

Kutatómunka a BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszékén

KÁLLAY-MENYHÁRD Alfréd, KIRSCHWENG Balázs, HÁRI József, POLYÁK Péter, LÁSZLÓ Krisztina, HÓRVÖLGYI Zoltán, ALBERT Emőke, KUBINYI Miklós, GYARMATI Benjámín, SZILÁGYI András, KÁLLAY Mihály*

BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék, Műegyetem rkp. 3., 1111 Budapest

1. 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 kolloidika, a polimerkémia, az anyagtudomány, a spektroszkópia és az elméleti kémia területein végeznek kutatásokat. Ebben a közleményben áttekintjük a Tanszék csoportjainak kutatási irányait és az elmúlt évek főbb eredményeit.

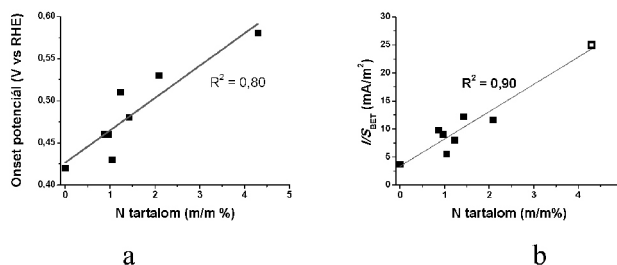
2. Felületkémiai Csoport

A csoport kutatási tevékenységének középpontjában hagyományosan a nagyfelületű szilárd anyagok adszorpcióhoz köthető viselkedése áll. Maga a jelenség régóta ismert, számtalan gáz és folyadékfázisok elválasztására, tisztítására alkalmazott eljárás alapja. Jelentősége pl. az analitikában, az élelmiszeriparban vagy a környezet- védelemben önmagáért beszél. Innovatív, anyagtudományi kutatásaink célja kiemelkedő szorpciós tulajdonságú új anyagok előállítása és alkalmazási területeik feltárása, ill. a szorpció és más, a felhasználás szempontjából releváns tulajdonságok kombinálása, akár társított rendszerekben is¹. Az adszorpció az anyagok felületéhez kapcsolódó tulajdonság. Fajlagosan nagy felületű anyagok a nanorészecskék és a pórusosrendszerek. A Felületkémiai Csoportban kristályos szén nanorészecskékkal (nanocső², grafén^{3,4} és származékaik) és pórusos szénegékekkel⁵ egyaránt foglalkozunk, nemzetközi együttműködésben is. Az utóbbi időben fordultunk a fémorganikus térhálók felé, melyeket jelenleg az adszorpciós gáztárolás legígéretesebb anyagaiként tartanak számon⁶.

A mezopórusos szén aerogélek a pórusos szenek különleges tulajdonságokkal bíró családját alkotják, pl. egyszerre hőszigetelők és elektromos vezetők. Nagy fajlagos felületük tág, könnyen átjárható pórusokkal párosul, ami áramló közegben és biológiai alkalmazásokban is előnyös. Az első szénegél prekuzort 1989-ben Pekala állította elő rezorcinnal és formaldehidből⁷. A szénegélek nagy előnye abban rejlik, hogy morfológiájuk és felületkémiajuk az alkalmazási területnek megfelelően tervezhető. Az előállításuk során gyakran alkalmazott szol-gél technika további előnye, hogy a szintézis bármely pontján vagy utókezeléssel könnyen építhetők be heteroatomok (pl. átmeneti fémek⁸, kén⁹, nitrogén¹⁰, stb.).

A szénmátrixba juttatott nitrogén az elektrontöbblet révén már kis mennyiségben is kedvezően befolyásolja a szenek tulajdonságait. A rezorcinnal mellett felhasznált melaminko-monomer sztöchiometrikus beépülése révén hangolható módon, 1-4 % nitrogén tartalmú szénegélt tudunk előállítani, mely a nitrogént döntően piridines, ún. N6 (2) formában tartalmazza.

Vizgőzadszorpciós vizsgálatokkal megállapítottuk, hogy a heteroatom (O és N) tartalom javítja a szénfelület hidrofilitását. A módosított felületkémiajú szénegélek egyik legintenzívebben kutatott alkalmazási területe az energiatárolás¹¹ és konverzió, a nitrogén ugyanis növeli a szenek aktivitását pl. a protoncsere-membrános üzemanyag-cellák katódján lejátszódó oxigén redukciós reakcióban (ORR). Ciklikus voltammetriás vizsgálataink megerősítették, hogy a szenek nitrogén tartalma szignifikánsan növeli azok ORR aktivitását (1. ábra).



1. ábra: A ciklikus voltammetriás görbék ún. on-set potenciálja (a) és a szén elektród látszólagos felületére normált katódos csereáramsűrűsége (b) a tömbfázisbeli nitrogéntartalom függvényében¹⁰

A 1.b ábrán látható közel lineáris kapcsolat azt mutatja, hogy a nitrogén hozzáférhetőségének, azaz a szén fajlagos felületének fontos szerepe van a vizsgált elektrokémiai folyamatban. Hasonló módon szintetizált, de grafén-oxidot is tartalmazó szén aerogélből készült elektródunkat eredményesen alkalmaztuk mikrobiológiai üzemanyag-cellában is¹².

3. Kolloidkémia Csoport

A Kolloidkémiai Csoport érdeklődési körében kiemelt szerepet kap a különböző típusú vékonyrétegek fejlesztése és jellemzése.

* Kállay Mihály. Tel. (+36)-1-463-4076; fax: (+36)-1-463-3474; e-mail: kallay@mail.bme.hu

Különböző módokon előállított, ezüsttartalmú mezopórusos TiO_2 szol-gél bevonatok antibakteriális hatását hasonlítottuk össze. A vizsgálatokhoz *Escherichia coli* baktériumtörzset használtunk. Emellett vizsgáltuk az ezüstadalék jellegének és mennyiségének, valamint a kompozit bevonat szerkezeti jellemzőinek az antibakteriális tulajdonság időtállóságára kifejtett hatását. Megállapítottuk, hogy a bevonatok látható fényben és sötétben egyaránt hatásosak. Kimutattuk, hogy a minták jelentős antibakteriális hatását a bevonatból kilépő ezüst mennyisége határozza meg, a TiO_2 -bevonatok fotokatalitikus aktivitásának hatása a baktériumokra emellett elhanyagolható. Kimutattuk, hogy a mezopórusos bevonatok impregnálásával megfelelő mennyiségű ezüst juttatható a pórusok belsejébe az antibakteriális hatás biztosításához.^{12,13,14}

Mezopórusos, félvezető anyagú (TiO_2 , ZnO) bevonatok összetételét, kristályosságát, pórusszerkezetét szabályozva vizsgáltuk a fotoaktív tulajdonságok változását, melyhez modellszínezék fotodegradációját követtük nyomon optikai spektroszkópiai módszerekkel. Különböző módszerekkel állítottunk elő nemesfémekkel (arany, ezüst) adalékolt TiO_2 -bevonatokat, melyek megnövekedett fotoaktivitást mutattak. Különböző színezékeket adszorbeálva a bevonatok pórusrendszerében, majd a színezékek fotodegradációját a szilárd-levegő határfelületen tanulmányozva UV és látható fényű megvilágítás mellett, információkat szereztünk a színezék-félvezető kölcsönhatásokról (színezék-érzékenyítés), a színezékek bomlási folyamatairól (sebesség, kinetika), valamint fotostabilitásáról. Kimutattuk, hogy a bevonatok pórusrendszerében adszorbeált színezékek mennyisége, ill. az asszociált formák-monomerek mennyiségének aránya szabályozható a bevonatok impregnálása során alkalmazott színezékoldat pH-jának, koncentrációjának, az alkalmazott oldószernek megválasztásával.

Különböző típusú, kompakt és mezopórusos SiO_2 -bevonatok esetén az előállítási paramétereknek a bevonatok permeabilitására gyakorolt hatását tanulmányoztuk. A 130 – 350 nm vastagságú bevonatokat Zn-felületeken alakítottuk ki. A korróziógátló hatás növelésére a bevonatok felületét monofunkciós vagy bifunkciós szililezőszerekkel hidrofobizáltuk. Azt tapasztaltuk, hogy a mezopórusos bevonatok szigetelő hatása eléri a kompakt szilika bevonatokét, mely számottevő korróziót gátló hatásban is megmutatkozik. Kimutattuk, hogy a felületi hidrofobizálás eredményeképpen a korróziós áramsűrűségértékek egy, vagy két nagyságrenddel csökkentek a nem hidrofobizált rétegeknél mért értékekhez képest. Kidolgoztunk egy új eljárást, mely lehetővé teszi különböző korróziós inhibitoranyagok tárolását mezopórusos SiO_2 -bevonatokban. Ennek során a pórusrendszerbe impregnálással bejuttatott modellinhibitort a bevonat felületi hidrofobizálásával zártuk el a külvilágtól, ezáltal biztosítva, hogy a bevonatokból vizes közegben csak a bevonatok sérülése esetén áramolhasson ki a hatóanyag, mely így módon öngyógyító hatást eredményezhet.^{12,13,15,16}

Fényáteresztést növelő bevonatok fejlesztése céljából mezopórusos SiO_2 szol-gél vékonyrétegeket képeztünk üveg- és polikarbonát-hordozókon. Spektroszkópiai ellipszometria, illetve ellipszometriai porozimetria

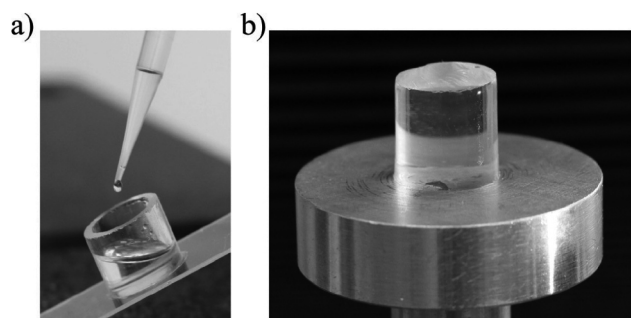
vizsgálatokkal a bevonatok vastagságát 85 - 135 nm, porozitásukat pedig 18 – 37%-nak találtuk. A bevonatok pórusrendszere zsugorodásának megakadályozása céljából sav-, vagy báziskatalizált vázerősítési eljárást alkalmaztunk. A minták időbeli, optikai stabilitását UV-Vis spektrometriával tanulmányozva megállapítottuk, hogy a minták előnyös optikai tulajdonságaikat ($T_{\text{max}} = 98\% - 99\%$) akár 1 év tárolási idő után is megőrizték.¹⁷

Szabályozott hatóanyagleadás modelljeként kitozán és kétrétegű – Rodamin 6G színezékkel impregnált mezopórusos SiO_2 -kitozán (300 – 3000 nm vastagságú) vékonyrétegeket alakítottunk ki üveghordozók felületén. A natív, illetve ionosan és kovalensen térhálósított kitozánbevonatok tulajdonságait 7,3-as pH-jú vizes közegben tanulmányoztuk. Spektroszkópiai ellipszometriával kimutattuk, hogy a kitozánréteg natív állapotához képest a kovalens térhálósítás kisebb, míg az ionos térhálósítás nagyobb duzzadási fokot eredményezett. A térhálósított kitozánbevonatok – a duzzadási viselkedéstől függetlenül – jelentős színezékleadást gátló hatást mutattak a vizsgált rendszerekben.¹⁸

4. Lágú Anyagok Kutatócsoport

A csoport fő tevékenységi köre lágú anyagok szintézisére, jellemzésére és ezek lehetséges alkalmazására irányul. Nagy tapasztalattal rendelkezünk intelligens polimerek és polimer gélek fejlesztésében, különös tekintettel a biokompatibilis, szabályozott hatóanyag-leadásra képes rendszerekre, amelyek a környezeti paraméterek (hőmérséklet, pH, fény, mágneses tér stb.) változására érzékenyen és egyértelmű válaszreakcióval reagálnak. Az előállított polimerek és gélek termikus, mechanikai és reológiai tulajdonságainak jellemzésére magas színvonalú műszerpark és szakértelem áll rendelkezésre.

A Lágú Anyagok Kutatócsoport által intenzíven vizsgált polimer család különlegessége, hogy a polimer láncok szintetikus előállított poliaminosavból - poliaszparaginsav - vagy származékaiból épülnek fel, amely várhatóan biztosítja a biokompatibilitást és biológiai lebonthatóságot. Ezen kedvező tulajdonságok lehetővé teszik a rendszerek humánbiológiai alkalmazását, elsősorban a hatóanyag-leadás területén. A csoport által előállított változatos kémiai szerkezetű polimerek és gélek minden esetben a szervezetben előforduló egy vagy több fiziológias paraméter megváltozására képesek reagálni (pl.: pH-gradiens a gasztrointesztinális rendszerben,¹⁹ redox környezet változása az extra- és intracelluláris tér között²⁰), amely szelektív hatóanyag-leadást tesz lehetővé, növelve ezzel a terápiás hatékonyságot. A biohasznosulást elnyújtott hatóanyag-leadást biztosító, bioadhezív készítményekkel tervezzük elérni. Számos különböző gyógyszerformát állítunk elő az alkalmazási területnek megfelelően, így vízben duzzadó hidrogéleket,²¹ *in situ* gélesedő polimer oldatokat (2. ábra),²² vízben oldódó polimer filmeket. Elektrosztatikus szálképzéssel, többek között, nagy fajlagos felületű, gyorsan oldódó mátrixokat hozunk létre. Vizsgáljuk a 3D nyomtatás alkalmazási lehetőségeit is fotopolimerizációval előállítható térhálós rendszerek és hidrogélek szintézisében.



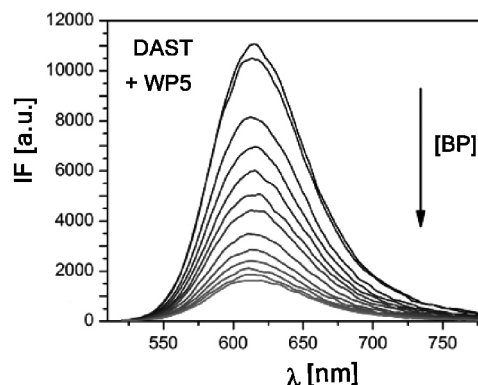
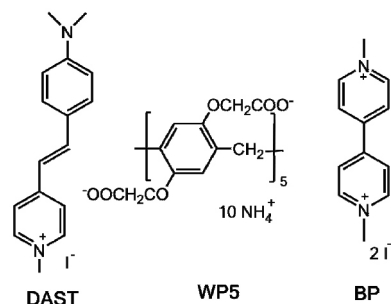
2. ábra: Oxidációra érzékeny poliaminosav-származék (a) kis viszkozitású vizes oldata és az abból (b) *in situ* előállítható hidrogél²²

5. Spektroszkópia Csoport

A fluoreszcenciás képalkotó módszerek napjainkban gyorsan fejlődnek, s ennek részeként az új fluoreszcens jelzőanyagok fejlesztése ma a kémiai kutatásnak fontos területe. Az FKAT Spektroszkópia Csoportjában az 1990-es évek elején indult el a fluoreszcens jelzőanyagok kutatása. Vizsgálataink során stacionárius és időfelbontásos (időkorrelált egy-foton számlálás, lézeres villanófény fotolízis) spektroszkópai kísérleteket végzünk. Az új anyagok tervezéséhez és a kísérleti eredmények értékeléséhez elméleti kémiai számításokat végzünk.

Kutatásaink során protikus oldószerekben tanulmányoztuk „charge transfer” típusú fluoreszcens indikátorok tulajdonságait. Protikus közegben, a gerjesztett indikátorban megváltozó lokális töltések miatt változnak az indikátor és az oldószer közötti hidrogénhidak, előfordul, hogy a gerjesztett állapotú festék protonálódik, vagy protont disszociál. Az 5–ciano-N-metilindolin esetében igazoltuk, hogy a cianocsoport és a protikus oldószerek között hidrogénkötés alakul ki, amely gerjesztett állapotban is stabil.²³ A jelenség kioltást okoz, ami a lokális víztartalom fluoreszcenciás kimutatására ad lehetőséget. A níluskék, az oxazin 720 és a kumarin 102 esetében a sav-bázis tulajdonságok változását vizsgáltuk gerjesztett állapotban.^{24,25} Meghatároztuk a gerjesztett állapotú pK_a értéket, és a gerjesztett festék és az oldószer közötti protontranszfer sebességét.

Az alkalmazások során figyelembe kell vennünk a jelzőanyagok aggregációját, ami többek között felületeken és pórusokban fordul elő, nagy lokális töltéssűrűség hatására. Az ilyen speciális környezeteket modellezhetjük ionos makrociklusokkal, amelyek a jelzőanyaggal szupramolekuláris komplexet képeznek. Mi a kationos festékanyagoknak (oxazin 1, metilénkék) szulfo-kalixarénnel alkotott komplexeit vizsgáltuk.^{26,27}



3. ábra: Bipiridinium (BP) fluoreszcenciás kimutatása DAST-WP5 komplexszel. Koncentrációk: $[DAST]_0 = 5$ M, $[WP5]_0 = 15$ M, $[BP]_0 = 0-30$ M. $\lambda_{ex} = 506$ nm.

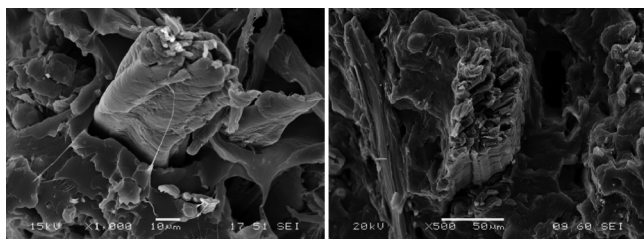
A festékmolekulák makrociklussal képzett komplexeit alkalmazzák az analitikai kémiában, nem-fluoreszcens anyagok fluoreszcenciás kimutatására. Az ilyen fluoreszcens szenzorok hasonlóan működnek, mint a bioanalitikában elterjedt kompetíciós assay-k: a makrociklussal, mint receptorral a festék és az analit is komplexet képez. A fluoreszcenciaszínképéből megállapítható a szabad és a receptorhoz kötött festék aránya, amiből az analit koncentrációjára következtethetünk. Az utóbbi időben pillérarének – új típusú makrociklusok – komplexképzését tanulmányozzuk többféle fluoreszcens jelzőanyaggal, kitérve a képződő komplexek analitikai alkalmazásaira. Stilbazólium festék – pillérarén komplexeinkkel bipiridil vegyületet (3. ábra),²⁸ aminokat és bázikus aminosavakat²⁹ detektáltunk. A DSS anionos dapoxil festéknek az ammónium pillér[6]arénnel alkotott komplexével ATP-t sikerült kimutatni, a hatás más nukleotiddal szemben szelektívnek bizonyult.³⁰

Szintetikus kémikus együttműködő partnereink számos olyan kémiai szenzort is előállítanak, amelyekben a fluoreszcens jelzőcsoport kovalensen kapcsolódik az analitot felismerő makrociklushoz. Közülük itt az enantiomereket megkülönböztető királis receptorokat említjük meg. Kutatásaink során királis kalixarének,³¹ ciklohexil-tiokarbamid³² és koronaéterek³³ kölcsönhatását vizsgáltuk királis aminokkal és aminosavakkal.

6. Műanyag- és Gumiipari Laboratórium

A Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék részét képező Műanyag- és Gumiipari Laboratórium (MGL, korábban önálló tanszék) 1953-ban alakult azzal a céllal, hogy a műanyagok előállításában, feldolgozásában és alkalmazásában jártas szakembereket képezzen és ezek a célok a mai napig változatlanok. A kutatócsoport sok változáson esett át és jelen formájában az MGL a Magyar Tudományos Akadémia Természettudományi Kutatóközpontjának (MTA TTK) Polimer Fizikai Osztályával képez egy professzionális kutatócsoportot (továbbiakban Laboratórium).

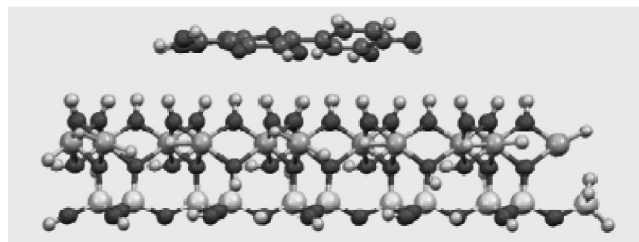
A jelenlegi kutatásaink során többkomponensű rendszerek tulajdonságait javítjuk oly módon, hogy azonosítjuk, majd megváltoztatjuk a domináns tönkremeneteli folyamatot. Jó példa erre a faliszt töltésű polipropilén kompozitok merevségének növelése, ahol a határfelületek elválásának megakadályozásával jelentős merevség növekedést lehet elérni.^{34,35} A vizsgálataink ugyanakkor rámutattak arra a tényre is, hogy a megváltozott határfelületi kölcsönhatások következtében a tönkremenetel mechanizmusa is megváltozik és a szálak szakadása, tördelődése kerül előtérbe. Következésképpen a tulajdonságok csak bizonyos határok között javíthatók. Ilyen összetett mikromechanikai folyamatok jellemző szerkezeteit mutatjuk be az 4. ábrán.



4. ábra: 30 V/V % töltőanyagot és (a) 20 m/m % elastomer alapú, illetve (b) 10 m/m% elastomer nélküli funkcionált kapcsolóanyagot tartalmazó kompozit szakított felületéről készített pásztázó elektronmikroszkópos felvétellel ((a) – határfelületi elválás és kihúzóadás; (b) – száltörés)

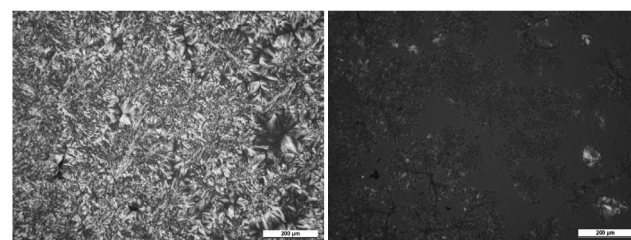
Szintén hosszú múltra tekint vissza Laboratóriumunkban a polimer nanokompozitok szerkezet-tulajdonság összefüggéseinek vizsgálata is. A kezdeti ígéretes eredmények ellenére azonban csak kevés esetben valósult meg a nanokompozitok ipari léptékű alkalmazása, esősorban a nanoméretű töltőanyagok nehéz eloszthatósága miatt. Ennek eredményeképpen az elmúlt években nagyobb hangsúly helyeződött olyan polimer nanokompozitok fejlesztésére, melyek szerkezeti anyagként betöltött szerepükön túl, más egyedi funkcióval is rendelkeznek. Laboratóriumunkban esősorban hallyosittel (HNT), mely egy természetben előforduló, bányászható, csőszerű morfológiával rendelkező ásvány, folynak intenzív kutatások. A csövek hossza néhány száz nanométertől néhány mikrométerig terjed, míg a belső átmérőjük néhány tíz nanométer, ami lehetővé teszi, hogy a cső belsejébe nagyobb méretű molekulák is bejussanak és adszorbeálódhassanak. Kutatásink homlokterében olyan kompozit rendszerek állnak, melyek időben elnyújtva képesek aktív hatóanyag leadására. Ennek fényében tehát olyan HNT/polimer kompozitokat tanulmányoztunk,

melyekben különböző stabilizátorokat juttatunk be a HNT csövek belső felületére (5. ábra), hogy időben hosszán elnyújtott stabilizáló hatást érjünk el például poliolefinekben.^{36,37} A töltőanyag jellemzése során, az irodalomban egyedülálló módon, inverz gázkromatográfiával határoztuk meg az ásvány felületi energiáját, aminek döntő szerepe van a kölcsönhatások erősségében. Részletes vizsgálatainkkal bizonyítottuk, hogy az antioxidáns molekulái preferáltan kötődnek meg a nanocsövek belső felületén és az összetétel helyes megválasztása mellett, elnyújtott stabilizáló hatás is biztosítható a módosított nanocsövekkel.



5. ábra: A kvercetin, természetes antioxidáns molekulájának adszorpciója HNT ásvány modellfelületén

Szemikristályos polimerek esetén a tulajdonságok módosíthatók a kristályszerkezet megváltoztatásával is. Erre az ipari gyakorlatban nagy hatékonyságú göcképzőket használnak, melyekkel a felhasználás szempontjából előnyös tulajdonságok, mint a jó átlátszóság, illetve nagy merevség biztosíthatók. A kristályszerkezet célzott módosításával és a polimer molekulászerkezetének együttes tervezésével tehát olyan tulajdonság kombinációk is elérhetők, melyek egymásnak ellentmondóak. A polipropilén polimorf szerkezetének módosításával olyan rendszert hoztunk létre, ahol a nagy ütésállóságú α -módosulatba kisméretű merev β -módosulatú kristályok képződését idéztük elő önszerveződő módon (6. ábra), így az ütésállóságot duplájára növeltük a merevség csökkenése nélkül.³⁸ A göcképző és a polimer molekulászerkezetének összehangolásával random etilén-propilén kopolimerek ütésállóságát, merevségét és átlátszóságát is nagymértékben növeltük.³⁹



(a)

(b)

6. ábra: Polipropilén kristályszerkezete 5000 ppm göcképző jelenlétében: a) végállapot 135 °C-on; b) a β -módosulat részleges kiolvasztását követően 157 °C-on.

A szerkezet-tulajdonság összefüggések mennyiségi leírása és modellezése pedig lehetővé teszi, hogy egyedi tulajdonságok elérhetőségét, illetve az elérésükhöz szükséges szerkezeteket előre tudjuk jósolni.⁴⁰ Természetesen a kőolajszármazék alapú tömegműanyagok mellett a természetes polimerek kutatása is intenzíven folyik

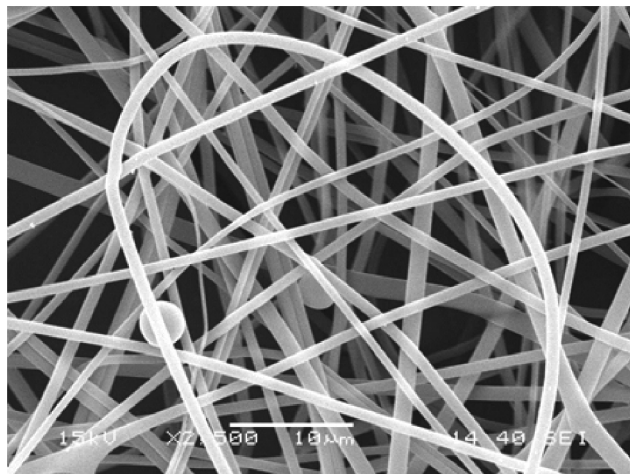
Laboratóriumunkban. Keményítő alapú polimerek feldolgozhatóságának javítása napjaink egyik nagy kihívása. A keményítő lágyításával jól feldolgozható faliszt tartalmú biokompozitot állítottunk elő.⁴¹ A keményítő mellett még cellulóz alapú polimerekkel elsősorban cellulóz nanokristályok funkcionális tulajdonságaival foglalkozunk és a nanocellulóz szuszpenziók egyedi jellegzetességeit tanulmányozzuk.⁴²

A hosszú évtizedek óta folytatott témák tapasztalatait természetesen újabb területeken is alkalmazzuk, hiszen a polimerek egyre inkább tért hódítanak az orvosi és biológiai alkalmazások területén is. A hagyományos transzplantációs eljárások hátrányaira például a jövőben a mesterséges szövettényésztés nyújthat megoldást. A technika három pilléren alapul:

- a regenerálandó szövetet felépíteni képes differenciálatlan sejtek kinyerésén,
- az ezek működését és szaporodását elősegítő anyagok létrehozásán,
- illetve a kialakítandó szövet támasztását szolgáló vázanyagok elkészítésén.

Ez a váz, vagy más néven scaffold, egy nyitott, összefüggő pórusszerkezettel rendelkező anyag, ami biztosítja, hogy a kialakítandó szövet három dimenzióban növekedhessen. Kulcsfontosságú, hogy a vázon a szövetet kialakító sejtek képesek legyenek megtapadni és elszaporodni, valamint, hogy a vázanyag és bomlástermékei ne legyenek toxikusak a szervezet számára. Pórusos vázanyagok többféle módszerrel is előállíthatók. Laboratóriumunkban a részecske kioldáson és habosításon alapuló módszerek mellett különböző szállhúzási technikákkal állítunk elő vázanyagokat mesterséges szövettényésztési célokra. Kutatásaink homlokterében természetes polimerek és szintetikus biopolimerek kombinációjából felépülő vázanyagok szintézise és gyártása áll, ötvözve a kétféle alapanyag típus előnyeit. Sikeresen állítottunk elő mikron- és szubmikron átmérőjű szálakból álló vázanyagokat politejsav (PLA), poli- ϵ -kaprolakton (PCL) és poli-3-hidroxi-butirát (PHB), valamint zselatin és kitozán kombinációból.⁴³ Zselatin tartalmú PLA szálak pásztázó elektronmikroszkópos felvétele látható a 7. ábrán.

Az elektromos szálképzéssel előállított szálak hatóanyag hordozóként is kiválóan alkalmazhatók: gyulladáscsökkentő, és antibakteriális vegyületeket tartalmazó szálakat állítottunk elő dentál-higiéniai felhasználásra, de *Candida antarctica*, illetve *Candida rugosa* baktériumokból származó lipáz enzimeket is sikeresen juttattunk politejsav szálakba, amik aztán felgyorsították a polimer bomlási sebességét az emberi szervezetet szimuláló környezetben.



7. ábra: PLA/zselatin alapú elektromos szálképzéssel előállított vázanyag (scaffold)

Laboratóriumunk nem utolsó sorban kiemelt hangsúlyt fektet azokra a polimerekre is, melyek alkalmazási lehetőségei elsősorban a biológiai úton történő lebonthatóságukból fakad. A biológiai úton történő lebonthatóság nem csak a polimer hulladékok komposztálásának, illetve a bioszféra körforgásába történő visszajuttathatóságának szempontjából fontos, hanem számos egészségügyi alkalmazási lehetőség szempontjából is, mert a kívánt polimer az élő szervezetben (In Vivo) kell, hogy lebomoljon. A folyamat modellezése igen összetett probléma, annak ellenére, hogy In Vivo körülmények között a metabolizist katalizáló közeg paramétereinek intervalluma közel állandó (37°C, és semleges, vagy ahhoz közeli pH). A modellezés célja, hogy meghatározzuk a lebomlás időbeni lefutását, annak érdekében, hogy egy scaffold, vagy egy hatóanyag-hordozó mátrix teljes metaboliziséhez szükséges időt becsülhessük megfelelően megválasztott biokatalizátorok, illetve enzim-molekulák jelenlétében. Laboratóriumunkban több olyan kutatási projekt is folyik, melyek célja az orvosi biológiában ma már elterjedten alkalmazott mikrobiális poliészterek (például poli(3-hidroxi-butirát), PHB) enzimkatalizált metabolizisének jellemzése, illetve az enzimreakció kinetikájának mennyiségi leírása. Az utóbbi években sikerrel fejlesztettünk ki és alkalmazunk olyan kinetikai modelleket, melyekkel nem csak a mikrobiális poliészterek lebomlásának leírása, de egyben a reakció lefutásának illetve időfüggésének becslésére, jóslására is lehetőség nyílik.⁴⁴

Hivatkozások

- Manek, E.; Berke, B.; Miklósi, N.; Sajbán, M.; Domán, A.; Fukuda, T.; Czakkel, O.; László, K. *Express Polymer Letters* **2016**, *10*, 710–720.
<https://doi.org/10.3144/expresspolymlett.2016.64>
- Tóth, A.; Voitko, K.V.; Bakalinska, O.; Prykhod'ko, G.P.; Bertóti, I.; Gun'ko, V.M.; László, K. *Carbon* **2012**, *50*, 577–585. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2011.09.016>
- Wang, S.; Ábrahám, D.; Vallejos-Burgos, F.; Geissler, E.; László, K.; Takeuchi, K.; Endo, M.; Kaneko, K. *Langmuir* **2016**, *32*, 5617–5622.
<https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.6b00483>
- Czakkel, O.; Marthi, K.; Geissler, E.; László, K. *Micropor. Mesopor. Mater.* **2005**, *86*, 124–133.
<https://doi.org/10.1016/j.micromeso.2005.07.021>
- Domán, A.; Madarász, J.; László, K. *Thermochim. Acta* **2017**, *647*, 62–69. <https://doi.org/10.1016/j.tca.2016.11.013>
- Pekala, R.W. *J Mater Sci.* **1989**, *24*, 3221–3227.
<https://doi.org/10.1007/BF01139044>
- Nagy, B.; Ábrahám, D.; Dobos, G.; Madarász, J.; Onyestyák, Gy.; Sáfrán, Gy.; Geissler, E.; László, K. *Carbon* **2014**, *66*, 210–218.
<https://doi.org/10.1016/j.carbon.2013.08.060>
- Seredych, M.; László, K.; Bandosz, T.J. *Chem Cat Chem* **2015**, *7* (Special Issue: SI) 2924–2931.
<https://doi.org/10.1002/cctc.201500192>
- Nagy, B.; Villar-Rodil, S.; Tascón, J.M.D.; Bakos, I.; László, K. *Micropor. Mesopor. Mater.* **2016**, *230*, 135–144.
<https://doi.org/10.1016/j.micromeso.2016.05.009>
- Bahn, E.; Czakkel, O.; Nagy, B.; László, K.; Villar-Rodil, S.; Tascón, J.M.D.; Demmel, F.; Telling, M.T.F.; Fouquet, P. *Carbon* **2016**, *98*, 572–581.
<https://doi.org/10.1016/j.carbon.2015.11.034>
- Tardy, G.M.; Lóránt, B.; Lóka, M.; Nagy, B.; László, K. *Biotechnol. Lett.* **2017**, *39*, 993–999.
<https://doi.org/10.1007/s10529-017-2338-x>
- Albert, E. *Mezopórusos szol-gél bevonatok: előállítás, jellemzés, alkalmazás*, PhD értekezés, Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, **2015**.
- Albert, E.; Hörvölgyi, Z. *Mezopórusos szol-gél bevonatok: előállítás, jellemzés (PhD összefoglaló), alkalmazás Magyar Kémiai Folyóirat* **2017**, *közlésre elfogadva*
- Albert, E.; Albouy, P. A.; Ayrál, A.; Basa, P.; Csík, G.; Nagy, N.; Roualdés, S.; Rouessac, V.; Sáfrán, Gy.; Suhajda, Á.; Zolnai, Zs.; Hörvölgyi, Z. *RSC Adv.* **2015**, *5*, 59070–59081. <https://doi.org/10.1039/C5RA05990A>
- Albert, E.; Cotolan, N.; Nagy, N.; Sáfrán, Gy.; Szabó, G.; Mureşan, L. M.; Hörvölgyi, Z. *Micropor. Mesopor. Mat.* **2015**, *206*, 102–113.
<https://doi.org/10.1016/j.micromeso.2014.12.021>
- Volentiru, E.; Nyári, M.; Szabó, G.; Hörvölgyi, Z.; Mureşan, L. M. *Period. Polytech. Chem.* **2014**, *58*, 61–66.
<https://doi.org/10.3311/PPCh.7302>
- Kócs, L.; Albert, E.; Tegze, B.; Kabai-Faix, M.; Major, Cs.; Szalai, A.; Basa, P.; Hörvölgyi, Z. *Period. Polytech. Chem.* **2017**, *közlésre elfogadva*
DOI: 10.3311/PPCh.10550 <https://doi.org/10.3311/PPCh.10550>
- Dabóczy, M.; Albert, E.; Agócs, E.; Kabai-Faix, M.; Hörvölgyi, Z. *Carbohydr. Polym.* **2016**, *136*, 137–145.
<https://doi.org/10.1016/j.carbpol.2015.09.025>
- Németh, C.; Szabó, D.; Gyarmati, B.; Gerasimov, A.; Varfolomeev, M.; Abdullin, T.; László, K.; Szilágyi A. *Eur. Polym. J.* **2017**, *93*, 805–814.
<https://doi.org/10.1016/j.eurpolymj.2017.02.024>
- Krisch, E.; Messenger, L.; Gyarmati, B.; Ravaine, V.; Szilágyi, A. *Macromol. Mater. Eng.* **2016**, *301*, 260–266.
<https://doi.org/10.1002/mame.201500119>
- Gyarmati, B.; Mészár, E.Z.; Kiss, L.; Deli, M.A.; László, K.; Szilágyi, A. *Acta Biomater.* **2015**, *22*, 32–38.
<https://doi.org/10.1016/j.actbio.2015.04.033>
- Gyarmati, B.; Vajna, B.; Némethy, Á.; László, K.; Szilágyi A. *Macromol. Biosci.* **2013**, *13*, 633–640.
<https://doi.org/10.1002/mabi.201200420>
- Pál, K.; Kállay, M.; Köhler, G.; Zhang, H.; Bitter, I., Kubinyi, M., Vidóczy, T., Grabner, G., *ChemPhysChem*, **2007**, *8*, 2627 – 2635.
<https://doi.org/10.1002/cphc.200700479>
- Grofcsik, A., Kubinyi, M., Jones, W. J., *Chem. Phys. Lett.*, **1996**, *250*, 261–265.
[https://doi.org/10.1016/0009-2614\(96\)00003-6](https://doi.org/10.1016/0009-2614(96)00003-6)
- Hessz, D., Hégyel, B., Kaëllay, M., Vidoőczy, T., Kubinyi, M., *J. Phys. Chem. A*, **2014**, *114*, 5238–5247.
<https://doi.org/10.1021/jp504496k>
- Kubinyi, M., Vidóczy, T., Varga, O., Nagy, K., Bitter, I., *Appl. Spectrosc.*, **2005**, *59*, 134–138.
<https://doi.org/10.1366/0003702052940477>
- Varga, O., Kubinyi, M., Vidóczy, T., Baranyai, P., Bitter, I., Kállay, M., *J. Photochem. Photobiol. A*, **2009**, *207*, 167–172. <https://doi.org/10.1016/j.jphotochem.2009.07.001>
- Bojtár, M., Szakács, Z., Hessz, D., Kubinyi, M., Bitter, I., *RSC Adv.*, **2015**, *5*, 26504–26508.
<https://doi.org/10.1039/C4RA14809F>
- Bojtár, M., Paudics, A., Hessz, D., Kubinyi, M., Bitter, I., *RSC Adv.* **2016**, *6*, 86269–86275.
<https://doi.org/10.1039/C6RA15003A>
- Bojtár, M., Kozma, J., Szakács, Z., Hessz, D., Kubinyi, M., Bitter, I., *Sens. Actuat. B*, **2017**, *248*, 305–310.
<https://doi.org/10.1016/j.snb.2017.03.163>
- Kubinyi, M., Pál, K., Baranyai, P., Grofcsik, A., Bitter, I., Grün, A., *Chirality*, **2004**, *16*, 174–179.
<https://doi.org/10.1002/chir.20003>
- Costero, A. M., Colera, M., Gavia, G., Gil, S., Kubinyi, M., Pál, K., Kállay, M., *Tetrahedron*, **2008**, *64*, 3217–3224.
<https://doi.org/10.1016/j.tet.2008.01.085>
- Rapi, Z., Bakó, P., Keglevich, G., Baranyai, P., Kubinyi, M., Varga, O., *J. Incl. Phenom. Macrocycl. Chem.*, **2014**, *80*, 253–261. <https://doi.org/10.1007/s10847-014-0384-8>
- Sudár, A., Renner, K., Móczó, J., Lummerstorfer, T., Burgstaller, C., Jerabek, M., Gahleitner, M., Doshev, P., Pukánszky, B. *Compos. Struct.*, **2017**, *141*, 146–154.
<https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2016.01.031>
- Sudár, A., Burgstaller, C., Renner, K., Móczó, J., Pukánszky, B. *Compos. Sci. Technol.*, **2014**, *103*, 106–112.
<https://doi.org/10.1016/j.compscitech.2014.08.018>
- Hári, J., Gyürki, Á., Sárközi, M., Földes, E., Pukánszky, B. *J. Colloid Interface Sci.*, **2016**, *462*, 123–129.
<https://doi.org/10.1016/j.jcis.2015.09.054>
- Hári, J., Polyák, P., Mester, D., Mičušík, M., Omastová, M., Kállay, M., Pukánszky, B. *Appl. Clay Sci.*, **2016**, *132*, 167–174. <https://doi.org/10.1016/j.clay.2016.06.001>
- Horváth, F., Gombár, T., Varga, J., Menyhárd, A. *J. Therm. Anal. Calorim.*, **2017**, *128*, 925–935.
<https://doi.org/10.1007/s10973-016-6057-7>
- Horváth, Z., Menyhárd, A., Doshev, P., Gahleitner, M., Friel, D., Varga, J., Pukánszky, B. *J. Appl. Polym. Sci.*, **2016**, *133*, 43823. <https://doi.org/10.1002/app.43823>
- Menyhárd, A., Suba, P., László, Z., Fekete, H. M., Mester, Á. O., Horváth, Z., Vörös, G., Varga, J., Móczó, J. *Express Polym. Lett.*, **2015**, *9*, 308–320.
<https://doi.org/10.3144/expresspolymlett.2015.28>

41. Müller, P., Renner, K., Móczó, J., Fekete, E., Pukánszky, B. *Carbohydr. Polym.*, **2014**, *102*, 821-829.
<https://doi.org/10.1016/j.carbpol.2013.10.083>
42. Csiszár, E., Kalic, P., Köböl, Á., Ferreira, E. D. *Ultrason. Sonochem.*, **2016**, *31*, 473-480.
<https://doi.org/10.1016/j.ultrsonch.2016.01.028>
43. Nagy, O.; Kirschweng, B.; Imre, B.; Pukánszky, B. *Műanyag és Gumiipari Évkönyv*, **2016**, *14*, 46-53.
44. Kirschweng, B.; Polyák, P.; Pukánszky, B.; Vörös, G. *Polimerek*, **2015**, *1*, 136-140.

Research activity at the Department of Physical Chemistry and Materials Science

The R&I activity of the Surface Chemistry Group has been focusing on interactions with high surface area solid materials, spanning from the various forms of crystalline nanocarbons (nanotubes, graphene and their derivatives) to the new generation of porous materials like carbon aerogels or metal-organic frameworks (MOFs). The tunability of the morphology as well as the surface chemistry of these materials, important factors in their practical performance, are studied in the group. Tailor-made novel materials and their composites have been synthesized, characterized and tested for biomedical, gas and energy storage applications.

In the Colloid Chemistry Group different types of sol-gel and biopolymer thin coatings with various functional properties were deposited by dip-coating onto solid substrates. Semiconductor (TiO₂, ZnO) coatings with antibacterial and photoactive properties, mesoporous SiO₂ coatings with improved light transmittance and anticorrosive properties, biopolymer and biopolymer mesoporous SiO₂ sol-gel composite coatings for modelling controlled drug release systems were developed and characterized thoroughly.

The research activity of Soft Matters Group focuses on the synthesis, characterization and application of responsive polymers and hydrogels. These smart materials are prepared in various forms such as water-swelling gels, *in situ* gellable, bioadhesive polymer solutions or polymer films and they are designed for pharmaceutical applications, primarily in controlled and targeted drug delivery. Recently, our research work has been extended with such cutting-edge technologies as electrospinning and 3D printing to develop responsive materials with tailor-made morphology.

The target of our research in the Spectroscopy Group is to develop novel molecular sensors, applicable in fluorescence imaging techniques. In a co-operation with the synthetic chemists of our university, novel fluorescent chemosensors have been developed for the detection of amino acids, biogen amines and nucleotides. The sensing mechanisms of the fluorescent probes have been explored on the basis of time-resolved optical spectroscopic experiments and theoretical calculations.

The Laboratory of Plastics and Rubber Technology (LPRT, former an individual department) as a part of the Department Physical Chemistry and Materials Science was established in 1953. Its primary goal is to educate professionals, who are experienced in the synthesis and processing of polymeric materials and these goals are constant even nowadays. LPRT forms a professional research group together with the Polymer Physics Group at the Research Centre for Natural Sciences at Hungarian Academy of Sciences. Intensive research has been carrying out on the field of multicomponent polymer systems in the past three decades. Most of these studies are dealing with the interfacial interactions as well as the mechanism of the failure of composite materials. A special technique called acoustic emission is used for identification of failure mechanism in order to find possible ways to improve strength and impact resistance mainly. The study of crystalline polymer has large tradition at our Laboratory as well. Recently the development of quantitative correlation between the crystalline structure and the mechanical or optical properties is in the focus of these works. Our goal is to build empirical or semi-empirical models to describe the dependency of tensile modulus or haze on the key parameters of crystalline structure. After the careful validation of these models they are used to predict desired properties in order to define possible directions during industrial development projects. Although, these researches are focused mainly on commodity polymers the results obtained from them could be applied on other areas as well. An intensive research is focused on the preparation of scaffold materials as possible templates for ectogenesis, which is a hot topic in the medial application of polymeric materials. Beside medical application the bio based polymers are also important candidates for biocompatible and biodegradable materials. These topics are also a highlighted areas at our Laboratory. The kinetics and detailed characteristics of microbial synthesis and biodegradation process (even *In Vivo*) of poly-3-hydroxybutyrate is studied thoroughly for example in this field.