

Pályázat

Tudományos Díj elnyerésére

Pályázó neve: Csörgeiné Kurin Krisztina

Pályázat címe: pH-vezérelt kémiai oszcillátorok

Az *Accounts of Chemical Research* folyóiratban „pH-Regulated Chemical Oscillators” címmel 2015-ben megjelent összefoglaló cikkünk¹ által képviselt tudományos teljesítmény alapján pályázom a Kémiai Intézet Tanácsa által alapított Tudományos Díj elnyerésére.

Az *Accounts of Chemical Research* a kémiai kutatások eredményeit közlő egyik legtekintélyesebb folyóirat (i.f. 2015-ben: 22,34). Kézirat benyújtása a folyóiratban való közlésre csak sikeres pályázat, vagy ajánlás alapján, a főszerkesztő meghívására lehetséges. A tipikus *Accounts* közlemény a szerzőinek kutatási területéről ad tömör (6000 szó terjedelmű) összefoglaló elemzést, amely elsősorban a szerzők már publikált saját eredményeire épül, de utal más kutatók jelentősebb munkáira is, bemutatva a témával kapcsolatos jelenlegi ismereteinket és jövőbeni perspektívákat. Az *Accounts*-ban való közlés egyik feltétele az is, hogy a cikk a téma specialistáin kívül a más tudományterületen dolgozó, a tudományos újdonságok iránt érdeklődő kutatók számára is követhető szinten és stílusban íródjon².

A jelen pályázat alapját képező közlemény a kutatócsoport által korábban felfedezett pH-oszcillátorokról ad átfogó, az *Accounts* cikkek színvonalával szemben elvárt követelményeket teljesítő leírást.

A továbbiakban röviden vázolom a pH-oszcillátorokkal kapcsolatos főbb saját kutatási eredményeket, amelyek alapján indíttatást és jogosultságot éreztünk a tématerület mai állását összefoglaló közlemény megírására.

Kutatócsoportunk (Nemlineáris Kémiai Dinamika Laboratórium; NKDL) kutatási témája az időben és térben megvalósuló koncentráció eloszlás (oszcilláló kémiai reakciók és a kémiai mintázatképződés) laboratóriumi előállítás, mechanisztikus tanulmányozása és modellezése. Más periodikus kémiai rendszerek létrehozása mellett a pH-oszcillátorok fogalmának bevezetése, prototípusának és számos tagjának előállítás – kooperációban I.R. Epstein professzorral – a NKDL (és jogelődje) munkájának terméke. Jelenleg 25 variánsuk ismert, amelyek összetételüket tekintve a kémiai oszcillátorok legváltozatosabb csoportját képezik és mechanisztikus működésük is a legjobban tisztázott.

¹ M. Orbán, K. Kurin-Csörgei, I.R. Epstein: pH-Regulated Chemical Oscillators, *Acc. Chem. Res.*, 2015, **48** (3), pp 593-601; DOI: 10.1021/ar5004237.

² ACS Publications, *Accounts: Scope and Editorial Policy*, 2016, pp 1-13.

Az *Accounts* cikkben kb. 20 NKDL közreműködésével írt és 30 más eredetű, a pH-oszcillátorokkal kapcsolatos közleményt dolgoztunk fel. Ezek alapján a 25 rendszert 3 kategóriába soroltuk (egyszubsztrátos, két-szubsztrátos és speciális pH-oszcillátorok), rámutattunk a csoportokon belüli közös vonásokra, megszerkesztettük az oszcillációs viselkedést eredményező általános váz-sémákat, példaként közérthetően bemutattuk a 3 csoport 1-1 oszcillátorának kémiai hátterét és részletesen tárgyaltuk a pH-oszcillátorokat felhasználó eddigi alkalmazásokat. Valamennyi alkalmazás alapja az, hogy a pH-oszcillátorral, mint ritmusadóval, pH-érzékeny fizikai, kémiai, vagy biológiai egyensúlyok vezérelhetők, azokban periodikus változások indukálhatók. Az alkalmazással kapcsolatos saját eredményünk, hogy a pH-oszcillátorokat pH-függő komplexképződési és csapadékos reakciókkal kapcsoltuk össze és egy általános módszert javasoltunk a nem-vegyértékváltó ionok (pl. Ca^{2+} , Al^{3+} , Cd^{2+} , F^- , $(\text{COO})_2^{2-}$...) koncentráció oszcillációjának generálására, amely a korábbi redoxi kémián alapuló oszcillációs mechanizmusokkal nem volt megvalósítható. Feltételezhető, hogy az oldatfázisban csak egy stabil oxidációs számmal bíró ionoknak az élő szervezetekben tapasztalt koncentráció oszcillációja a javasolt módszer szerint, hasonló mechanizmus alapján játszódik le.³ További eredményünk, hogy néhány CSTR pH-oszcillátorunkat zárt rendszerben is több óráig működő változattá alakítottuk, jelentősen növelve gyakorlati alkalmazásuk esélyeit.⁴ A saját eredményeken kívül az *Accounts* cikk a pH-oszcillátorokkal kapcsolatos tudományos és technikai célú egyéb alkalmazásokat is tárgyalja, nevezetesen: pH-oszcillátorokba helyezett pH-érzékeny hidrogének térfogatának periodikus változása következik be, amely alapján megfelelő berendezésben a kémiai energia mechanikai munkává alakítható; a pH-oszcillátorok kiváló jelölteknek bizonyultak kémiai mintázatok (Turing struktúrák) előállításához; kísérletek folynak pH-oszcilláción alapuló periodikus gyógyszeradagoló szerkezet előállítására; pH-oszcillátorban a DNS molekula konformációjának periodikus változását mutatták ki.

Megítélésem szerint az *Accounts* cikk megírásába befektetett munka tudományos értéket képvisel és alapul szolgálhat a Kémiai Intézet Tanácsa által alapított Tudományos Díj elnyerését célzó pályázathoz. A közlésre benyújtott kéziratunk minőségének és tartalmának pozitív értékelését jelzi a rangos folyóirat feltehetően tekintélyes opponenseinek elismerő véleménye. Bírálataiban a „Reviewer 2” a következőképpen nyilatkozott:

„This is a well-written account and review on the almost 25 years history of pH-regulated chemical oscillators. The authors were/are in the forefront of this special area of nonlinear chemistry. The readers should be thankful for the authors that they have taken their time to compile this excellent summary and providing - at the same time - some hints about the future direction of the subject.”

A közlemény pozitív fogadtatását jelzi, hogy megjelenése óta már 15 hivatkozást kapott.

³ K. Kurin-Csörgei, I.R. Epstein, M. Orbán: Systematic Design of Chemical Oscillators Using Complexation and Precipitation Equilibria, *Nature*, 2005, **433**, pp 139-143.

⁴ E. Poros, K. Kurin-Csörgei, I.R. Epstein, M. Orbán: Generation of pH-oscillations in Closed Chemical Systems: Methods and Applications, *J. Am. Chem. Soc.*, 2011, **133**, pp 7174-7179.