



# Válogatás

Az MTA Kémiai Tudományok Osztálya által kiválasztott három publikáció közül az elsőben a szerzők egy fontos vegyipari alapanyag, a furfural-alkohol katalitikus előállítását mutatják be a molekuláris szintű reakciótervezéstől a koncepcionális folyamatvezetésig. A második közlemény szerzői először írták le C-típusú lektin (DC-SIGN fehérje) kovalens módosításait elektrofil fragmensekkel. A harmadik publikáció szerzői az LNO-CCSD(T) módszer segítségével (MRCC programcsomag) győgszermolekula-fehérje kötődési modellekre végeztek nagy pontosságú vizsgálatokat.

Perczel András

az MTA Kémiai Tudományok Osztályának elnöke

A molekuláris szinttől a folyamatvezetésig:  
A furfural segédoldószer-mentes autokatalitikus hidrogénezése furfural-alkohollá

*Chemical Engineering Journal*, 2025

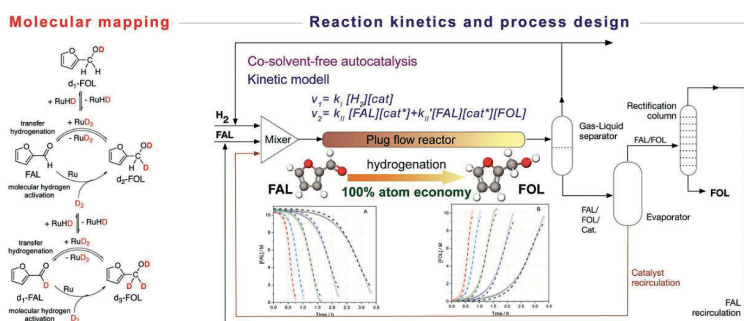
<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S135894725023721>

Csaba Árvai,<sup>1</sup> Attila K. Horváth,<sup>2</sup> Kinka Komka,<sup>1</sup> László T. Mika<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Department of Chemical and Environmental Process Engineering, Faculty of Chemical Technology and Biotechnology, Budapest University of Technology and Economics, Hungary

<sup>2</sup>Department of General and Inorganic Chemistry, Institute of Chemistry, Faculty of Sciences, University of Pécs, Hungary

A különböző biomassza-eredetű platformmolekulák hatékony szintézise új technológiai lehetőséget biztosíthat a nem fosszilis eredetű alapvegyületek gazdaságos előállítására. Az egyik ilyen építőelem a furfural-alkohol, amelynek a furfuralból történő előállítása során először igazoltuk segédoldószer-mentes autokatalitikus reakció jelenlétét. A tanulmányban az izotópjelzéses mechanizmusvizsgálattól az átfogó kinetikai modellezésen keresztül a koncepcionális folyamatvezetésig mutatjuk be a 100% atomhatékonysággal végbemenő hidrogénezési reakciót.



A DC-SIGN lektin aktiválása kovalens fragmensekkel  
*Angewandte Chemie International Edition*, 2025

<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/anie.202520594>

Jonathan Lefèvre<sup>1,2,3</sup>, Maurice Besch<sup>1,2,3</sup>, Noémi Csorba<sup>4,5,6</sup>,  
Kristóf Garami<sup>4,5,6</sup>, Zoltán Orgován<sup>4,6</sup>, Gitta Schlosser<sup>7</sup>,  
Iris Bermejo<sup>1,2</sup>, Péter Ábrányi-Balogh<sup>4,5,6</sup>, György M. Keserü<sup>4,5,6</sup>,  
Christoph Rademacher<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Department of Pharmaceutical Sciences, University of Vienna, Austria

<sup>2</sup>Department of Microbiology, Immunology and Genetics, Max F Perutz Labs, Vienna, Austria

<sup>3</sup>Vienna Doctoral School of Pharmaceutical, Nutritional and Sport Sciences, University of Vienna, Austria

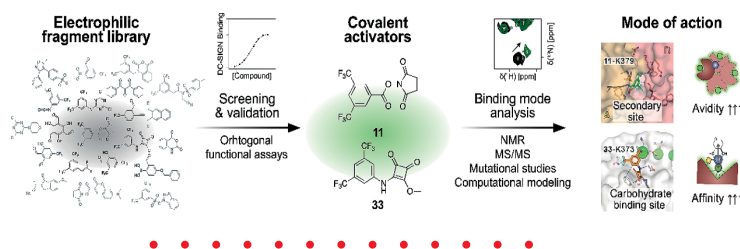
<sup>4</sup>Medicinal Chemistry Research Group, Research Centre for Natural Sciences, Budapest, Hungary

<sup>5</sup>Department of Organic Chemistry and Technology, Faculty of Chemical Technology and Biotechnology, Budapest University of Technology and Economics, Hungary

<sup>6</sup>National Laboratory for Drug Research and Development, Budapest, Hungary

<sup>7</sup>MTA-ELTE Lendület Ion Mobility Mass Spectrometry Research Group, Institute of Chemistry, Eötvös Loránd University, Budapest, Hungary

A DC-SIGN fehérje kulcsfontosságú receptor, amely szerepet játszik a kórokozók felismerésében és az immunválasz szabályozásában. A DC-SIGN szénhidrátkötő helyének sajátosságai miatt kihívást jelent a megfelelő ligandumok tervezése, ezért a szerzők egy új stratégiát vizsgáltak: lizinek specifikus kovalens módosítását végezték el elektrofil fragmensekkel. Két aktivátort azonosítottak, amelyek eltérő mechanizmusokon keresztül fejtik ki hatásukat; ezeket NMR-spektroszkópia, tömegspektrometria és számítógépes modellezés segítségével tárták fel.



Biológiai fehérje-ligandum kölcsönhatás-modellek nagy pontosságú kvantumkémiai szimulációja

*Nature Communications*, 2025

<https://www.nature.com/articles/s41467-025-63587-9>

Mirela Puleva<sup>1,2</sup>, Leonardo Medrano Sandonas<sup>1,3</sup>,  
Balázs D. Lőrincz<sup>4,5,6</sup>, Jorge Charry<sup>1,7</sup>, David M. Rogers<sup>8</sup>,  
Péter R. Nagy<sup>4,5,6</sup>, Alexandre Tkatchenko<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Department of Physics and Materials Science, University of Luxembourg, Luxembourg

<sup>2</sup>Institute for Advanced Studies, University of Luxembourg, Luxembourg

<sup>3</sup>Institute for Materials Science and Max Bergmann Center of Biomaterials, TUD Dresden, University of Technology, Dresden, Germany



<sup>4</sup> Department of Physical Chemistry and Materials Science, Faculty of Chemical Technology and Biotechnology, Budapest University of Technology and Economics, Hungary

<sup>5</sup> HUN-REN-BME Quantum Chemistry Research Group, Budapest, Hungary

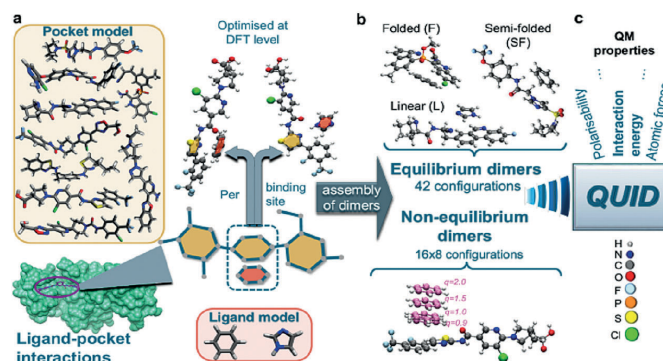
<sup>6</sup> MTA-BME Lendület Quantum Chemistry Research Group, Budapest, Hungary

<sup>7</sup> Luxembourg Researchers Hub asbl, Esch-sur-Alzette, Luxembourg

<sup>8</sup> National Center for Computational Sciences, Oak Ridge National Laboratory, USA

A szerzők nagy pontosságú vizsgálatokat végeztek gyógyszer-molekula–fehérje kötődési modellekre az MRCC programcsomagban fejlesztett LNO-CCSD(T) módszer segítségével. Az eredmények kiválóan egyeznek egy másik, jelentősen számításgényesebb referencia-módszerrel, ami ekkora molekulaméretben a

kvantumkémiaiában eddig példa nélküli. A bemutatott munka különösen nagy értékét az adja, hogy a 2. modell független és más elven alapszik, de mindkettő egyezik (nagyon szűk hibabelesekkel), ami eddig elérhetetlen minőségi bizonyosságot ad. ●●●



## Felmérés a magyar kutatók helyzetéről

Tavaly év végén mutatták be az Akadémián *A magyarországi és az országhoz kötődő kutatók helyzete* című, 2025 nyarán készült felmérés eredményeit.

Néhány fontos megállapítás:

- A 40 év alatti kutatóknak csak 21%-a gondolja azt, hogy a kutatói életpályamodell kiszámítható.
- A válaszadók kétharmada (66%) szerint a hazai pályázati rendszer nem kiszámítható.
- A kutatók nagyobb része (57%) nem érzi magát társadalmilag megbecsültnek.
- A tudományos pálya elhagyásának gondolata a kutatók felében már felmerült, a 40 év alattiaknak pedig közel kétharmadában.
- A női kutatók csaknem fele (48%) számolt be hátrányos megkülönböztetésről.
- A kutatók pszichés jólléte jelentősen alacsonyabb, mint a teljes hazai népességé.
- A kutatók többsége jó munkahelyi légkorról számolt be, megfelelő önállósággal és alapvetően korrekt szakmai bírálattal.
- Az egyetemi tanári kinevezés feltételeként előírt MTA doktora cím megítélése erősen megosztja a kutatói közösséget.

Érdekes megállapításokhoz vezetett, többek között, a kutatók mentális egészségének felmérése. Ennek alapján „a kutatók jólléte közepes, a kiegészítő szintje pedig változó, de nem elhanyagolható. A legfeljebb 30 éves korosztály érte el a pszichés jólléte mérő legalacsonyabb átlagos összpontszámot, amely a WHO által javasolt 50 százalékos határérték alatt marad, így rossz pszichés jólétre utal. A magyarországi és a Magyarországhoz kötődő kutatók pszichés jólléte jelentősen alacsonyabb szintű, mint a teljes népességé. A kutatók a kiegészítő kiábrándultság-alskáláján nem érik el a kiegészítő határértékét, a kimerülés-alskálán viszont igen. A nők körében magasabb a kiegészítő szintje, mint a férfiak között. A magas munkaterhelés, az oktatási feladatok súlya és a munkahelyi elvárások erősen összefüggenek a kiegészítő magasabb szintjével. A külföldi intézményekben dolgozók jobb mentális állapotról



és alacsonyabb szintű kiegészítő számoltak be, mint a magyarországi intézmények munkatársai.

A válaszadók több mint felénél (53%) merült már fel a tudományos pálya elhagyása, ami a fiatalabbaknál sokkal gyakoribb: a legmagasabb arány a 31–35 évesek körében figyelhető meg, ahol valamivel több mint 70 százalék jelezte, hogy eddigi pályafutása során már gondolt a tudományos pálya elhagyására. A magyarországi kutatóintézetek munkatársai között az egyetemen dolgozókhöz képest (56,1%) magasabb arányban (62,6%) vannak azok, akik gondoltak már a pálya elhagyására. [...]

A teljes minta 52,8 százaléka rendelkezik valamilyen külföldi szakmai tapasztalattal. A legtöbb kutató egy évnél rövidebb időt töltött külföldön szakmai tevékenységgel. A férfiaknál hosszabb külföldi tartózkodás jellemző, mint a nőknél. Az MTA tudományos osztályai között a matematikusok, a fizikusok és a biológusok körében vannak a legtöbben, akik 3 évnél hosszabb időt töltöttek külföldön. A jelenleg Magyarországon élők 38 százalékában az utóbbi 3 évben felmerült, hogy munkahelyet váltsanak, és külföldön keressenek állást, 24 százalékuk pedig párhuzamos külföldi affiliáció felvételén (is) gondolkodott. A motivációk között leggyakrabban a magasabb anyagi juttatásokat, a jobb munkafeltételeket és a kutatók nagyobb megbecsülését említették. A külföldi munkavállaláson vagy újabb affiliáció felvételén gondolkodók 40 százaléka már tett konkrét lépéseket a munkahely-változtatással vagy további affiliáció felvételével kapcsolatban. Azok közül, akiknek jelenleg nincs affiliációjuk külföldi tudományos intézménnyel, 27 százalék kapott már legalább egy konkrét állásajánlatot Magyarországon kívüli egyetemről vagy kutatóintézetről, de a csoportnak csak 24,8 százaléka fogadott el ezek közül legalább egyet.”

A kutatás főbb eredményei itt olvashatók:

[https://mta.hu/data/dokumentumok/egyeb\\_dokumentumok/2025/kutatok\\_helyzete\\_osszefoglalo\\_2025\\_11.pdf](https://mta.hu/data/dokumentumok/egyeb_dokumentumok/2025/kutatok_helyzete_osszefoglalo_2025_11.pdf)