágy Anyagok Kutatócsoport fő tevékenységi körei a szabályozott kémiai szerkezetű poliaminosavak szintézise; biokompatibilis és rezponzív polimer szálak és gélek előállítása; a mukoadhézió kolloid és makroszkopikus szintű értelmezése; szabályozott és célzott hatóanyag-leadásra képes polimer rendszerek fejlesztése; nemnewtoni folyadékok előállítása és jellemzése. A csoport jelentős tapasztalattal rendelkezik polimerek és kolloid rendszerek termikus, mechanikai és reológiai tulajdonságainak meghatározásában.

Várhatóan biokompatibilis és biológiailag lebontható, változatos kémiai szerkezetű és móltömegű poliaminosav- (poliaszparaginsav) származékokat állítunk elő, különböző töltésű (anionos, semleges, kationos) [20] és reaktív funkciók csoportok (tiol-, aktivált tiols csoport) [21] felvitelével. A polimerek sokoldalúsága lehetővé teszi humánbiológiai alkalmazásukat, elsősorban gyógyászati területen. Elnyújtott hatóanyag-leadást biztosító, bioadhezív készítményekkel tervezzük elérni a biohasznosulás növekedését. Különböző gyógyszerformákat állítunk elő az alkalmazási területnek megfelelően, így vízben duzzadó hidrogéleket, *in situ* gélesedő polimer oldatokat, valamint vízben oldódó nanoszálal mátrixokat. [22] Kutásaink egyik fókuszpontja a polimer gyógyszerhordozók és a nyálkahártya (mucosa) közötti kölcsönhatáso-



4. ábra. Nyálkahártya-analóg hidrogél mukoadhéziós kísérletekhez (a) és enzimmögzítésre használható pórusos vázszerkezet (b)

kat befolyásoló tényezők azonosítása, melyhez kolloid és makroszkopikus mérettartományban is tanulmányozzuk a gyógyszeripari gyakorlatban alkalmazott és az általunk szintetizált, szabályozott szerkezetű polimerek mukoadhezív sajátosságait [23,24] (4.a ábra). Változatos eszköztárunkon belül fontos kiemelni a mechanikai, reológiai, fluoreszcenciás és egyéb spektroszkópiás módszereket. Vizsgáljuk továbbá a 3D nyomtatás alkalmazási lehetőségeit is. Ezen technológia fejlődésével lehetőség nyílt új típusú rendezett pórusszerkezetű polimer hordozók kialakítására, melyek utólagos felületmódosítással alkalmassá tehetők fehérjék, például enzimek rögzítésére, fehérjék hatékony elválasztására (4.b ábra).

Spektroszkópia Csoport

A fluoreszcenciámérésen alapuló új mikroszkópiás módszerek (kétfoton-mikroszkópia, fluoreszcencia-élettartam képkalkító mikroszkópia – FLIM, belső totálreflexiós fluoreszcens mikroszkópia – TIRF, stimulált emissziókioltáson alapuló mikroszkópia – STED) térhódításával egyre nagyobb igény mutatkozik a különböző fluoreszcens jelzővegyületek fejlesztésére, jellemzésére. Az eredmények megértése és értékelése miatt különösen fontos, hogy az alkalmazott fluoreszcens festékek tulajdonságait pontosan ismerjük.

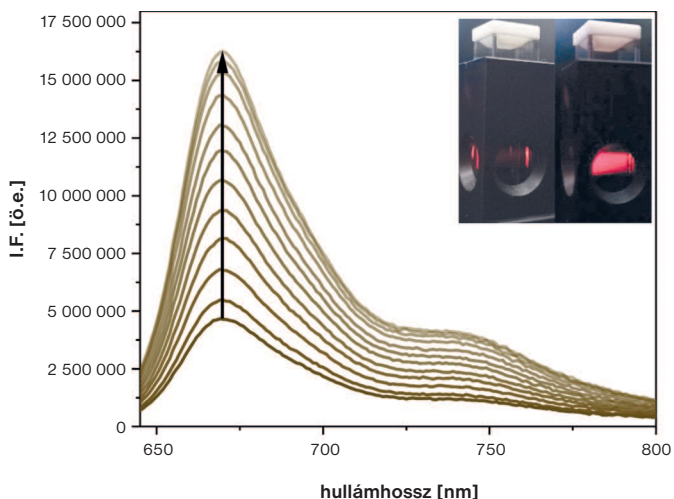
A tanszék Spektroszkópia Csoportjában az 1990-es évek elején indult el a fluoreszcens jelzőanyagok kutatása. Vizsgálataink során a stacionárius spektroszkópiai módszerek mellett időfelbontásos (időkorrelált egyfoton-számlálás, lézeres villanófény-fotolízis) kísérleteket is folytatunk. Az új anyagok tervezéséhez és a kísérleti eredmények értékeléséhez elméleti kémiai számításokat végzünk.

Kutatásaink során több különböző mechanizmusú fluoreszcens jelzővegyület spektroszkópiai tulajdonságát vizsgáltuk protikus oldószerekben, elsősorban vízben. A kumarin 102 – és általában a kumarinváz fluoreszcens indikátorok – a „charge transfer” típusú jelzővegyületek közé sorolhatók, ezeknél gerjesztést követően gyors töltésátrendeződés történik, ezért fluoreszcencia-emissziójuk jelentősen eltolódik az abszorpciós sávhoz viszonyítva. Protikus közegben ez a töltésátrendeződés a sav-bázis tulajdonságok jelentős változását is okozhatja gerjesztett állapotban. A kumarin 102 esetében a vegyület pK_a értéke megnő az alapállapothoz képest. Kísérletekkel bizonyítottuk a vegyület fotobázis tulajdonságát, valamint meghatároztuk az indikátor és oldószer közötti protontranszfer sebességét. [25] A 3-hidroxiflavonok – így a kísérleteink fókuszában álló 4-dietilamino-3-hidroxiflavon is – az ESIPT- mechanizmusú fluoreszcens jelzővegyületek közé sorolható. Ezekben a vegyületekben a flavon-alapváz 4-es helyzetű karbonilcsoportja mellett 3-as helyzetben egy hidroxilcsoport van. Gerjesztett állapotban a hidroxilcsoport protonja képes átugrani a karbonilcsoportra, ilyen módon egy gerjesztett állapotú tautomer forma keletkezik. [26] Mind a normál, mind a tautomer forma leadhatja az energiáját fluoreszcencia útján, ezért a spektrumban két, jól elkülönülő sáv látható. Protikus oldószerekben ez a gerjesztett állapotú intramolekuláris protontranszfer gátolt folyamat. A 4-dietilamino-3-hidroxiflavon esetében igazoltuk, hogy acetonos oldatban, kis mennyiségű víz jelenlétében erősen fluoreszkáló vízkomplex keletkezik, melynek szerkezete jelentősen eltér a tiszta vízben jelen lévő vízkomplexétől és gyengén emittál. [27]

A jelzőanyagok esetleges aggregációja tanulmányozható különböző üregméretű és töltésű makrociklusokkal. Az indikátor és aggregátumainak spektroszkópiai tulajdonságai fontosak lehetnek mind az anyagtudományi, mind a biológiai alkalmazásokban. Ilyen speciális környezeteket modelleztünk ionos makrociklusokkal, amelyek az indikátorral szupramolekuláris komplexet képeznek. Kutatásainkban több kationos jelzővegyület szulfokalixarénnel alkotott komplexeit vizsgáltuk. [28,29]

A festékmolekulák makrociklussal képzett komplexei nemfluoreszcens anyagok fluoreszcenciás kimutatására alkalmazhatók az analitikai kémiában. Az ilyen fluoreszcens szenzorok hasonlóan működnek, mint a bioanalitikában elterjedt kompetitív assay-k: a makrociklussal, mint mesterséges receptorral, a festék és az analit is komplexet képez. A fluoreszcencia-színképből megállapítható a szabad és a makrociklushoz kötött festék aránya, amiből az analit koncentrációjára következtethetünk. Az elmúlt évek-

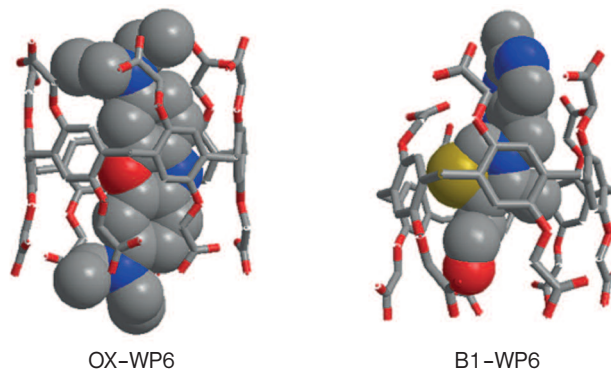
ben pillérarén-típusú makrociklusok komplexképzését tanulmányoztuk többféle fluoreszcens jelzőanyaggal, kitérve a képződő komplexek analitikai alkalmazásaira. Az oxazin 1 fluoreszcens indikátor pillérarén-komplexét sikerrel alkalmaztuk B1-vitamin kimutatására és kvantitatív meghatározására multivitamin-készítményben (5. ábra). [30]



5. ábra. Oxazin 1–WP6 kémiai szenzor ($[OX]_0 = 10^{-6} \text{ M}$, $[WP6]_0 = 9 \cdot 10^{-6} \text{ M}$) B1-vitamin jelenlétében ($[B1]_0 = 0-8,67 \cdot 10^{-4} \text{ M}$).

Fotó: Oxazin 1–WP6 kémiai szenzor B1-vitamin nélkül és annak jelenlétében

Kvantumkémiai számításokkal (6. ábra) és NMR-kísérletekkel igazoltuk mind az oxazin–WP6 komplex, mind a B1-vitamin–WP6 komplex szerkezetét.



6. ábra. Az OX–WP6 és a B1–WP6 komplex szerkezete

A különböző töltésű és üregméretű pillérarénnel biomolekulákat, így bioaminokat, [31,32] aminosavakat [33,34] és nukleotidokat detektáltunk. [35]

Szintén érdekes kutatási területünk a fotokróm molekulák vizsgálata. Ezek olyan vegyületek, melyekben fény hatására olyan reverzibilis szerkezetváltozás jön létre, ami színváltozással jár. A spiropiránok [36] mellett új, szintetikus kémikus együttműködő partnereink által előállított kumarinváz vegyületekkel is végzünk kísérleteket. [37]

Műanyag- és Gumiipari Laboratórium

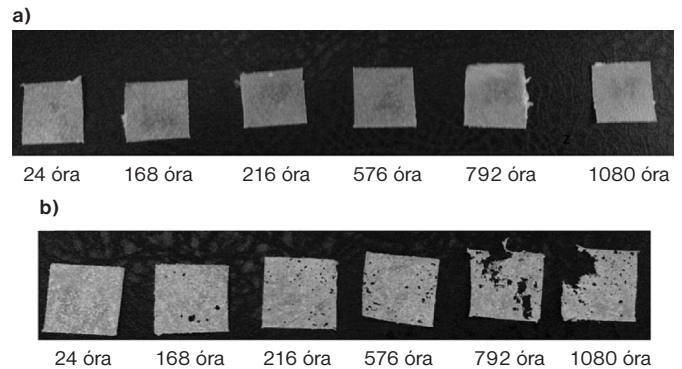
A Műanyag- és Gumiipari Laboratórium (MGL) fő célja, hogy a műanyagok előállításában, feldolgozásában és alkalmazásában jártas szakembereket képezzen, valamint a műanyagokkal és ter-

mészetes polimerekkel kapcsolatos alap- és alkalmazott kutatást végezzen. A kutatócsoport sok változáson esett át az elmúlt években, és jelen formájában a HUN-REN Természettudományi Kutatóközpontjának (HUN-REN TTK) Polimer Fizikai és Kémiai Csoportjaival képez szakmai egységet, kutatócsoportot (továbbiakban Laboratórium). Az oktatási tevékenység, valamint az alap-kutatás mellett a Laboratórium nagy figyelmet szentel a hazai és külföldi vállalatok problémáinak, tanácsadásnak és a velük folytatott szakmai együttműködésnek is.

A labor alap- és alkalmazott kutatási tevékenysége rendkívül szorosan kapcsolódik egymáshoz, a második az elsőre épül. Tekintettel arra, hogy az anyagok tulajdonságait szerkezetük határozza meg, az egyik fő célunk a szerkezet-tulajdonság összefüggések megállapítása és felhasználásuk új anyagok fejlesztésében. Tekintettel arra, hogy a polimerizációs eljárásban előállított anyagok jellemzői nem mindig felelnek meg egy kívánt alkalmazási terület követelményeinek, a polimereket gyakran módosítják szerkezetük megváltoztatásával vagy más komponensek hozzáadásával, társított műanyagokat hozva létre. Kezdetben elsősorban tömegműanyagokkal és azok módosításával foglalkozott a laboratórium, de a társadalmi igényeknek megfelelően a kutatás fókuszát fokozatosan elmozdult a fenntarthatóság által meghatározott irányba. Egyre több figyelmet szentelünk a természetes polimereknek és adalékoknak, a biodegradálható polimereknek és környezetvédelmi kérdéseknek. Az alkalmazási területek is változtak, és az egyszerű szerkezeti anyagok helyett a funkcionális anyagok kerültek előtérbe. A művelt tématerületek átfednek egymással és az egyikben szerzett tudást gyakran egy másik területen is felhasználhatjuk.

A szemikristályos polimerek tulajdonságai tág határok között módosíthatók a kristályszerkezet megváltoztatásával, amire az ipari gyakorlatban nagy hatékonyságú gócképzőket használnak. A módosítás célja mindig a felhasználás szempontjából előnyös tulajdonságok, például a jó átlátszóság vagy nagy merevség biztosítása. Legfrissebb kutatásaink a kristályszerkezet és a tulajdonságok tervezhetőségével, modellezésével foglalkoznak, és céljuk a szerkezet és a tulajdonságok, valamint az egyes anyagok korlátainak minél pontosabb előrejelzése. [38–39]

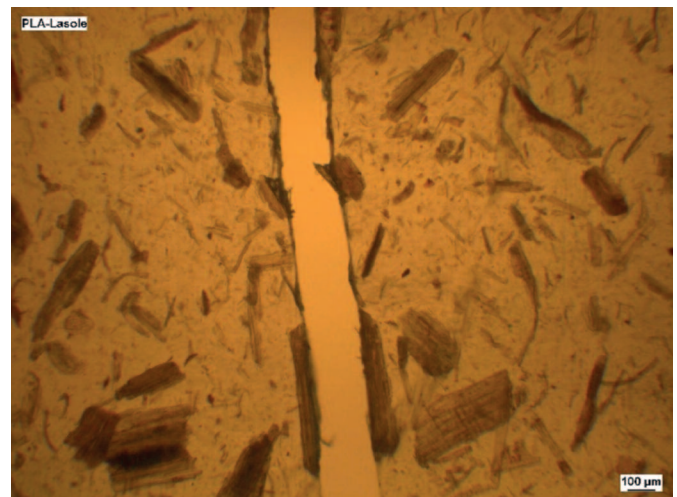
Tekintettel arra, hogy az évente gyártott 360 millió tonna műanyag nagyon kis része (<1%) biopolimer (természetes, biodegradálható), változatlan az érdeklődés a tömegműanyagok fejlesztése iránt. A kezdeti módosítási kísérletek az ár csökkentésére irányultak, töltőanyagot tartalmazó műanyagokat állítottak elő. Bár az ár kezdetben valóban csökkent, a homogenizálási, kompaundálási költségek növekedése megkövetelte, hogy a módosítás műszaki előnyökhöz vezessen: valamelyik tulajdonság javulásához vagy új, funkcionális jellemzők megjelenéséhez. Felhasználva korábbi tapasztalatainkat zeolitokból és ütésálló polisztirolból deszikkáns kompozitokat állítottunk elő, amelyek vízérzékeny anyagok csomagolására alkalmasak. [40] Az érdeklődés a hagyományos mikroméretű töltőanyagok felől a nanodimenziójú erősítőanyagok irányába mozdult el, azon belül is a funkcionális került előtérbe. Halloysite nanocsövek felületét természetes eredetű antioxidánssal, kvercetinrel kezeltünk, így kontrollált leadást és a polietilén termék hosszabb élettartamát érve el. [41] A halloysite nanocsöveket nemcsak a hatóanyag-leadás kontrollálására, hanem egyéb funkciók kialakítására is használtuk. Enzimeket rögzítettünk a nanocső felületén, majd biodegradálható polimerhez adtuk. Az enzim katalizálta a polimer degradációját (7. ábra), így először a világon ellenőrzött élettartamú vázanyagok, scaffoldok előállításának teremtettük meg a lehetőségét.



7. ábra. Polimerbe ágyazott, halloysite hordozóra felvitt enzim katalitikus hatása polikaprolaktonban; a) enzim nélkül, b) enzimmel

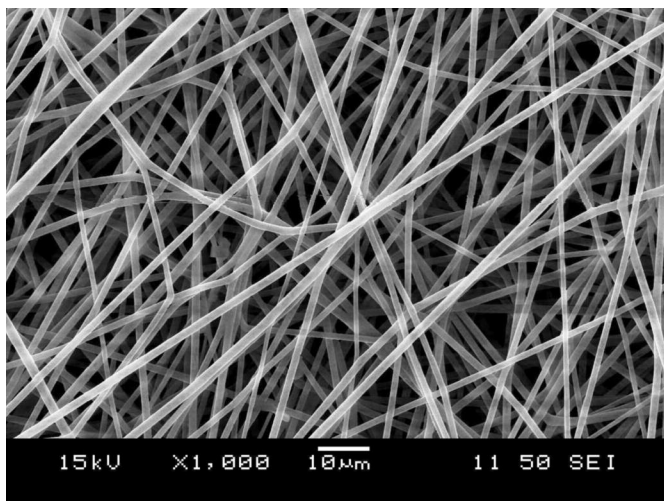
[42] Az autóipar nagy mennyiségű tömegműanyagot használ, azonban a rendkívül magas követelmények állandó fejlesztést igényelnek. Az alkalmazott szerkezeti anyagokkal szemben támasztott egyik követelmény a nagy merevség és ütésállóság, amit nehéz elérni. Az ütésállóság növelésének hagyományos módja elasztomer adagolása az alappolimerhez, ez azonban csökkenti a merevséget. Új ütésállósítási módszert dolgoztunk ki, amelyben elasztomer helyett szintetikus szálakat használunk a törési ellenállás növelésére. [43] A szerkezet és tulajdonságok mellett részletesen vizsgáltuk az új anyagok deformációs mechanizmusát, és megállapítottuk, hogy a lokális folyamatok módosításával a törési ellenállás optimalizálható a merevség csökkenése nélkül. Az elvet sikeresen alkalmaztuk hibrid, többféle szálakat tartalmazó kompozitokban [44] és természetes polimerekben is, [45] az eredményt egy multinacionális vállalattal közösen szabadalmaztattuk. [46]

Bár a tömegműanyagok felhasználása jelenleg még dominál az iparban, egyre nő az érdeklődés a természetes anyagok iránt. A fejlődés rendkívül gyors ezen a területen, az ilyen anyagok felhasználásának növekedési üteme évi 15% körüli érték. Első pillantásra az tűnik a legegyszerűbbnek, hogy a hagyományos töltő- és erősítőanyagokat természetes szálakkal és töltőanyagokkal helyettesítsük. Számos ilyen anyagot kipróbálva a legkülönbözőbb polimerekben kiderült, hogy a megoldás nem ilyen egyszerű. A kis felületi energiájú szálak és a legtöbb polimer közötti rossz adhézió, valamint a szálak tengelyükkel párhuzamos kis szilárdsága (8. ábra) gyenge kompozit-tulajdonságokat, kis szilárdságot



8. ábra. Faszemcsék törése a tengelyük mentén PLA/fa kompozitban

és ütésállóságot eredményez. [47] A polipropilén (PP)/természetes szál kompozitok ütésállóságát a hagyományos elasztomeradagolással nem lehetett növelni, csak a fent ismertetett új módszer, szintetikus szálak alkalmazása vezetett eredményre. [48] Teljes egészében biodegradálható polimer rendszerek előállításához olyan mesterséges vagy természetes, biológiailag lebontható polimereket alkalmazunk, mint a politejsav (PLA), a polikaprolakton (PCL) vagy a poli(hidroxi-butirát) (PHB). Készítünk PHB-membránokat és scaffoldokat [11] és PLA hatóanyagleadó rendszereket orvosi felhasználásra. [49] (9. ábra) Ezek a biopolimerek kombinálha-



9. ábra. Elektromos szálhúzással készült metronidazol hatóanyagot tartalmazó készítmény fogászati célra

tók a legkülönbözőbb természetes polimerekkel (keményítő, lignin), természetes szálakkal (faliszt, len, cukornád bagaszszál), nano- és regenerált cellulóz stb. Lignin, len és PP felhasználásával olyan kompozitot sikerült előállítanunk, amelynek természetesanyag-tartalma közel 80%. [50] Különböző cellulózforrásokból kristályos nanocellulózt (CNC) állítottunk elő, amelyből vékony, átlátszó és kiváló szilárdságú filmeket öntöttünk. A film-tulajdonságokat különböző térhálósító szerekkel módosítottuk. [51] A termoplasztikus keményítő mechanikai tulajdonságait, vízerzékenységét és retrográdióját agar-agar, [52] kitozán, nanotöltőanyagok és nanocellulóz [53] felhasználásával csökkentettük. Kitozánból és alginátból szennyvíztisztításra alkalmas géleket állítottunk elő. Kisfrekvenciás ultrahangos kezeléssel jelentősen fokoztuk a cellulóz enzimikus degradációját. [54]

Kiemelt hangsúlyt fektetünk a környezetvédelemmel és a fenntarthatósággal kapcsolatos kérdésekre. Vezető szerepet vállalunk a BIOEAST kezdeményezésben, amelynek célja az együttműködés erősítése a szakpolitika és a tudományos élet szereplői között a biomassza-alapú gazdaság területén. Ezen belül, az Agrárminisztériummal karöltve, mi vezetjük a fenntartható vegyületekkel és anyagokkal foglalkozó nemzetközi munkacsoportot. Laboratóriumunkban vizsgáltuk tömegműanyagból készült termékek bomlását és mikroműanyagok képződését. [55] Mennyiségi modellt dolgoztunk ki a PHB biológiai, enzimikus degradációja kinetikájának leírására. [56] A modellt később alkalmazni tudtuk más alifás poliészterek és kompozitjaik degradációjának leírására is, és az távlatilag felhasználható scaffoldok vagy hatóanyag-hordozó mátrixok teljes metabolizálásához szükséges idő becslésére is. Mind a szintetikus, mind pedig a biopolimerek szerves anyagok, amelyek kémiai reakciókban vesznek részt feldolgozásuk és alkalmazásuk során. Ezek a reakciók általában káro-

sak, a polimerek degradálódnak, ezért stabilizátorokat adnak hozzájuk. A jelenleg alkalmazott stabilizátorok túlnyomó része szintetikus vegyület, a leggyakrabban valamilyen fenolos antioxidáns. A természet azonban számos antioxidáns szintetizál és használ élő szervezetekben. Kiterjedt kutatás keretében vizsgáljuk a jelenleg használt szintetikus, fenolos antioxidánsok helyettesíthetőségét mind természetes antioxidáns vegyületekkel (kver-



10. ábra. Jelentős mennyiségű polifenolt tartalmazó gyümölcsök, amelyek melléktermékeinek extraktuma alkalmas polimerek stabilizálására

cetin, kurkumin, rutin, dihidromiricetin), mind pedig extraktumokkal, amelyeket mezőgazdasági melléktermékekből vonnak ki. [57] Utóbbiak jelentős mennyiségű polifenolvegyületet tartalmaznak, amelyek polietilénben rendkívül hatásos feldolgozási stabilizátornak bizonyultak (10. ábra), de javították a PHB stabilizálását is. [58]

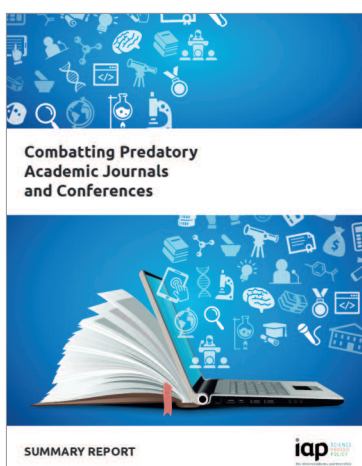
IRODALOM

- [1] Tóth, A., Voitko, K.V., Bakalinska, O., Prykhod'ko, G.P., Bertóti, I., Gun'ko, V.M., László, K. Carbon (2012) 50, 577–585. DOI: 10.1016/j.carbon.2011.09.016
- [2] S. Farah, B. Gyarmati, J. Madarász, S. Villar-Rodil, J.M.D. Tascón, K. László. Journal of Molecular Liquids (2023) 386, 122451. 0.1016/j.molliq.2023.122451
- [3] Benjámin Gyarmati, Shereen Farah, Attila Farkas, György Sáfrán, Krisztina László, Nanomaterials, (2022) 12, 916. 10.3390/nano12060916
- [4] Imre Bertóti, Shereen Farah, Anna Bulátkó, Attila Farkas, János Madarász, Miklós Mohai, György Sáfrán, Krisztina László. Carbon (2022) 199, 415–423 doi.org/10.1016/j.carbon.2022.08.024
- [5] O. Czakkal, L. Sós, Cs. Weingart, E. Geissler, L. Chiappisi, Kr. László: Dynamics of proteins adsorbed on carbon nanoparticles. ILL and ESS European Users Meeting October 10–12, 2018. Grenoble, France.
- [6] Lenke Kócs, Emőke Albert, Borbála Tegze, Márta Kabai-Faix, Csaba Major, András Szalai, Péter Basa, Zoltán Hörvölgyi. Periodica Polytechnica-Chemical Engineering (2018) 62(1), 21–31.
- [7] Kócs Lenke, Tegze Borbála, Albert Emőke, Major Csaba, Szalai András, Fodor Bálint, Basa Péter, Sáfrán György, Hörvölgyi Zoltán. VACUUM (0042-207X 1879-2715): 192 Paper 110415. 9 p. 2021.
- [8] Szabadalom: Feltalálók: Zoltán Hörvölgyi, Jánosné Kabai, Emőke Albert, Lenke Kócs, Csaba Ferenc Major, Antireflection film and its use on a substrate, Lajstromszám: US11029514, Benyújtás éve: 2017. Benyújtás száma: US16/310,112, Benyújtás országa: Magyarország, Közzététel éve: 2021. Szabadalmat benyújtotta: Hungaro Lux Light Kft.
- [9] Kócs Lenke: Eco-friendly preparation of anti-reflective silica coatings: an investigation of optical properties and stability, PhD értekezés. 2021.
- [10] Ábrahám Attila: Fényáteresztést növelő és vízlepergető szol-gél-bevonatok előállítása és jellemzése. 2017.
- [11] Ábrahám Attila: Mezopórusos hibrid SiO₂-bevonatok kialakítása fényáteresztést növelő és vízlepergető hatás elérése céljából, diplomamunka. 2018.
- [12] Ábrahám Attila, Kócs Lenke, Albert Emőke, Tegze Borbála, Szolnoki Beáta, Nagy Norbert, Sáfrán György, Basa Péter, Hörvölgyi Zoltán. THIN SOLID FILMS (0040-6090 1879-2731): 699 Paper 137914. 12 p. 2020.
- [13] Borbála Tegze, Emőke Albert, Bálint Fodor, György Sáfrán, Zoltán Hörvölgyi. Dyes and Pigments (2019) 167, 109–119.
- [14] Borbála Tegze, Emőke Albert, Boglárka Dikó, János Madarász, György Sáfrán, Zoltán Hörvölgyi. Studia UBB Chemia (2019) 64(3), 81–98.
- [15] Borbála Tegze, Emőke Albert, Boglárka Dikó, Norbert Nagy, Adél Rác, György Sáfrán, Attila Sulyok, Zoltán Hörvölgyi. Nanomaterials (2021) 11, 2240.
- [16] Borbála Tegze, Gyula Tolnai, Dóra Hessz, Miklós Kubinyi, János Madarász, György Sáfrán, Zoltán Hörvölgyi: Journal of Thermal Analysis and Calorimetry. 2023.
- [17] Borbás Balázs: Fénymoduláló kolloidrészecskék szuszpenziói és kompozit rétegei: előállítás és jellemzés, TDK dolgozat. 2021.

- [18] Péter Márton, Emőke Albert, Norbert Nagy, Borbála Tegze, Gabriella Stefánia Szabó, Zoltán Hörvölgyi. *Studia Universitatis Babeş-Bolyai Chemia* (2020) 65, 63–79.
- [19] Péter Márton, Örs Tamás Nagy, Dorina Kovács, Beáta Szolnoki, János Madarász, Norbert Nagy, Gabriella Stefánia Szabó, Zoltán Hörvölgyi, *International Journal of Biological Macromolecules* (2023) 232, 123336.
- [20] Mammadova, A., Gyarmati, B., Sárdi, K., Paudics, A., Varga, Z., Szilágyi, A. *J. Mater. Chem. B* (2022) 10, 5946–5957. DOI: 10.1039/D2TB00674J
- [21] Szilágyi, B.A., Gyarmati, B., L. Kiss, E., Budai-Szűcs, M., Misra, A., Csányi, E., László, K., Szilágyi, A. *Colloids Surf. B* (2023) 225, 113254. DOI: 10.1016/j.colsurfb.2023.113254
- [22] Németh, Cs., Gyarmati, B., Gacs, J., Salakhieva, D.V., Molnár, K., Abdullin, T., László, K., Szilágyi, A. *Eur. Polym. J.* (2020) 130, 109624. DOI: 10.1016/j.eurpolymj.2020.109624
- [23] Gyarmati, B., Stankovits, G., Szilágyi, B.A., Galata, D.L., Gordon, P., Szilágyi, A. *Colloids Surf. B* (2022) 213, 112406. DOI: 10.1016/j.colsurfb.2022.112406
- [24] Stankovits, G., Ábrahám, Á., Kiss, É., Varga, Z., Misra, A., Szilágyi, A., Gyarmati, B. *Int. J. Biol. Macromol.* (2023) 253, 126826. DOI: 10.1016/j.ijbiomac.2023.126826
- [25] Hessz, D., Hégyel, B., Kállay, M., Vidóczy, T., Kubinyi, M. *J. Phys. Chem. A* (2014) 118(28), 5238–5247. DOI: 10.1021/jp504496k
- [26] Szakács, Z., Bojtár, M., Drahos, L., Hessz, D., Kállay, M., Vidóczy, T., Bitter, I., Kubinyi, M. *Photochem. Photobiol. Sci.* (2016) 15(2), 219–227. DOI: 10.1039/C5PP00358J
- [27] Hessz, D., Bojtár, M., Mester, D., Szakács, Z., Bitter, I., Kállay, M., Kubinyi, M. *Spectrochim. Acta A* (2018) 203, 96–105. DOI: 10.1016/j.saa.2018.05.104
- [28] Kubinyi, M., Vidóczy, T., Varga, O., Nagy, K., Bitter, I., *Appl. Spectrosc.* (2005) 59, 134–138. DOI: 10.1366/0003702052940477
- [29] Varga, O., Kubinyi, M., Vidóczy, T., Baranyai, P., Bitter, I., Kállay, M., *J. Photochem. Photobiol. A* (2009) 207, 167–172. DOI: 10.1016/j.jphotochem.2009.07.001
- [30] Paudics, A., Hessz, D., Bojtár, M., Bitter, I., Horváth, V., Kállay, M., Kubinyi, M. *Sensors Actuat. B* (2022) 369, 132364. DOI: 10.1016/j.snb.2022.132364
- [31] Hessz, D., Bádógos, S., Bojtár, M., Bitter, I., Drahos, L., Kubinyi, M. *Spectrochim. Acta A* (2021) 252, 119455. DOI: 10.1016/j.saa.2021.119455
- [32] Paudics, A., Kubinyi, M., Bitter, I., Bojtár, M. *RSC Adv.* (2019) 9(29), 16856–16862. <https://doi.org/10.1039/C9RA03241J>
- [33] Bojtár, M., Paudics, A., Hessz, D., Kubinyi, M., Bitter, I. *RSC Adv.* (2016) 6(89), 86269–86275. DOI: 10.1039/C6RA15003A
- [34] Paudics, A., Hessz, D., Bojtár, M., Gyarmati, B., Szilágyi, A., Kállay, M., Bitter, I., Kubinyi, M. *Molecules* (2020) 25(21), 5111. DOI: 10.3390/molecules25215111
- [35] Bojtár, M., Kozma, J., Szakács, Z., Hessz, D., Kubinyi, M., Bitter, I. *Sensors Actuat. B* (2017) 248, 305–310. DOI: 10.1016/j.snb.2017.03.163
- [36] Kubinyi, M., Varga, O., Baranyai, P., Kállay, M., Mizsei, R., Tárkányi, G., Vidóczy, T. *J. Mol. Struct.* (2011) 1000, 77–84. DOI: 10.1016/j.molstruc.2011.05.055
- [37] Hessz, D., Kiss, E., Bojtár, M., Kunfi, A., Mester, D., Kállay, M., Kubinyi, M. *Photochemistry of a water-soluble coumarin-based photoswitch (bírálattal)*
- [38] Molnár, J., Sepsí, Ö., Erdei, G., Lenk, S., Ujhelyi, E., Menyhárd, A., *J. Polym. Sci.* (2020) 58, 1787–1795. DOI: 10.1002/pol.20200027
- [39] Molnár, J., Sepsí, Ö., Gaál, B., Zuba, Z., Dobrzyńska-Mizera, M., Menyhárd, A., *Mater. Design* (2021) 212, 110245. DOI: 10.1016/j.matdes.2021.110245
- [40] Kenyó, Cs., Renner, K., Móczó, J., Kröhnke, C., Fekete, E., Kröhnke, C., Pukánszky, B., *Eur. Polym. J.* (2018) 103, 88–94. DOI: 10.1016/j.eurpolymj.2018.01.013
- [41] Hári, J., Sárközi, M., Földes, E., Pukánszky, B., *Polym. Degrad. Stabil.* (2018) 147, 229–236. DOI: 10.1016/j.polymdegradstab.2017.12.003
- [42] Hegyesi, N., Hodosi, E., Polyák, P., Faludi, G., Balogh-Weiser, D., Pukánszky, B., *Colloids Surfaces: Biointerfaces* (2020) B186, 110678. DOI: 10.1016/j.colsurfb.2019.110678
- [43] Várdai, R., Lummerstorfer, T., Pretschuh, C., Jerabek, M., Gahleitner, M., Faludi, G., Móczó, J., Pukánszky, B., *Polym. Int.* (2021) 70, 1367–1375. DOI: 10.1002/pi.6210
- [44] Várdai, R., Lummerstorfer, T., Pretschuh, C., Jerabek, M., Gahleitner, M., Bartos, A., Móczó, J., Anggono, J., Pukánszky, B., *Polym. Adv. Technol.* (2021) 32, 2499–2507. DOI: 10.1002/pat.5280
- [45] Ferdinánd, M., Várdai, R., Móczó, J., Pukánszky, B., *Eng. Fracture Mech.*, 2023, 277, 108950. DOI: 10.1016/j.engfracmech.2022.108950
- [46] Lummerstorfer, T., Jerabek, M., Hochradl, S., Pretschuh, C., Sobczak, L., Stockreiter, W., Pukánszky, B., Móczó, J., *Fiber reinforced polymer composite (Borealis AG) EP 3309211 B1*, 2018.12.12.
- [47] Jerabek, M., Várdai, R., Lummerstorfer, T., Pretschuh, C., Gahleitner, M., Faludi, G., Móczó, J., Pukánszky, B., *Composites*, 2023, A167, 107445. DOI: 10.1016/j.compositesa.2023.107445
- [48] Polyák, P., Bartha, K., Pukánszky, B., *Mater. Sci. Eng.* (2020) C114, 111026. DOI: 10.1016/j.msec.2020.111026
- [49] Cui, L., Molnár, J.R., Budai-Szűcs, M., Szécsényi, M., Burián, K., Vályi, P., Berkó, S., Pukánszky, B., *Pharmaceutics* (2021) 13, 1654. DOI: 10.3390/pharmaceutics13101645
- [50] Pregi, E., Faludi, G., Kun, D., Móczó, J., Pukánszky, B., *Ind. Crops Prod.* (2022) 182, 114890. DOI: 10.1016/j.indcrop.2022.114890
- [51] Nagy, S., Csiszár, E., Kun, D., Koczka, B., *Carbohydr. Polym.* (2018) 194, 51–60. DOI: 10.1016/j.carbpol.2018.04.025
- [52] Csiszár, E., Nagy, A., Fekete, E., *Express Polym. Lett.* (2023) 17(5), 458–470. DOI: 10.3144/expresspolymlett.2023.34
- [53] Fekete, E., Bella, É., Csiszár, E., Móczó, J., *Int. J. Biological Macromol.* (2019) 136, 1026–1033. DOI: 10.1016/j.ijbiomac.2019.06.109
- [54] Csiszár, E., Szabó, Zs., Balogh, O., Fekete, E., Koczka, K., *Ultrason. Sonochem.* (2021) 78, 105771. DOI: 10.1016/j.ultrsonch.2021.105771
- [55] Huber, M., Archodoulaki, V.-M., Pomakhina, E., Pukánszky, B., Zinöcker, E., Gahleitner, M., *Polym. Degrad. Stabil.* (2022) 195, 109794. DOI: 10.1016/j.polymdegradstab.2021.109794
- [56] Polyák, P., Dohovits, E., Nagy, G.N., Vértessy, B.G., Vörös, G., Pukánszky, B. *Int. J. Biol. Macromol.* (2018) 112, 156–162. DOI: 10.1016/j.ijbiomac.2018.01.104
- [57] Kirschweng, B., Tátraaljai, D., Földes, E., Pukánszky, B., *Polym. Degrad. Stabil.* (2017) 145, 25–40. DOI: 10.1016/j.polymdegradstab.2017.07.012
- [58] Tátraaljai, D., Yun, T., Pregi, E., Vági, E., Horváth, V., Pukánszky, B. *Antioxidants* (2022) 11(2), 418. DOI: 10.3390/antiox11020418

Javaslatok a kifogásolható gyakorlatot folytató folyóiratok cikkeinek kezelésére. Az MTA ajánlásai az új típusú publikációs visszaélésekkel kapcsolatban

A digitalizáció, az online megjelenés, a gyors kommunikáció és az elérhető open access-modellek sok szempontból forradalmasították a tudományos eredmények megjelenítését és a publikációk elfogadásának kritériumrendszerére is hatással voltak. Az új publikálási eljárások kedvező következménye például a tudományos eredmények nagyobb láthatósága, könnyebb elérhetősége, a gyorsabb lektorálás és megjelentetés, a szélesebb bírálói kör bevonása. A változások árnyoldala viszont, hogy jó néhány új etikátlan viselkedési forma is megjelent, amelyek jelentősen torzíthatják az egészséges kutatási körülményeket, a döntően szakértői értékelésre alapozott tudományművelést. Az újonnan megjelent torzulások egyike a „predátor” (vagy parazita) folyóiratok megjelenése és rohamos elterjedése.



Az efféle etikátlan gyakorlatok feltárását az InterAcademy Partnership 2020-ban nemzetközi felméréssel célozta meg, amelynek eredményét 2022-ben adta közre (Combating Predatory Academic Journals and Conferences).

Az MTA Doktori Tanácsának (DT) elnöke 2022 decemberében javasolta a tudományos osztályoknak, hogy tekintsék át a szakterületeikhez tartozó kiadók és folyóiratok gyakorlatát, és osszák meg véleményüket a „predátor” problémával kapcsolatos tapasztalatokról és a szükségesnek ítélt lépésekről.

A felmérés eredményét és az IAP-tanulmány ajánlásait figyelembe véve az MTA Elnöksége bizottságot állított fel, amelynek fő feladata a predátor közlési gyakorlattal szembeni cselekvési terv kidolgozása volt. Az elemző munka során egyértelművé vált, hogy a predátor jelenség mögött – nemzetközi szinten – rendszerszerű okok húzódnak meg, és az is, hogy az okoknak csak az egyik, de nem egyedüli következménye a predátor jelenség.

A bizottság munkájának eredményeként készült el a *Javaslatok a kifogásolható gyakorlatot folytató folyóiratok cikkeinek kezelésére* című jelentés, amely az MTA honlapjáról (mta.hu) letölthető, de megküldték az egyetemi rektoroknak, a doktori iskolák vezetőinek, a szakpolitikusoknak, valamint digitálisan az MTA 18 ezer köztisztületi tagjának is. (mta.hu)