

A TARTALOMBÓL:

- Évfordulónaptár
- Vegyészletek
- Gyógyszeréberség
- Egyesületi élet,
A hónap hírei



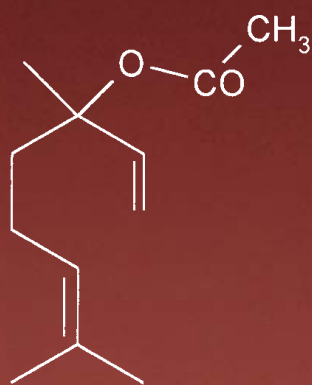
MAGYAR KÉMIKUSOK LAPJA

A MAGYAR KÉMIKUSOK EGYESÜLETE HAVONTA MEGJELENŐ FOLYÓIRATA • LXIV. ÉVFOLYAM • 2009. JANUÁR • ÁRA: 700 FT

ILLATANYAGOK

MOLEKULÁK
TÉRZEN
ÉS IDŐZEN

SZÉNNANOCSEVEK



linalil-acetát





A Magyar Kémikusok Egyesületének
– a MTEZSZ tagjának –
tudományos ismeretterjesztő
folyóirata és hivatalos lapja

Szerkesztőség:

KISS TAMÁS felelős szerkesztő
SILBERER VERA műszaki szerkesztő
HORVÁTH IMRE tervezőszerkesztő
ANDROSITS BEÁTA szerkesztő
CHLADEK ISTVÁN szerkesztő
GÁL MIKLÓS szerkesztő
JANÁKY CSABA szerkesztő
KOVÁCS LAJOS szerkesztő
LENTE GÁBOR szerkesztő
ZÉKÁNY ANDRÁS szerkesztő
SÜLI ERIKA szerkesztőségi titkár

Szerkesztőbizottság:

SZÉPVÖLGYI JÁNOS,
a szerkesztőbizottság elnöke,
SZEKERES GÁBOR örökös főszerkesztő,
ANTUS SÁNDOR, BECK MIHÁLY,
BIACS PÉTER, BUZÁS ILONA,
GÁL MIKLÓS, HANCSÓK JENŐ,
HERMECZ ISTVÁN, JANÁKY CSABA,
JUHÁSZ JENŐNÉ, KALÁSZ HUBA,
KEGLEVICH GYÖRGY, KOVÁCS ATTILA,
KÖRTVÉLYESI ZSOLT,
KÖRTVÉLYESSY GYULA,
LIPTAY GYÖRGY, MIZSEY PÉTER,
MÜLLER TIBOR, NEMES ANDRÁS,
RÁCZ LÁSZLÓ, SZABÓ ILONA,
SZEKENYI IMRE, TÖMPE PÉTER,
ZÉKÁNY ANDRÁS

Kapják az egyesület tagjai és a megrendelők.

A szerkesztésért felel: KISS TAMÁS.

Szerkesztőség: 1027 Budapest Fő u. 68.

Tel.: 225-8777, 201-6883, fax: 201-8056.

E-mail: mkl@mke.org.hu.

Kiadja a Magyar Kémikusok Egyesülete.

Felelős kiadó: ANDROSITS BEÁTA.

Nyomdai előkészítés: Planta-2000 Bt.

Nyomás és kötés: Mester Nyomda

Felelős vezető: ANDERLE LAMBERT

Tel./fax: 455 5050

Terjeszti a Magyar Kémikusok Egyesülete.

Az előfizetési díjak befizethetők a CIB Bank

10700024-24764207-51100005 sz.

számlájára „MKL” megjelöléssel.

Előfizetési díj egy évre 8400 Ft.

Egy szám ára: 700 Ft. Külföldön terjeszti

a Batthyány Kultur-Press Kft.,

H-1014 Budapest, Szentháromság tér 6.

1251 Budapest, Postafiók 30.

Tel./fax: 36-1-201-8891, tel.: 36-1-212-5303.

Hirdetések-Anzeigen-Advertisements:

SÜLI ERIKA

Magyar Kémikusok Egyesülete,

1027 Budapest, Fő u. 68. Tel.: 201-6883,

fax: 201-8056, e-mail: mkl@mke.org.hu.

Aktuális számaink tartalma, az összefoglalók

és egyesületi híreink honlapunkon

(www.mkl.mke.org.hu) olvashatók.

Index: 25 541

HU ISSN 0025-0163 (nyomtatott)

HU ISSN 1588-1199 (online)



Az elmúlt év második felében folyamatosan értesülhetek arról, hogy az MKL körül bábáskodó személyek – a Magyar Kémikusok Egyesülete vezetésének aktív támogatásával – az addigi eredmények hangsúlyos megőrzése mellett kezdeményezték és elindították a lap tartalmi és formai átalakítását. A kezdeményezés fő célja annak elősegítése volt, hogy az MKL minél tartalmasabban és színvonalasabban elégítse ki olvasóinak vele szemben támasztott korábbi és újabb igényeit. További célként jelöltük meg, hogy – az MKE hivatalos kiadványaként – az MKL az egyesület PR-tevékenységének egyik alapvető eleme, az egyesület vezetése és tagsága, valamint az egyesület, a társadalom és a gazdasági szereplők közötti kommunikáció kiemelt jelentőségű fóruma legyen. Utóbbi minőségében a lap már most is szorososan, a feladatokat megosztva működik együtt az elmúlt évben szintén átalakult egyesületi honlappal.

Az MKL megújítása-megújulása során tartalmi és formai változásokat egyaránt terveztünk és tervezünk. Olyan tartalmilag igényes és korszerű tipográfiájú folyóiratot szeretnénk Önöknek hónapról hónapra átnyújtani, amely a szakmai ismeretterjesztésen – mint fő feladaton – túlmenően, jó értelemben vett magazinfeladatokat is ellát. Szándékunk szerint a lap olvasmányosan és széleskörűen ad információkat a kémia, a vegyipar és a kapcsolódó szakterületek legújabb eredményeiről és eseményeiről, a várható fejlődési irányokról, a szakmai utánpótlás helyzetéről, az iparágban dolgozó szakembereket leginkább érintő és érdeklő kérdésekről – és a felsorolást még hosszan folytathatnánk.

Egyes tartalmi változásokkal már a 2008-as évfolyam utolsó néhány számában is találkozhattak. Ezekkel kapcsolatban több támogató visszajelzést kaptunk, de szembesültünk kritikai megjegyzésekkel is. További, kisebb tartalmi változásokat a jövőben is tervezünk. Kérjük olvasóinkat, hogy tanácsaikkal, bírálataikkal, javaslataikkal segítsenek bennünket a lappal kapcsolatos céljaink elérésében.

Az a lapszám, amelyet Önök most kézben tartanak, fontos mérföldkő az MKL történetében: megváltozott a lap megjelenése és tipográfiája. Az MKL mostantól teljes terjedelmében színes nyomtatásban jelenik meg. A szerkesztőség, amint az impresszumban látható, két új taggal bővült: Silberer Vera műszaki és olvasószervezőként, Horváth Imre tervezőszerkesztőként működik közre a lap elkészítésében. A megváltozott külső megjelenés döntően az ő munkájuk eredménye.

Az MKL szerkesztősége és szerkesztőbizottsága nevében örömmel nyújtom át kedves olvasóinknak a megújult lap első példányát. Forgassák érdeklődéssel.

Végezetül engedjék meg, hogy kedves mindannyiuknak szakmai téren sikeres, magánéletükben békés és boldog újesztendőket kívánjak.

2009. január

a szerkesztőbizottság elnöke

TARTALOM

VEGYIPAR ÉS KÉMIATUDOMÁNY

Hernádi Klára–Németh Zoltán: A szénnanocsovekről dióhéjban 2

Chladek István: Gyógyszeréberség 5

Fráter György: Az illatszermémia újabb eredményei 6

Beszámoló az MTA Kémiai Osztályának Tudományos üléséről:

Molekulák térben és időben 11

ÉVFORDULÓNAPTÁR, 2009

Próder István: Magyar vonatkozású kémia- és vegyipartörténeti évfordulók 18

VEGYÉSZLELETEK

Lente Gábor rovata 24

EGYESÜLETI ÉLET

A HÓNAP HÍREI 30

Tájékoztató szerzőink és munkatársaink részére 32

A Magyar Kémikusok Lapjának médiaajánlata 33



Címlap:

Vízi Béla:

Levendulaillat

(21 cm/27 cm,

bronz,

verde serrano)

Hernádi Klára–Németh Zoltán

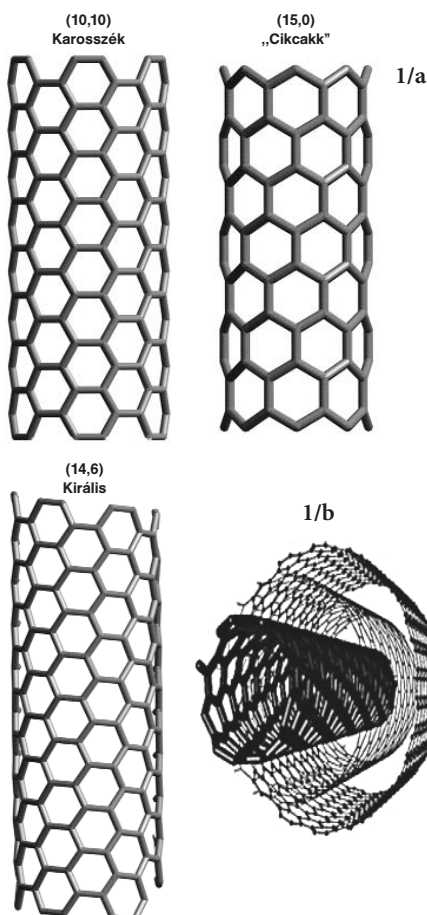
■ Szegedi Tudományegyetem, Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék

A szénnanocsövekről dióhéjban

A szénnanocsövek felfedezése

A fullerének 1985-ös felfedezése új szemléletet hozott a természettudományban, hiszen a szén sokoldalúan használt két allotróp módosulata, a gyémánt és a grafit mellett egy harmadik, gyakorlati perspektívát ígérő módosulat megjelenését jelentette. Ezáltal a szén allotróp módosulatai közül már csak az sp^2 -es szénatomokat tartalmazó egydimenziós struktúrára hiányzott, melynek létezését elméletben már megjósolták. Ezt követően a nagyon kis átmérőjű szén-szálak tanulmá-

1. ábra. Különböző egyfalú szénnanocsövek (a) és egy többfalú szénnanocső (b) modellje



nyozásának időszakában, 1991-ben Iijima a Krätschmer-féle fullerénreaktor [1] elektródját transzmissziós elektronmikroszkóppal (TEM) tanulmányozva kísérleti bizonyítékot talált a többfalú szénnanocsövek (MWNT) létezésére [2]. Alig két évvel később, 1993-ban Bethune [3] és Iijima [4] munkatársaikkal egy időben találtak rá a fullerénekből közvetlenül származtatható egyfalú szénnanocsövekre (single-walled carbon nanotubes – **SWNT**). A szénnanocsöveket hat szénatomot tartalmazó gyűrűk hálózata építi fel. Az egyfalú szénnanocsövek egy hengerré tekert grafitos síkból és a végeket lezáró félfullerénekből állnak. A csővégek a görbület miatt tartalmaznak 6–6 darab öt szénatomos gyűrűt. A grafitos sík feltekerésének módjától függően megkülönböztünk karosszék, cikcakk és királis szénnanocsöveket (**1/a ábra**) attól függően, hogy a helicitás szöge (α) (szemléletesen fogalmazva: a hengerpaláston belül az egymás mellett elhelyezkedő hatszögek „menetemelkedése”) rendre 30° , 0° , illetve $30^\circ > \alpha > 0^\circ$. A karosszék-szerkezetben a hatszögek két-két kötése merőleges a hossz tengelyre, a cikcakk-szerkezetben kettő-kettő párhuzamos a hossz tengelyvel.

Elméleti számítások igazolták, hogy az egyfalú szénnanocsövek fizikai sajátosságai alapvetően a csőátmérő és a helicitásértékek függvényei [5, 6]. Gyakran megfigyelhető jelenség, hogy az SWNT – keletkezése során – kötegbe rendeződik.

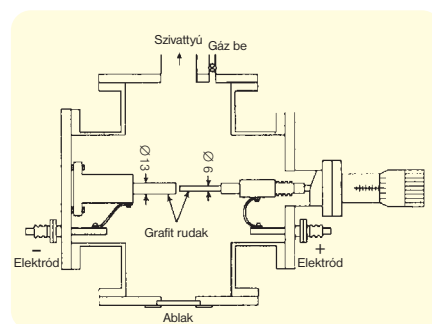
Az Iijima által 1991-ben felfedezett szénnanocsövek többfalúak voltak. Szerkezetüket feltekert grafitos síkból álló koncentrikus hengerpalástok jellemzik, ahogyan ezt az **1/b ábra** is illusztrálja.

A szénnanocsövek előállítása

Szénnanocsöveket rendkívül sokféle módszerrel elő lehet állítani. Némi túlzással állíthatjuk, hogy amennyiben megfelelő

energiát közlünk a rendszerrel (akár ívkisülés [7], akár lézeres elpárolgatás [8, 9], akár elektromos áram [10], akár láng [11, 12] formájában), tetszőleges szénforrásból (korom [13], grafit [14], fullerén (C_{60}) [15], CO [16], szénhidrogének [17], egyéb szerves vegyületek) szénnanocsöveket nyerhetünk. Itt azonban csak a történetileg fontos és nagyobb jelentőségű szintézismódszereket – az elektromos ívet, a lézeres elpárolgatást és a katalitikus előállítást – mutatjuk be.

Az elektromos ívvel működő berendezésben (**2. ábra**) az egymástól kb. 1 mm távolságra elhelyezkedő grafit-elektrodák között nem túl nagy feszültségű (20–25 V),



2. ábra. Szénnanocsövek szintézisére szolgáló ívkisüléses berendezés vázlatja [22]

de nagy erősségű áramot (50–120 A) bo-csátának keresztül általában 500 torr (66,7 kPa) nyomású héliumatmoszférában [2, 3]. Az ilyen körülmények között kialakuló, 3000 °C-nál magasabb hőmérsékletű plazma segíti elő az anódként szolgáló grafitrud elpárolgását. Stabil plazma esetében a katódon folyamatosan lerakódás alakul ki, melynek külső része szürkés, kemény héj, amely jellemzően szénnanorészecskékből, fullerénekből és amorf szénből áll [18, 19]. A lerakódás közepében mélyfekete, puha, szivacsos anyag található, amely az amorf szénen kívül grafitos nanorészecskéket, „nanohagymákat” és többfalú szénnanocsö-

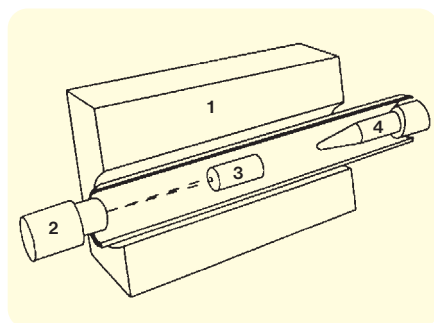


veket tartalmaz [20]. Az így keletkezett szénnanocsövek egyenesek, szerkezetük tökéletesen grafitos, külső és belső átmérőjük eloszlása heterogén, néhány tíz nanométer, hosszúságuk meghaladja az 1 mikrométert [21].

Amennyiben anódként üreges grafitrudat alkalmazunk, melyet megtöltünk grafitporral elkevert valamilyen átmenetifém (Fe, Co, Ni) és/vagy ritkaföldfém (ittrium, lutécium, gadolínium), esetleg más fémkatalizátorral (pl. Li, Sn, Pb stb.), az előbbi készülék alkalmas egyfalú szénnanocsövek, illetve nanocsökök szintézisére [23]. A keletkező csövek átmérője és kiralitása függ a kísérleti körülményektől, elsősorban a kialakuló ív hőmérsékletétől és az alkalmazott fémkatalizátor minőségétől, míg a csőátmérő általában 1,5 nanométer körüli érték [24]. Az eljárás során a katalizátor – akár fémként, akár karbidként – nehezen eltávolítható, többretegű grafitral bevont nanorészecskék formájában szennyezi az SWNT terméket [23].

Az 1985-ben felfedezett fullerének előállítását elsőként lézeres elpárologtatásos módszerrel végezték, és a módszert tíz évvel később alkalmazták szénnanocsövek előállítására is [25]. A szintézis a **3. ábrán** látható berendezésben végezhető. Egy 1200 °C-ra felfűtött kemencébe (1) helyeznek egy kvarccsövet, amelynek közepébe kerül a grafit céltárgy (3). A szintézist inert atmoszférában, állandó argonáramban végzik. Általában Nd-lézer (2) sugarával párologtatják el a grafitot, amely az adott körülmények között – nem teljesen tisztázott mechanizmussal – egy vizes hűtő (4) felületén szénnanocsövek formájában kicsapódik. Valószínűsíthető, hogy a szénnanocsövek kialakulásában mind az argonáramnak, mind a rendszerben kialakuló jelentős hőmérséklet-gradiensnek alapvető szerepe lehet [26].

3. ábra. Szénnanocsövek szintézisére szolgáló lézeres berendezés egyszerűsített sémája [27]



A keletkező szénnanocsövek minősége – akár csak az elektromos ívet alkalmazó módszerrel – attól függ, hogy az alkalmazott grafit céltárgy tartalmazott-e kiinduláskor valamilyen fémet, vagy tiszta volt-e. Az előbbi esetben a termék egyfalú, az utóbbi esetben többfalú szénnanocsöveket tartalmaz. A keletkező szénnanocsövek minősége mindkét típusnál kiváló, a kísérleti paraméterek optimalizálásával a hozam is jelentősen javítható [26].

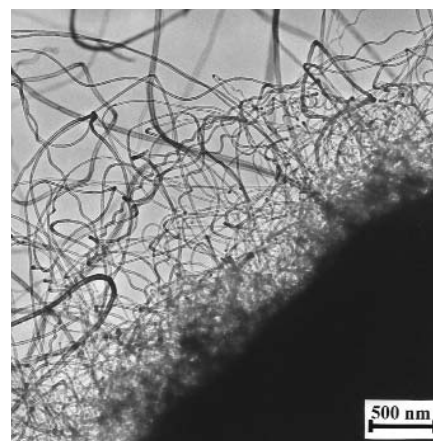
Az előbbi két módszer ugyan kiváló minőségű szénnanocsöveket szolgáltat, de sajnos nem alkalmas ipari méretekben történő előállításukra.

Régóta ismert, hogy széntartalmú vegyületek fémfelületeken történő katalitikus bontásával szénszálak jönnek létre. A módszer angol elnevezése alapján (CVD: Chemical Vapour Deposition) a széleskörűen alkalmazott technikát CVD-módszernek szokás nevezni.

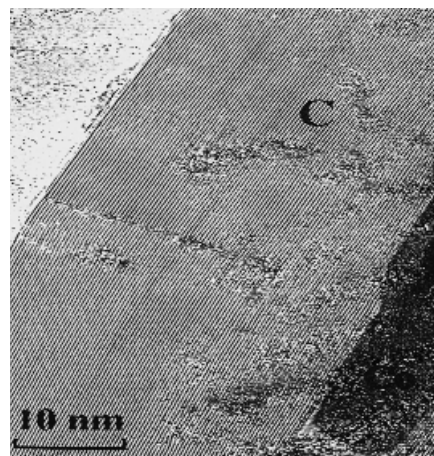
A 70-es évektől kezdődően, az elektronmikroszkópia fejlődésével párhuzamosan, egyre több információ látott napvilágot a szénszálak szerkezetéről, morfológiájáról és képződési mechanizmusáról. Ezek a kutatások Iijima 1991-es felfedezése után vettek új lendületet. Sokáig nem volt azonban bizonyíték arra, hogy a módszer – kis változtatással – alkalmas lehet nanocsövek előállítására is.

Az első sikeres CVD-alapú szénnanocsövelőállítási kísérleteket nagyon sok módosítás, új eljárás követte az elmúlt 15 évben [28, 29, 30].

Ezek lényege, hogy valamilyen hordozós fémkatalizátor jelenlétében nem túl magas hőmérsékleten (általában 700–900 °C) bontanak szénhidrogént, nagyon gyakran acetilént. Fontos, hogy a katalizátort nem szabad redukív előkezelésnek alávetni, mint ahogyan a korábbi évtizedekben tették. A CVD-technikával az előzőekben bemutatott módszerekhez képest alacsony hőmérsékleten lehet előállítani szénnanocsöveket (**4–5. ábra**). Ezek szerkezete azonban sajnos gyakran – feltehetően éppen az alacsonyabb hőmérséklet miatt – kevésbé tökéletes, sok „hibahelyet” tartalmaznak. Napjainkban is intenzív kutatás folyik annak érdekében, hogy olyan katalizátorokat fejlesszenek ki, amelyek jobb minőségű terméket szolgáltatnak. Erre azért is nagy szükség van, hogy ennek az előállítási módnak az alapján, például forgó csőkemencével, akár folyamatos üzemet építve, ipari méretekben valósítsuk meg a szénnanocsövek szintézisét [31]. Alkalmas, belső pórusokkal nem rendelkező katalizátorhor-



4. ábra. CVD-módszerrel előállított szénnanocsövek TEM-felvétele



5. ábra. Szárfalú szénnanocső

dozó esetén megvalósítható a szénnanocsövek folyamatos, szelektív növesztése forgó csőkemence alkalmazásával (**6. ábra**). A katalitikusan előállított többfalú szénnanocsövek makroszkopikus megjelenése sajátos, a szintük mélyfekete, látszólagos sűrűségük kicsi („könnyűek”), pelyhes anyagok, melyek szivacszerű tapintásúak, elektrosztatikusan könnyen töltődnek. Átmérőjük méreteloszlása nem mutat túl nagy szórást: az átlagos külső átmérő általában 15–25 nm, az átlagos belső átmérő pedig 5–10 nm között van. A falvastagság 10 nm körül ingadozik, ennek megfelelően a grafitos rétegek száma átlagosan 30, bár ettől mindkét irányban jelentős eltéréseket is tapasztalhatunk. A katalizátor és készítésének fontosságát hangsúlyozza, hogy a látszólag azonos előállítási eljárás ellenére változó minőségű szénlerakódás alakul ki. A szénnanocsövek szintéziséhez alkalmazott katalizátorok között külön csoportot képviselnek a kétfémes katalizátorok. Tulajdonságaik, például az aktivitásuk és a szénnanocsövek növesztésében mutatott szelektivi-



tásuk néha semmilyen kapcsolatban sincsenek az egyfémes minták sajátságai- val, azokból nem additív módon tevődnek össze. A katalizátorok ezen tulajdonságain – az aktivitáson és a szelektivitáson – sokat javíthatunk, ha ún. dópolást alkalmazunk. Ennek lényege, hogy katalizátor- készítéskor dópoló anyagot adunk a rendszerhez, amely a szintézis során kedvezően befolyásolja a nanocsövek növesztését és fizikai tulajdonságait [32].

Szénforrásként a leggyakrabban alkalmazott acetilén mellett leginkább

metán, etént, propént és benzolt használnak. A katalizátor és a hordozó közötti kölcsönhatás jellegét tanulmányozva megállapítható, hogy ez alapvető fontosságú a szénnanocsövek katalitikus szintézise során. A hordozó-fém kölcsönhatást nemcsak a töltésátmenettel és a sav-bázis kölcsönhatással járó folyamatok, hanem a hordozó fizikai állapota is befolyásolhatja [33]. A katalizátorhordozó szerepét és a katalizátorkészítés módszereit tanulmányozva megállapítható, hogy a szénnanocsövek katalitikus szintéziséhez leginkább alkalmas hordozók a szilikagélek, a fúvatott szilícium-dioxid, a zeolitok (vagy zeolitszerű mezopórusos anyagok) és a kalcium-karbonát. Ezen anyagok közül a kalcium-karbonát különösen jó hordozóanyag, mivel nagy szelektivitású, felületén stabilan növeszthető szénnanocső, valamint a tisztítási folyamat során környezetbarát módon távolítható el.

Sokáig tartotta magát az a felfogás, hogy a CVD-módszer kizárólag többfalú szénnanocsövek előállítására alkalmas. 1996-tól kezdődően jelentek meg olyan közlemények, melyekben kimutatták, hogy az MWNT mellett ezekben a rendszerekben egyfalú szénnanocsövek is keletkezhetnek [34].

Feltétlenül meg kell említenünk azt a módszert, amelyet a fullerének felfedezéséért Nobel-díjjal jutalmazott egyik tudós, *Richard E. Smalley* és csoportja fejlesztett tovább, az egyfalú szénnanocsöveket eredményező HiPCO-szintézist. Az eljárás neve is elárulja, hogy nagy nyomáson működik (*High Pressure*), és szén-monoxidot (*CO*) alkalmaz szénforrásként. A katalizátorvasat pentakarbonil formájában juttatják a reaktorba, ami



6. ábra. Szénnanocsövek előállítására szolgáló forgó csökemence [31]

több szempontból is „elegáns” megoldás: a katalizátorhordozó nem szennyezi a terméket, a vas-pentakarbonil CO-csoportjai, egységei pedig beépülnek a szénnanocsövekbe [35].

A szénnanocsövek lehetséges felhasználása

Richard P. Feynman Nobel-díjas tudós 1959-ben előrevetítette, hogy a tudomány eredményeit felhasználva idővel egy enciklopédia tartalmát egyetlen tűhegyre is felírhatják. Ez a kijelentése tudománytörténeti jelentőségű volt, amivel – elvi síkon legalábbis – meghatározta a nanotechnológia alapjait. Az első tudományos közlemények ebben a témában kb. húsz évvel később, a mikroszkópos technikák rohamos fejlődésével jelentek meg. Az ilyen irányú kutatások azóta is széles körben, töretlenül folynak szerte a világon. Ma már speciális eljárásokkal lehetséges párányi motorokat, készülékeket készíteni, és a jóslatnak megfelelően miniatűr, nanométeres (10^{-9} m, azaz a mikrométer ezredrésze) nagyságú betűket „írni”. A jövő nanotechnológiai megoldásainak egyik főszereplője biztosan a szénnanocső lesz. A szénnanocsöveket, akárcsak a grafitot, sp^2 hibridállapotú szénatomok építik fel. Átlagos hosszúságuk a mikronos tartományba esik, míg az átmérő az egyfalú szénnanocsövek esetén egy-két nm, többfalúak esetében legtöbbször néhány tíz nanométer. Ebből adódik, hogy a hosszúság-átmérő arány rendkívül nagy, így ezek az anyagok fizikai szempontból egydimenziós szerkezeteknek tekinthetők.

Egyre nagyobb számú elméleti és gyakorlati bizonyítékot közölnek arról, hogy

a szénnanocsövek rendkívüli fizikai tulajdonságokkal rendelkeznek, amelyek alapján nagyon sok érdekes technológiai alkalmazás lehetőségét vázolták fel az utóbbi években [36]. A C-C (szén-szén) kötések erősségének köszönhetően – elméleti megfontolások alapján – egyetlen szénnanocső meg tudna tartani egy kamiont. Ezen a tulajdonságon alapszik az űrliftek víziója is. A szénnanocső nagyon könnyű anyag, és mechanikai ellenállása 50–100-szor nagyobb, mint a szerkezeti anyagként gyakran használt acélé. Szerke-

zetétől függően lehet fémes vagy félvezető tulajdonságú. Kétszer olyan jó a hőátadó képessége, mint a korábban legjobb hővezetőként ismert gyémántnak. Elképzelhető, hogy a szénnanocsövek téremissziós elektronforrásként is használhatók [37]. Kedvező mechanikai tulajdonságokkal rendelkező kompozitanyagként a hagyományos, polimerekkel vagy kerámiákkal bevont szénszálatokat széles körben alkalmazzzák [38], de vitathatatlanul kedvezőbb mechanikai tulajdonságaik miatt a szénnanocsövek várhatóan előnyösen tudják őket helyettesíteni erősítőelemként is [39]. Ráadásul – a szénnanocsövek változatos és sokrétű optikai és elektromos tulajdonságai miatt – a szénnanocső kompozitok használatának lehetősége elemekben és szenzorokban is felmerült (7. ábra) [40]. A lehetséges kompozitanyagok skálája rendkívül széles: használhatók mind az egyfalú, mind a többfalú szénnanocsövek különböző polimerekkel vagy szervesetlen vegyületekkel [41] kombinálva.

7. ábra. Szénnanocsövek elektrotechnikai alkalmazása





A különleges tulajdonságok alapján nem csoda, ha a kutatók számos területen (sikerrel) próbálkoznak a szénnanocsövek nanotechnológiai alkalmazásával. A teljesség igénye nélkül néhány példa arra, hogy milyen területeken találkozhatunk majd ezekkel az anyagokkal a nem túl távoli jövőben. A felhasználások egy része mechanikai stabilitásukon alapszik: a szénszál erősítésű könnyű és erős anyagok már eddig is kiváló jellemzőinek további javulását eredményezné. Speciális elektromos tulajdonságaik alapján joggal álmódozhatunk nanodiódákról, – tranzistorokról, mesterséges izomról, nanoszelepről, nanocsipeszről és hasonló káprázatos dolgokról. A szénnanocsöves nanokompozitok szintén izgalmas alkalmazásokat hozhatnak akár a szenzorok világában, akár a biotechnológiában, de előfordulhat, hogy a hidrogéntárolásban is.

A lehetséges alkalmazásokról viszonylag gyakran olvashatunk nemcsak tudományos szaklapokban, hanem különféle magazinokban, vagy az interneten is.

Ezek alapján senkinek nem lehet kétsége afelől, hogy a jövőben még sokat fogunk hallani ennek a rendkívüli anyagnak a nanotechnológia területén befutott karrierjéről. ●●●

IRODALOM

Az [1]–[41] hivatkozásokat a szerzők az érdeklődők rendelkezésére bocsájtják.

ÖSSZEFOGLALÁS

Hernádi Klára–Németh Zoltán: A szénnanocsövekről dióhéjban

Írásunkban bemutattuk a szénnanocsövek felfedezését, tárgyaltunk a különböző előállítási módszereket. A legelterjedtebb szintézismódok az ívkisülés, a lézeres elpárolgatás és a CVD-módszer. Ez utóbbi sok hasonlóságot mutat a szénszálak katalitikus előállítási technikájával. Leírtuk, hogy a CVD-módszerrel előállított grafitos struktúra több hibát tartalmaz, mint a más módszerekkel előállított többfalú szénnanocsövek szerkezete. Ennek ellenére egyszerűsége, rugalmassága és üzemi méretű szintézisre való potenciális alkalmassága miatt a módszert nem vetették el, inkább újabb és újabb fejlesztésekre van szükség.

Bemutattuk a katalizátorhordozó szerepét és megállapítottuk, hogy alkalmas katalizátor jelenlétében, megfelelő szénforrás bontásával, egyszerű kísérleti berendezésben grafitos falú szénnanocsövek növeszthetők.

Tárgyaltuk a szénnanocsövek fizikai tulajdonságait, melyek lehetővé teszik a széles körű felhasználást a nanotechnológia számos területén, és példákkal illusztráltuk a jövőbeli lehetséges alkalmazási területeket.

Gyógyszeréberség



Így lehetne magyarra fordítani azt a görög eredetű farmakovigilancia kifejezést, amely egyre nagyobb teret és jelentőséget nyer az egészségügy szereplőinek körében. A különböző gyógyszeripari termékek biztonságos és minimális kockázat mellett történő használata nem csupán a betegek, hanem az egészségügyi szakemberek és a gyártók érdeke is. Eppen ezért fontos, hogy a mellékhatás-bejelentés és -feldolgozás széles körben ismert, alkalmazott és hatékony eljárás legyen. A farmakovigilancia jelentőségéről dr. Széll Judit, a Richter Gedeon Nyrt. Gyógyszerbiztonsági és orvosi dokumentációs osztályának vezetője számolt be.

A statisztikai adatok szerint azok a betegek, akik egyáltalán nem szednek gyógyszert, lényegesen nagyobb kockázatot vállalnak, mint amit a gyógyszereszedéssel járó esetleges mellékhatások jelenthetnek. Tagadhatatlan ugyan, hogy a gyógyszerek használata rejthet bizonyos kockázatot, ám a farmakovigilancia éppen arra született, hogy ezt a rizikót minimalizálja.

A különböző készítmények piacra kerülését megelőző szigorú szabályok mentén zajló klinikai vizsgálatok igyekeznek minden nemkívánatos hatásra fényt deríteni, de ezek alkalmával lehetetlen olyan nagyszámú beteget bevonni, mint amit maga a piac jelent. Fontos tehát, hogy a gyógyszerek alkalmazása során felmerülő esetleges további mellék- és nem kívánt hatások felszínre kerüljenek, eljussanak az illetékesekhez és az ezekből származó tapasztalatok a termékek biztonságosabbá tételében kamatozzanak.

Mindez úgy lehetséges, hogy akár az egészségügyi szakemberek, akár a közvetlen felhasználók bejelentik esetleges negatív tapasztalataikat a gyártóknak. Ezt követi az információk értékelése, feldolgozása és az esetleges, a törvényi szabályozások alapján történő továbbítás az illetékes gyógyszerhatóságoknak.

A farmakovigilancia tehát elsősorban a betegek védelmére összpontosít, s ez a gyártók számára is kiemelt feladat. Emellett a gyógyszerhasználó biztonsága egyben a „termék biztonságát” is jelenti: a meg nem szűnő kontroll és nyomon követés a készítmény fo-

lyamatos tökéletesítését és a betegtájékoztató egyre precízebb módját eredményezi.

A gyógyszerhasználat feletti „örkösben” a hatóságoknak, az egészségügyi szakembereknek és a gyógyszeriparnak, de maguknak a felhasználóknak is komoly szerep jut. A mellékhatás-bejelentéssel kapcsolatos nemzetközi, de főként a hazánkra vonatkozó európai uniós, törvényi szabályozás egyre szigorodik. Többek között pontosan definiálja a bejelentést követő eljárás lépéseit, illetve azt a technikai környezetet, amelyben az információknak áramolnia kell. Meghatározza például a súlyos mellékhatás fogalmát, s azt is, hogy ilyen információ észlelése esetén a gyógyszergyártó mely hatóságnak tartozik jelentési kötelezettséggel és miként ajánlott orvosolnia a problémát. Emellett a gyártók időszakos összefoglalók közlésére is kötelezettek, így az EU felelős szerve egy időben képes az adott hatóanyagról érkező összes „időközi” információ értékelésére. Ez a folyamatos „hasznokockázat” értékelés – amelyet a gyártók és a hatóságok is rendszeres időközönként az összes termékre vonatkozóan elvégeznek – elősegíti a betegek biztonságát.

Az egészségügyi szakemberek szerepe kiemelt a farmakovigilancia tekintetében, hiszen ők azok, akik közvetlenül és „hozzáértő módon” találkoznak az egyes készítmények nem kívánt, illetve mellékhatásaival és jelezhetik azokat a megfelelő helyen. Elhivatottságuk okán az orvosok, gyógyszerészek is igyekeznek a lehető legbiztonságosabb készítményeket ajánlani betegeknek, így az ő érdekük is, hogy a kockázat minimalizálódjon, emellett a hasznai a lehető legmagasabb legyen.

Gyógyszerek hatására irányuló bejelentés természetesen érkezik maguktól a felhasználóktól is, mint ahogy ez a gyakorlatban is előfordul. Fontos, hogy tisztában legyenek és éljenek ezzel a lehetőséggel, hiszen a készítmények mellett a gyógyszerhasználat is a feltárt kockázatok minimalizálásával tehető egyre biztonságosabbá. **–chi–**

A Richter által gyártott készítmények alkalmazása során észlelt nemkívánatos események (mellékhatások) bejelentését, illetve bármilyen gyógyszerbiztonsággal kapcsolatos kérdést a **Farmakovigilancia** csoport központi e-mail címére vagy faxszámára várják.

drugsafety@richter.hu

Fax: **06-1-431-5954**

Hangposta: **06-1-505-7032**



Fráter György

■ Givaudan, Schweiz AG, Fragrance Research | georg.frater@givaudan.com

Az illatszerkémia újabb eredményei

Új molekulák, eljárások, prekursorok – és az izzadság [1]

Az illatszerek használata több ezer évre visszamenőleg bizonyítható [2]. Készítésük, kiszerezésük egészen a XIX. század második feléig lényegében nem sokat változott, s a növényi és ritkábban állati eredetű természetes anyagok feldolgozásából állt.

Azt hiszem, a legtöbb ember az illatszerkémikust ma is valahol a drogista és a fodrászegéd között képzelel el, és ezzel semmi negatívumot nem akarok e foglalkozásokról mondani, csak a felfogás elavultsá-

gára hívom fel a figyelmet. De nem róhatom fel senkinek, hiszen minden valamire való kémikus az emberiség valamilyen nagy problémáján dolgozik, mint például a rák, az AIDS, a magas vérnyomás stb. Hogy az ebből fakadó komplexusaimat valamennyire csökkentsem, megpróbálom ebben az írásban legalább azt bizonyítani, hogy a modern illatszerkémikus ugyanolyan széles körű és multidiszciplináris tudományt művel, mint akármelyik kollégája a gyógyszeriparban.

Úgy gondolom, fontos megjegyezni, hogy a XIX. század második felében és a XX. század első felében – a szintetikus festékanyagok mellett – az illatszerkémia fontos szerepet játszott a modern szerves kémia kialakulásában [3]. A XX. század elején a természetes anyagok, és az új, nem természetes anyagok szintézise rohamosan fejlődött és megváltoztatta az illatszerek összetételét [4].

Napjainkban a szintetikus anyagok nagymértékben kiszorították a természetes olajokat, extraktumokat.

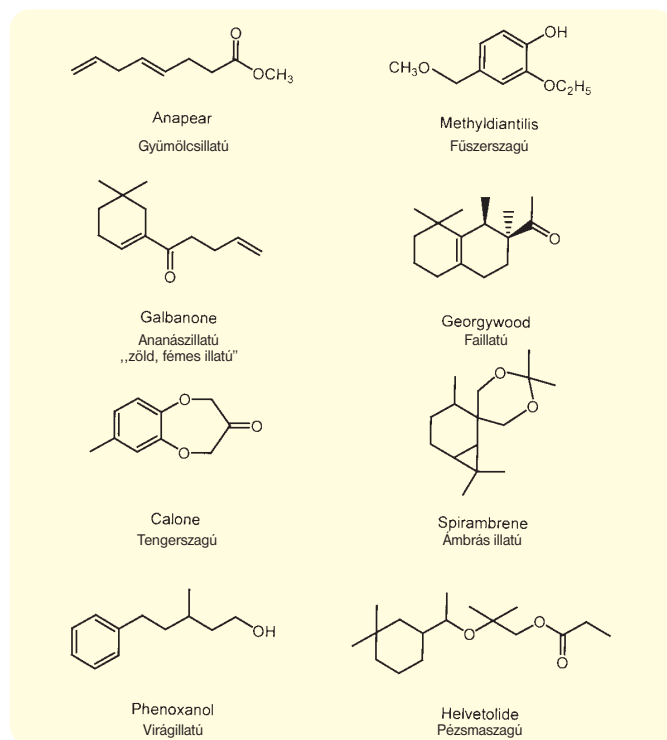
Az illatszer-összetevők rendszerint kis, apoláris molekulák, molekulatömegük ritkán nagyobb, mint 280. Ez érthető, hiszen illékonyak kell lenniük ahhoz, hogy az orrban lévő receptorokhoz eljussanak. Szobahőmérsékleten átlagos gőztér-koncentrációjuk az 1–200 µg/l tartományban található. Ez a koncentráció sokszorosa az átlagos küszöbkoncentrációnak, amely 0,1–10 ng/l között mozog. Az illatszer-molekulák általában szén, hidrogén és oxigén tartalmú szerkezetek, de kén és nitrogén is előfordul bennük. Más elemeknek semmi gyakorlati jelentőségük nincs, és legfeljebb elméleti érdeklődésből szintetizálták például ismert illatszer-összetevők szilíciumot tartalmazó analógiáit.

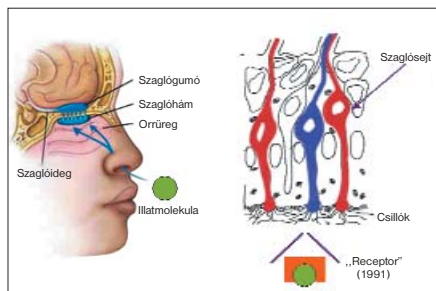
Ma általánosan elfogadott az az álláspont, hogy az illat/szag a molekulák struktúrájától függ [5, 6], s bár ez manapság triviálisnak hangzik, vannak más vélemények is. Pár példa látható az **1. ábrán**, ahol a különböző szerkezetek nyolc alapvetően fontos illatirányzat képviselői. Már *Lucretius* (kb. i. e. 97–55) hasonlóan vélekedett, és úgy magyarázta a különböző illatokat, hogy azok részecskéi egymástól a formájukban különböznek, szögletesek, gömbölyűek stb. [7]. Ezzel jóval megelőzte *Emil Fischer*, aki az enzim-agonista kölcsönhatást mint „kulcs a zárban” modellt írta le [8]. Most ennek az alapvető elméletnek a részletein dolgozunk.

Az illatszerkémikus legfontosabb feladata az elmúlt kb. 120 esztendőben új molekulák szintézise volt. Ebből következően tisztán szerves kémikusok kezében volt ez a tudomány. Mint látni fogjuk, ez az utóbbi 20 év alatt erősen megváltozott. Miután ma már több ezer illatszer-összetevőt ismerünk [9, 10], és ezekből – parfümháztól függően – 1000–1500 van mindennapi használatban, joggal tehetjük fel a kérdést, hogy miért kell még több, másfajta, új illatanyag. Ennek több oka is van. Egy új molekulának jobb tulajdonságokkal kell rendelkeznie. Ilyen például az újfajta illatkombináció (lásd később), a jobb biológiai lebonthatóság, a kisebb ár, a jobb tapadás a textilekhez stb.

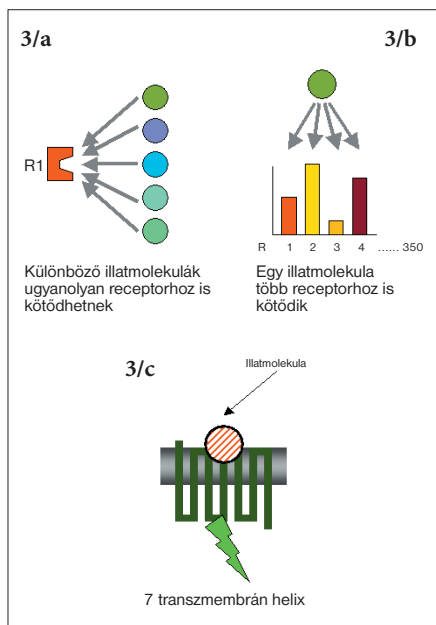
Bizonyos tulajdonságokkal rendelkező molekulák szintézise a legnagyobb kihívás egy kémikusnak. Mennyire racionális módon folyik új és jobb molekulák szintézise az illatszeriparban? Véleményemet nagyon jól kifejezi *Charles Sell* kollégám közleményének címe: „On the unpredictability of odor” [11]. Ez valahogy úgy működik, hogy a kémikus nagyon intelligens munkahipotéziseket állít fel és a végén a véletlen, a „serendipity” dönt.

1. ábra. Illatmolekulák szerkezete





2. ábra. Szagérzékelés



3. ábra. Illatmolekula–receptor kölcsönhatás

A különbség most és – mondjuk – 20 évvel korábbi ismereteink között az, hogy kezdjük érteni, miért nem sikerül racionálisan illatmolekulákat szintetizálni [11].

1991-ben Linda Buck és Richard Axel úttörő felfedezést tettek közzé [12]. Olyan gén-családot találtak, ami patkányok szaglősejtjének csillóiban fejeződik ki, és a G-fehérjéhez kapcsolódó receptorokat kódolja (GPCR, G-protein coupled receptors). Nagyjából 1000 gént azonosítottak, ami a patkány egész genomjának kb. 3–4%-a. Ez a felfedezés sok elődjük részletes kutatását koronázta meg. Buck és Axel 2004-ben elnyerték az orvosi–fiziológiai Nobel-díjat (Nobel-előadásuk [13, 14]). Az embernél kb. 350 gén funkcionális, azaz receptorfehérjét fejez ki.

A 2. ábrán látható a szagérzékelés egyszerűsített mecha-

nizmusa: az orrregben lévő szaglőhámot és már az agyban található szaglőgumót 5–10 millió szaglősejt köti össze; a szaglősejtek végén kb. 10–15 csilló található, melyeken receptorok foglalnak helyet. Ezeknek hét transzmembrán hélix része van (3/c ábra).

Az első fontos kérdés az volt, hogyan képes kb. 350 receptor sok ezer szagot megkülönböztetni. Buck 1999-ben kimutatta, hogy egy receptorhoz a különböző molekulák változó erősséggel kötődhetnek (3/a ábra), míg egy molekula több receptorhoz is kötődhet (3/b ábra) [15]. Ezzel a fiziológiai „trükkkel” úgy szólván végtelen kombinációs lehetőség nyílik meg, és minden további nél-

kül el tudjuk képzelni, hogy a sokat említett 10 000 szagot [16] meg tudjuk különböztetni.

Szantálfaillatú molekulák

A szantálfa olaja az egyik legregibb és legdrágább illatszer-alapanyag [9 és a benne található irodalmak]. A (Z)-(-)- β -Santalol (1) (4. ábra) ennek az olajnak a legfontosabb összetevője. Az olaj illata nehezen írható le: laktonos, virág-, fás, tej-, pézsmas- és hűgyszagú, állatias. Úgy az 1 anyagot, mint a többi szantálfaolaj-összetevőt többen szintetizálták [9]. Ezeknek a szintéziseknek gyakorlati jelentősége nincs, bármilyen szépek és intelligensek is, hiszen 1 kg belőlük sokkal többe kerülne, mint maga a már amúgy is drága olaj.

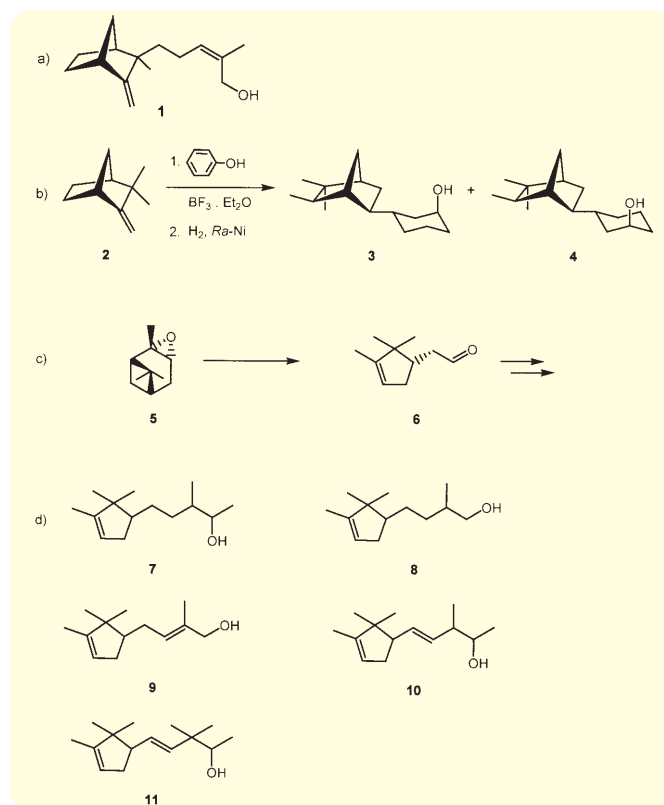
Az elmúlt kb. 60 évben a szantálfaillatú molekulák, ún.

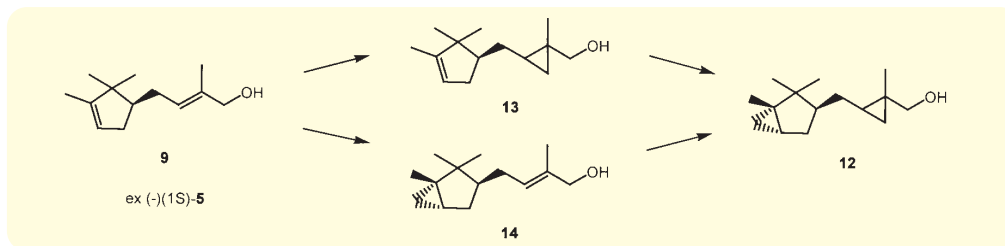
helyettesítők utáni kutatás úgy szólván állandó projekt a nagyobb illatszergyáraknál. Ne értjük félre ezeknek a jelentőségét. Nem tudják teljesen pótolni a β -Santalol harmonikus, meleg, érzéki hatását, de kompozíciókban jó szolgálatot tesznek, sokkal olcsóbbak, áruk független a természet hangulataitól és a háborúktól. Az első ilyen szantálhelyettesítő molekula egy véletlenül alapuló német találmány, mely a II. világháború után a szövetségesek tulajdonába került [17]. Az alapeljárás látható a 4/b ábrán. Az olcsó terpén szénhidrogén Lewis-sav hatására fenollal reagál, majd a keveréket teljes redukciónak vetjük alá. Sandela, Sandel stb. néven még ma is használatban van. Az egész keverékben több mint 20–30 izomer található, de csak két szerkezetnek van tényleg szantálfaillata, ez a 3 és a 4 [18]. A második véletlen egy keletnémet találmány, az α -pinénepoxid kamfolénaldehiddé történő átrendeződését írja le, jobban mondva az aldehid néhány száрма-

zékát próbálta szabadalommal védeni (4/c ábra) [19]. Ez a találmány óriási kutatási aktivitást váltott ki a nagy illatszerkutató csoportokban, ami – mint látni fogjuk – máig is tart. Ennek az eredményeit láthatjuk a 4/d ábrán: az előállított molekulák a Sandalore (7), Brahmanol (8), Bacdanol (9), Ebanol (10), Polysantol (11) stb. Ezek mind szabadalmaztatott molekulák, illatuk árnyalatokban különbözik, és főleg árban, valamint küszöbkoncentrációjukban különböznek egymástól [9].

A molekulacsaládon belüli továbblépésben megint a véletlen segített. Egy metilcsoportot szándékoztunk a Bacdanol (9) oldalláncába beépíteni, és e célból a kettős kötést Simmons–Smith-reakcióval ciklopropanáltuk (5. ábra). A reakcióelegyet illat-gázkromatográfon [GC-sniff, 20] vizsgáltuk meg és egy kis, de rendkívül erős természetes szantálillatú csúcsra (kb. 3%) letünk figyelmesek. Ennek az anyagnak a szerkezete a 12 volt [21a, 21b]. Nyilvánvaló,

4. ábra. Szantálillatú molekulák





5. ábra. A Javanol (12) szintézise

hogy egy diasztereomer keverékkel van dolgunk, ami annyival egyszerűsödött, hogy a ciklopentényű ciklopropánozása az oldallánchoz viszonyítva kizárólag *anti* sztereokémiával megy végbe.

A diasztereomerek és az enantiomerek különböző tulajdonságainak felderítése már nem csak a gyógyszeriparban természetes és magától értetődő. Az illatmolekulák esetében óriási különbségek találhatók az izomerek között – nemcsak a küszöbkoncentrációkban, hanem az illat milyenségében is. Ennek megfelelően a 12 molekulának mind a négy izomerjét szintetizáltuk. Ahogy a 6. ábrán látható, nagy különbségek lépnek fel úgy a küszöbkoncentrációkban, mint az izomerek illatában. Annak, hogy 12a az illatvektor, fontos gyakorlati jelentősége van, hiszen eldönti, hogy a kiinduló anyagnak (-)-(1S)- α -pinénnek kell lennie. A Javanolt (12) ma tonnaszám gyártják. Tudásunk szerint a legsikeresebb szantillatú molekula.

6. ábra. A Javanol (12) izomerjei és azok tulajdonságai

12a	(1S,1'S,2S,3'R,5'R)		0.015	szantálfa, krémes, meleg, erős
12b	(1R,1'S,2R,3'R,5'R)		≥ 15	tejes
12c	(1S,1'R,2S,3'S,5'S)		0.51	virágos, rózsás, tejes, szantálfa
12d	(1R,1'R,2R,3'S,5'S)		1.4	tejes, gyöngyvirág

A Georgywood rövid története

Az Iso-E-super (18) olcsó, nagyon kedvelt, évenként több ezer tonna mennyiségben használt anyag, fára és ámbrára emlékeztető illattal. Szintézise egyszerűnek látszik, két célirányos lépéssel már a kívánt terméket kapjuk (7. ábra).

Amikor ezt a terméket tőzesebben megvizsgáltuk, kiderült, hogy a) elég bonyolult keverékről van szó, b) a fő összetevő, 18 is úgyszólván szagtalan, c) a kellemes illatért egy kis, kb. 3,5%-os csúcs a felelős (GC-sniff, [20]). Miután a rejtélyes, rendkívül kis küszöbkoncentrációval (kb. 5 pg/l) rendelkező molekula szerkezetét felderítettük (20), képződési mechanizmusa is egyszerűen magyarázható volt (8. ábra) [22].

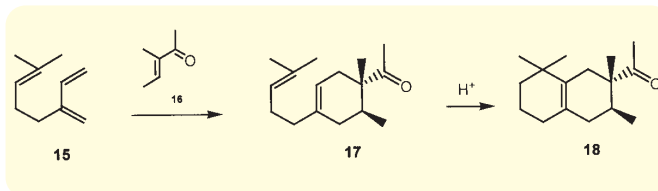
Egy kilenclépéses eljárással sikerült α -iononból 20-at szintetizálni [22]. Mint megannyi szép szintézisnek, ennek sem lett gyakorlati, ipari jelentősége. Biztonság kedvéért azonban a 20 szerkezetet használá-

ti szabadalomban védettük le – azzal a korlátozással, hogy „keverékek használata, amiben 20 több mint 5% koncentrációban fordul elő”, mivel már évek óta az Iso-E-super keverékben, bár nem azonosítva, a piacon volt [23].

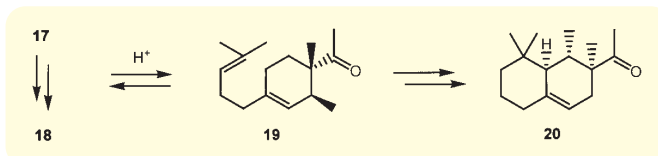
Mivel 20 szintézise nagyon nehéznek és drágának bizonyult, vezérmolekulának tekintettük és körülötte szintetizáltunk új molekulákat. Ennek a programnak jelenlegi végeredménye a Georgywood – 26 – vegyület. Szintézise az Iso-E-superhez hasonlóan egyszerű, a homomircén (23) (9. ábra) és izopropenil-metil-ke-ton (24) Diels–Alder-addícióján alapszik [24] (10. ábra). A 26 meleg, faillatú, alacsony küszöbkoncentrációval (kb. 30 pg) rendelkező illatmolekula.

Úgy mi [25], mint Corey et al. [26] szintetizáltuk a 26 enantiomerjeit. A (-)-(1R,2S)-26 20pg/l küszöbkoncentrációval az aktív enantiomer, míg a (+)-26 3,5 ng/l küszöbkoncentrációval rendelkezik, tehát a különbség több, mint két nagyságrend.

7. ábra. Az Iso-E-super szintézise



8. ábra. Az érdekes 20 izomer képződésének mechanizmusa [22]

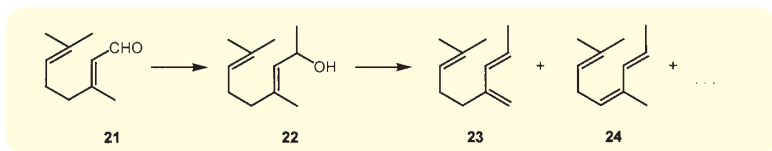


A 9. és 10. ábrán bemutatott, egyszerűnek tűnő négylépéses szintézis hosszas fejlesztést igényelt. A citrálból (21) Grignard-reagenssel előállított alkohol (22) dehidratálása ugyan – mint főterméket – a kívánt homomircént (23) adja, de kb. 28–30% homoocimén (24) is keletkezik. A 24 melléktermék, bár a következő lépésben, a DA-addíciónál nem zavar, mert sokkal lassabban reagál, mint 23. A DA-addíció probléma nélküli és 85% kitermeléssel megy. Az *endo* átmeneti komplex biztosítja a szubsztituensek *syn* sztereokémiáját. A dién-ciklizálás bizonyult a legnehezebb feladatnak. Analóg módon a 8. ábrán mutatott mechanizmushoz, a 25 ciklizációja két *regio*-izomert ad, a 26 és 27 vegyületeket. Mivel az utóbbi a szintézis végén keletkező, drága és szagtalan melléktermék, mindenképpen elkerülendő.

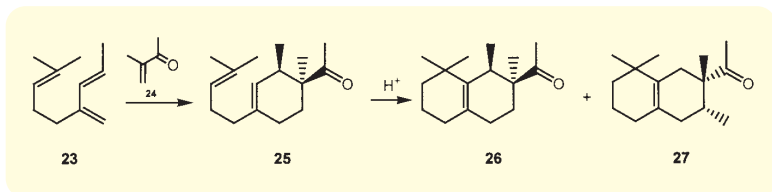
A dehidratálást sikerült az etil-karbonáton keresztül Pd-katalizátorral 80:20 arányra javítani [27]. A dién-ciklizáció MeAlCl₂-katalizátorral úgyszólván 100% szelektivitással a kívánt 26-t szolgáltatja [28].

Prekursorok

Hasonlóan a gyógyszeriparban jól ismert problémához, az illatszeriparban is a hatóanyagok, ebben az esetben egy illatmolekulának bizonyos



9. ábra. A homomircén (23) szintézise



10. ábra. A Georgywood (26) szintézise

helyen és bizonyos időpontban kell aktívnak lennie. Ez érvényes az ún. luxusparfümöknel, de még fontosabb a mosóporoknál és a textilkondicionálóknál. Az utóbbi esetben a feladat abból áll, hogy egy illatmolekulát a mosás után még a textilen tudunk tartani, miután nagymennyiségű vízzel mostuk az anyagot emulgeátorok jelenlétében azzal a céllal, hogy a szennyezőanyagokat eltávolítsuk.

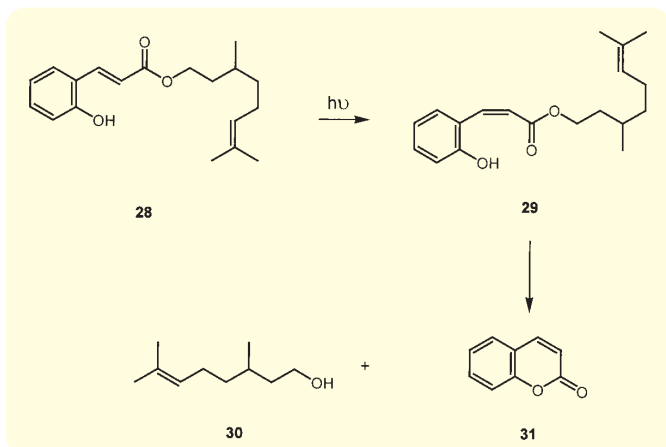
Mivel erre egyrészt első megközelítésben lipofil molekulák alkalmasak, másrészt ezeknek biológiai lebonthatósága általában rossz, az utóbbi viszont az elmúlt 10–15 év folyamán alapvetően tiltott tulajdonsággá vált, a 22-es csapdája lépett fel.

Ebben az esetben használható prekursor látható a 11. ábrán. A virágillatú Citronellol (30) túl jól oldódik vízben,

tehát 98%-a eltűnik a mosás alatt, ami környezetszennyeződést okoz. A hidroxifahéjsav-észter (28) rosszabbul oldódik vízben, aromás volta miatt jobban tapad a textilekhez, és mosás után megtalálható rajtuk. Ha ezután a 28 szárítás céljából kikerül a szabadba, az ismert fotoizomerizáció játszódik le. Emiatt a *transz*-28 a *cisz*-29-cel fotogyensúlyba kerül és 29 spontán laktonizál. A laktonizálás két illatmolekulát hoz létre ott, ahol kell, amikor kell, mégpedig Citronellol (30), és kumarint (31) [29a, 29b].

Az ilyen típusú prekursoroknak praktikus jelentősége is van. A Tonkarose már regisztrált és a gyakorlatban használt molekula [29]. Ez az érdekes és aktuális téma sokféle lehetőséget rejt. Fotoreakció helyett az illatmolekula pre-

11. ábra. Fényérzékeny prekursor hatásmechanizmusa



kurzorból való felszabadítása enzimekkel is lehetséges [29c].

Izzadság

Általánosan ismert, kellemetlen testszag az izzadságszag. A rossz szag érzékelését a legegyszerűbben (de nem mindig eredményesen) úgy akadályozzuk meg, hogy a szagot elfedjük.

Tudományosabb, érdekesebb és hosszú távon hasznosabb, ha megpróbáljuk megérteni a kellemetlen izzadságszag keletkezésének mechanizmusát, hiszen akkor racionálisan tudjuk megakadályozni.

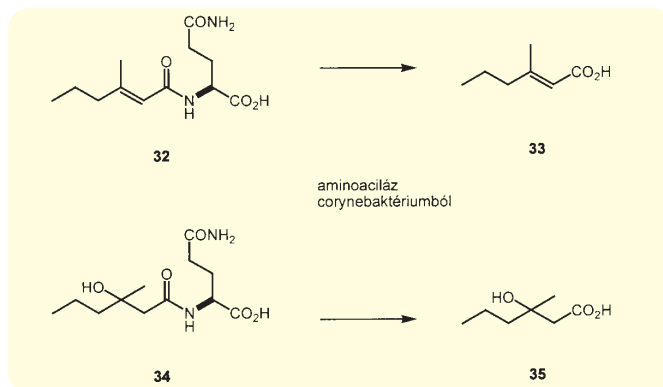
A Givaudan már a 90-es évek elején elkezdte a kutatásokat, s az alapvető kutatási stratégia gyakorlati eredményeket hozott [30].

Sikerült a hónaljszag olyan szagtalan prekursorjait izolálni, melyek a baktériumi N-acilamino-aciláz (AMRE – axilla malodor releasing enzyme) hatására lebomlanak, és a szagmolekulák felszabadulnak (12. ábra) [31].

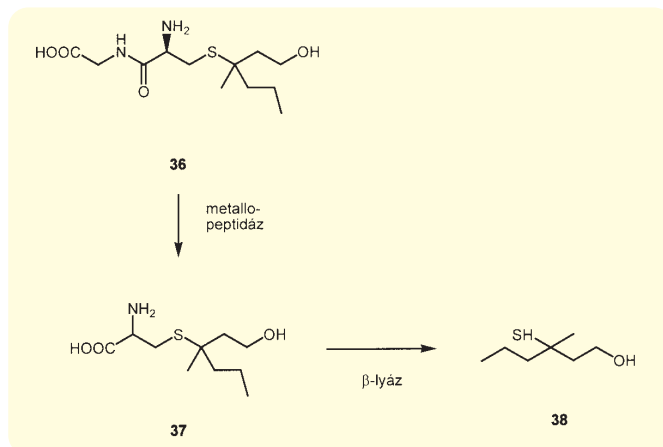
A prekursorok az izzadságsavak (33, 35) glutaminnal képzett amidjai, a 32 és 34 vegyületek. Az utóbbi amidok a hónaljban lévő corynebaktériumok enzímje hatására bomlanak le. Ez a mechanizmus nemcsak a 12. ábrán mutatott két savra érvényes, hanem nagyszámú más, az izzadságban kimutatott savra is [32].

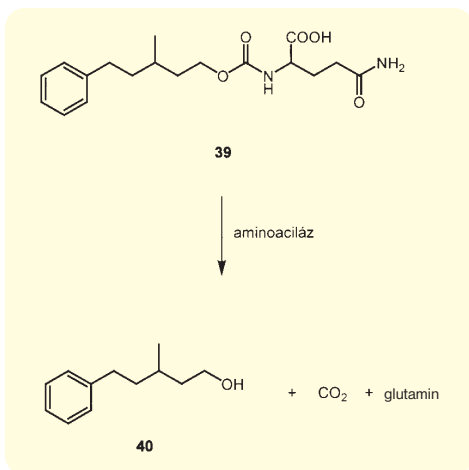
Az izzadságban a fent említett rövid és szubsztituált zsírsavak mellett több rendkívül kis küszöbkoncentrációval rendelkező merkaptán is előfordul. Ezek a merkaptánok is prekursor formájában jelennek meg, és kétlépéses lebontásuk-

12. ábra. Glutaminszármazékok (32, 34) enzimatis lebonatása izzadságsavakra (33, 35)



13. ábra. A 36 prekursor kétlépéses enzimatis lebonatása





14. ábra. A Phenoxanol (40) képződése AMRE hatására

hoz egy dipeptidáz és egy β -liáz szükséges (13. ábra) [33].

A corynebaktérium aminosziláz (12. ábra) 100%-osan specifikus a glutamingyökre, de toleráns a molekula acilfelé. Ezt a toleranciát a gyakorlatban arra lehet felhasználni, hogy az enzimnek olyan prekuzort ajánlunk fel, melynek lebontása kellemes illatú molekulához vezet (14. ábra) [34, 35]. A karbamát (39) enzimatikusan lebontása ezt a str-

tégiát mutatja. A termék Phenoxanol (40), egy kellemes virágillatú molekula.

Másik, gyakorlati értékű stratégia az enzimgátló anyagok szintézise [36, 37]. Az izzadság bonyolult összetétele – azaz kb. 80 feldehített molekula és még valószínűleg sok, eddig nem izolált összetevő –, a specifikus enzimrendszer – mely a prekuzor molekulák lebontását szolgálják –, felvetik a kérdést, hogy mindez mi célt szolgál. Annál is inkább, mert analitikai eredményeink arra mutatnak, hogy mindenkinek egyéni szaga van. Ezt ugyan a rendőrkytyák már régen tudták [38], de eddig erre analitikai bizonyíték még nem volt.

Egerek esetében bizonyított tény, hogy párválasztásuk szagmolekulákon alapszik. Ezek a

szagmolekulák genetikailag összefüggnek az MHC-vel (major histocompatibility complex), ami viszont az immunrendszert meghatározó génklaszter [39].

Ember esetében *Wedekind* és munkatársai végeztek kvalitatív kísérleteket, melyek alapján a testszag, a párválasztás és az immunrendszer összefüggése lehetségesnek tűnik [40].

Azt, hogy az embernél az izzadságszag valóban genetikailag meghatározott-e, és ez összefügg-e az immunrendszerrel, s ha igen, befolyásolja-e a párválasztást, csak további kutatás döntheti el.

Érdekes és hosszú út vezet ezekhez az alapvető kérdésekhez az 1. ábrán mutatott egyszerű illatmolekulák szerkezeteitől. ●●●

ÖSSZEFOGLALÁS

Fráter György: Az illatszerkémia újabb eredményei: Új molekulák, eljárások, prekuzorok – és az izzadság

Az illatkutatás sok tudományágat ölel át, a szerves kémia mellett a biokémia, a fizikai kémia, és a molekuláris biológia is egyre növekvő szerepet játszik benne. 1991 óta a szaglőreceptorok is kutatási célpontok lettek, bár az új molekulák szintézise még ma is elsősorban empirikus alapon történik. Az új illatmolekulák szintézisét jól szemlélteti a Geogywood és a Javanol példája. Az árszempontok figyelembevételé miatti az eljárásfejlesztés lényeges tényező. A prekuzorstratégia alkalmas bizonyos oldhatósági és kioldódási problémák megoldására, amit az UV-érzékeny citronellil-cinnamát példáján szemléltetünk. Az izzadsággal kapcsolatos kutatások felfedték a kellemetlen szag képződésének mechanizmusát. Nagyszámú savat azonosítottunk az izzadságban, néhány bakteriális enzimet is izoláltunk és enzimgátló molekulákat is szintetizáltunk. A savak lehetnek a felelősek az egyéni testszagért. Ezen túlmenően, a testszagunk esetleg az immunrendszerünk egy kívülről érzékelhető jele.

IRODALOM

- [1] A közlemény a 2007. május 29-én Sopronban, a Centenárium Vegyészkonferencián elhangzott előadás rövidített, szerkesztett változata.
- [2] a) E. T. Morris, „Scents of time. Parfumes from ancient Egypt to the 21st century”, The Metropolitan Museum of Art, 1999. b) G. Ohloff, „Düfte, Signale der Gefühlswelt”, Wiley-VCH, 2004, 1. fejezet. c) R. Kaiser, „Meaningful scents around the world; olfactory, chemical, biological and cultural considerations”, Wiley-VCH, 2006. A két utóbbi könyv egyedülálló szakmai és széles kulturális információt ad az illatok világáról, nagyszerű képanyaggal.
- [3] G. H. Büchi, „The chemistry of perfumes and flavors. Its evolution over the last 100 years.” In „Olfaction and Taste. A century for the senses”, Firmenich Jubilee Symposium, Ed. Giuseppe Salvadori, Allured Publishing Corporation, USA, 1997. Ehhez a témához tulajdonképpen még hiányzik egy áttekintő cikk.
- [4] P. de Nicolai, Chem. & Biodiv. (2008) 5, 1137.
- [5] J. E. Amoore, „Molecular Basis of Odor”, Charles C. Thomas Publ. Springfield, 1970.
- [6] M. G. J. Beets, „Structure. Activity in Human Chemoreception”, Applied Science Publ. Ltd, London, 1978.
- [7] Lucretius, „De rerum natura”, Lukrez, „Von der Natur”, dtv, Artemis, 1991, 4. könyv, 645–655. sor; „A természetéről”, Kossuth Kiadó, Budapest, 1997.
- [8] E. Fischer, Ber. Dtsch. Chem. Ges. (1894) 27, 2985.
- [9] G. Fráter, J. A. Bajgrowicz, Ph. Kraft, Tetrahedron (1998) 54, 7633.
- [10] Ph. Kraft, J. A. Bajgrowicz, C. Denis, G. Fráter, Angew. Chem. Int. Ed. (2000) 39, 2980.
- [11] C. S. Sell, Angew. Chem. Int. Ed. (2006) 45, 6254.
- [12] L. Buck, R. Axel, Cell (1991) 65, 175.
- [13] L. Buck, Angew. Chem Int. Ed. (2005) 44, 6128.
- [14] R. Axel, Angew. Chem. Int. Ed. (2005) 44, 6111.
- [15] B. Malnic, J. Hirono, T. Sato, L. B. Buck, Cell, (1999) 96, 713.
- [16] A. Gilbert, „What the nose knows, the science of scent in everyday life”, Crown Publishers, New York, 2008.
- [17] J. R. Byers, Jr., Am. Parf. Essent. Oil. Rev. (1947) 49, 483.
- [18] E. Demole, Helv. Chim. Acta (1964) 47, 319.; ibid (1969) 52, 2065.
- [19] Kelet-német szabadalom 68936 (priority 1969, 9, 20).
- [20] Az illat-gázkromatográf (GC-sniff) lehetővé teszi, hogy a GC-n megjelenő csúcsokat sorba lehessen szagolni, mivel az elválasztott anyag csak kis százaléka megy át a detektoron (általában FID), a nagyobb része külön kijáraton szagolható. Rendkívül fontos, kapilláris oszlopokkal működő segédeszköz.
- [21] a) J. A. Bajgrowicz, I. Frank, G. Fráter, M. Hennig, Helv. Chim. Acta (1998) 81, 1349. b) J. A. Bajgrowicz, G. Fráter, Enantiomer (2000) 5, 225.
- [22] C. Nussbaumer, G. Fráter, Ph. Kraft, Helv. Chim. Acta. 1999, 82, 1016–1024.
- [23] P. Etzweiler, D. Helmlinger, C. Nussbaumer, M. Pesarò, U.S. Patent. 5 214 160, 1980.
- [24] A. Bringhen, G. Fráter, U. Müller, EP 0743297 A1, 1996; C. A. 1997, 126, 103856h.
- [25] G. Fráter, U. Müller, F. Schröder, Tetrahedron Asym. (2004) 15, 3967.
- [26] S. Hong, E. J. Corey, J. Am. Chem. Soc. (2006) 128, 1346.
- [27] J.-P. Barras, B. Bourdin, F. Schröder, CHIMIA (2006) 60, 574.
- [28] G. Fráter, F. Schröder, J. Org. Chem. (2006) 72, 1112.
- [29] a) G. Fráter, D. Anderson, US 6096918, priority 1998 2,13; CA. 131, 170173. b) S. Derrer, F. Flachsmann, C. Plessis, M. Stang, CHIMIA, 2007, 61, 665. és az abban hivatkozott irodalmak; c) F. Flachsmann, M. Gautschi, J.-P. Bachmann, G. Brunner, Chem. & Biodiv. (2008) 5, 1115.
- [30] M. Gautschi, A. Natsch, F. Schröder, CHIMIA, 2007, 61, 27. és az ott idézett irodalom.
- [31] A. Natsch, H. Gfeller, P. Gyagx, J. Schmid, C. Acuna, J. Biol. Chem. (2003) 278, 5718.
- [32] A. Natsch, S. Derrer, F. Flachsmann, J. Schmid, Chem. Biodiv. (2006) 3, 1.
- [33] R. Emter, A. Natsch, J. Biol. Chem. (2008) 283, 20 645.
- [34] G. Acuna, G. Fráter, P. Gyagx, EP 815833, priority 1996, 6, 24; Givaudan, C. A. 128, 145174.
- [35] A. Natsch, H. Gfeller, P. Gyagx, J. Schmid, Int. J. Cosmet. Sci. (2005) 27, 115.
- [36] A. Natsch, G. Acuna, M.-C. Fournier-Zaluski, H. Gfeller, WO 02092024, priority 2001,5,14, Givaudan és Pharmaleads, C. A. 137, 380936.
- [37] F. Schröder, A. Natsch, WO 2004043971, priority 2003,11,14, Givaudan, C. A. 141, 7280.
- [38] P. G. Hepper, Perception (1988) 17, 549.
- [39] a) M. Yamaguchi, K. Yamazaki, G. K. Beauchamp, J. Bard, L. Thomas, E. A. Boyse, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. (1981) 78, 5817. b) K. Yamazaki, G. K. Beauchamp, A. Singer, J. Bard, E. A. Boyse, ibid (1999) 96, 1522. c) A. Willse, A. M. Belcher, G. Preti, J. H. Wahl, M. Thresher, P. Yang, K. Yamazaki, G. K. Beauchamps, Anal. Chem. (2005) 77, 2348.
- [40] a) C. Wedekind, T. Seebeck, F. Bettens, A. Paepke, Proc. R. Soc. London Ser. B. (1995) 260, 245. b) C. Wedekind, S. Furi, ibid (1997) 264, 1471.



Beszámoló az MTA Kémiai Osztályának Tudományos üléséről

Molekulák térben és időben

A már évek óta ismétlődően visszatérő Magyar Tudomány Ünnepe kapcsán az MTA Kémiai Osztálya ez évben „Molekulák térben és időben” címmel Hollósi Miklós és Perczel András koordinálásában szervezte tudományos ülését, amelyen Perczel András bevezető gondolatain és Hollósi Miklós zárszaván kívül nyolc előadás hangzott el. Ezek rövid összefoglalását adjuk most közre. Az előadók tudományterületüket, munkájukat illetően három kérdésre adtak választ; ezek az összefoglalók után pontokba szedve olvashatók.

A kérdések:

1. Az előadónak milyen víziója van saját szakterületéről és annak jövőbeli jelentőségéről/kifutásáról?
2. Hogyan illeszkedik a tér és idő fogalma az ön szakterületéhez?
3. Mit tekint előadása legfontosabb üzenetének?

A levezető osztályelnök, *Medzihradszky Kálmán* akadémikus megnyitóját követően Perczel András bevezetője következett, amelyből néhány részletet emelünk most ki.

Bevezető „filozofikus” gondolatok

Perczel András

■ ELTE, Szerves Kémiai Tanszék, <http://szerves.chem.elte.hu>

Vajon tényleg olyan evidens megállapítás-e az, hogy háromdimenziós világunkat háromdimenziós parányok töltik ki? Nincs még 150 éve sem annak, hogy két kémikus – egy holland és egy francia – szinte egyszerre, ám egymásról nem tudva kezdte boncolgatni a molekulák tér-

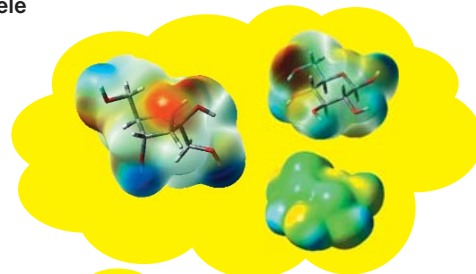
beli jellegét. Azért, mert ma ezt a tényrt szinte evidenciának, a molekuláris szintű kémia egyik princípiumának fogadjuk el, ne feledjük, hogy e felismerés történelmi jelentőségű, és azt sem érdemes elvitatni, hogy az ebből és hasonló tényekből levezetett későbbi megfogalmazás igazi virtuózokra utal. De vajon nekünk, kémikusoknak, a világban körülnézve eszünkbe jut-e annak molekuláris felépítettsége? Amikor például legutoljára teánkba mézet kanalaztunk, gondoltunk-e arra, hogy az abban lévő monoszacharidok közül a fruktóz, a glükóz vagy a diszacharidok közül a szacharóz, a maltóz, az izomaltóz, a maltulóz, a turanóz és a kojibióz szerkezeti képlete hogy is néz ki pontosan? Valószínűleg nem! És akkor az sem olyan meglepő, hogy nem ötlik szemünkbe a β -D-fruktofuranoz kapcsán a molekula elektronsűrűségének térbeli eloszlása, vagy az arra könnyedén rátérképezhető elektrostatikus potenciálértékek nagysága.

De vajon miért van ez így? Talán azért, mert a primer tapasztalás szintjén a méz még a kémikus számára is csak egy sűrűn folyó, édes, aranysárga folyadék, nem pedig egy kolloid, és mikor eszünkbe jut, akkor elsősorban az ízére, nem pedig kémiai alkotórészeinek térszerkezetére gondolunk. Mindez persze a tapasztalatainkból levezethető „imprinting” vagy más néven tanulási folyamat során kialakított „bevésődés” eredménye. Ugyanis a molekulákkal való személyes kapcsolataink száma a szó hétköznapi értelmében alacsony! Miközben minden, ami körülvesz vagy ami minket magunkat is felépít, végtermékben molekulák – valamilyen szinten rendezett – halmaza, aközben erről a mikrovilágról, a parányok „életéről” közvetlen tapasztalataink nincsenek. Egyszerűen azt is mondhatnánk, hogy molekuláris megtapasztalás

szintjén ingerszegény környezetben élünk. Ennek a közvetlen tapasztalatnak a hiánya teszi nehezzé a megismerést és a megértést, és ennek következtében a kémia atomi vagy molekuláris szintű tanítását is. Könnyű volt Newtonnak, mert ő – úgy, mint Tell Vilmos – láthatta megfigyelése tárgyát, az almát! Ám ugyanebben az almában rejtve van mindaz, ami a kémikust érdekli. Az almát: színét, formáját, sőt ropogósan édes ízét közvetlenül megtapasztalhatjuk, ám az almát felépítő molekulák közvetlen megismerése nem lehetséges. A kutatói elme leleményes, és ott, ahol az evolúció során kialakult szerveink nem kellően alkalmazkodik a közvetlen megismerésre, készüléket tervez, majd épít, hogy az észlelés határait kitolja. Látásunk spektrális tartománya korlátozott, de infravörösben vagy ultrabolyában látó egyszerű készülékekkel pótolhatjuk ezt a hiányosságot. Az 1950-es évektől nagyszámú olyan eszközt és készüléket fejlesztettünk ki, amelynek köszönhetően ma a szerkezeti kémia és biológia területén jobban látunk, mint valaha.

Mára megnyílt a lehetősége annak, hogy nemcsak a kisebb molekulatömegű molekulák, de az azokból felépülő akár sok száz vagy ezer kilodalton össztömegű szupramolekuláris rendszereket is atomi

A méz cukortartalmának kémiai jellege és hozzávetőleges összetétele



Monoszacharidok:
fruktóz (38,2%)
glükóz (31%)
Diszacharidok (~9%):
szacharóz, maltóz, izomaltóz, maltulóz,
turanóz és kojibióz
Oligoszacharidok:
(4,2%) viszonylag alacsony





szinten megismerjük. Vannak merevebb vázú szerves molekulák, mint például egyes szteroidok; míg más típusok esetében – ilyenek például a polipeptidok és fehérjék, az oligo- és a poliszacharidok és még nagyon sok más természetes makromolekula – inherens flexibilitás figyelhető meg. Az utóbbi típusú vegyületek vizsgálatára érvényes az a már korábban tett megállapítás, amely szerint csak úgy alkothatunk hiteles képet a molekulák szerkezetéről, ha azok konformációanalízise esetén a konformerek dinamikus egyensúlyi elegyében szereplő szerkezetek közül mind többet meg tudunk különböztetni. Jól érzékelhető tehát, hogy a

legtöbb makromolekula jellegzetes téralak-családokkal jellemezhető. Ez utóbbiak termodinamikai leírása mellett, azaz a konformer-családok megnevezésén túl, az egymásba alakulásuk kinetikai jellemzése is fontos rendszerparaméter.

A bevezető gondolatok végén érdemes megemlíteni *Ludwig Wittgenstein* egyik híres mondását, miszerint „*a nyelvem határai a világom határai*”, amely állítás értelmében „*amit nem tudunk mondani, azt gondolni sem tudjuk*”. Vagy egy kicsit másként: „*Én vagyok a világom; a világom határai a nyelv, amelyen értek.*” Addig tudok elmenni tehát gondolatban, elméletben, ameddig kifejezéseim vannak hozzá. Eb-

ből adódik az is, hogy ezen – mármint a világon – túl, amiről még tudok szavakban és kifejezésekben beszélni, nincsen semmi más. Onnan úr vesz körül minket. Így tehát, ha a molekulák térbeni és időbeni létéről meg tudunk fogalmazni fontos állításokat, akkor remélhetjük, hogy nyelvünk s ezen keresztül világunk határa is kitolódik. S mi más lehetne a természettudós álma, munkájának motorja, ha nem ez?

A bevezetőt követő következő előadások pazarul megteremtett világunk csodálatos részleteit tárták fel és a jelenlevők gazdagodhattak új fogalmakkal, képekkel, amelyek nyelvünket és ezáltal talán világunkat is tágították.

Enantiomerfelismerés a gazdamolekula-vendégmolekula komplexek körében

Huszthy Péter ■ BME, Szerves Kémia és Technológia Tanszék, <http://www.oct.bme.hu>

Az élő természetben gyakran előforduló és létfontosságú – a molekuláris felismerés speciális esetének tekinthető enantiomerfelismerés alatt – azt értjük, amikor egy királis molekula, amelyet gazdamolekulának hívhatunk, eltérő kölcsönhatásba lép egy másik királis molekula, a vendégmolekula két enantiomerjével szemben. Ez az eltérés megmutatkozhat a komplexek kialakulásának, illetve diszociációjának a sebességében, vagy a már kialakult komplexek stabilitásában. Az enantiomerfelismerés révén létrejött, egymással diasztereomer viszonyban lévő gazdamolekula-vendégmolekula komplexeket nem kovalens kötések, hanem a sztereoelektronos szempontból komplementer csoportok közötti, több ponton átható másodlagos vagy gyenge kötőerők tartják össze. A komplexek stabilitását növeli, ha minél több ponton, minél erősebb másodlagos kölcsönhatás alakul ki. A szelektivitást illetően azonban, mint az az előadás példáiból is kitűnik, a taszító kölcsönhatásoknak is jelentős szerepük lehet.

Néhány évtizeddel ezelőtt az enantiomerfelismerést kizárólag az élő szervezetekben lévő bonyolult biomolekulák sajátjának tekintették. Az utóbbi évtizedek eredményei azonban egyértelműen bizonyították, hogy ez a jelenség kiváltható viszonylag egyszerű szintetikus gazdamolekulákkal is.

Az ilyen egyszerű szintetikus gazdamolekulákkal végzett enantiomerfelis-

merés tanulmányozása nemcsak azért fontos, mert ezek révén jobban megérthető és megismerhető az élő szervezetekben fellépő bonyolult enantiomerfelismerés, hanem azért is, mert az ilyen jellegű kutatások hatékony enantioszelektív szenzor- és szelektormolekulák kifejlesztését eredményezhetik.

A kérdésekre adott válaszok

1. Az utóbbi évtizedek eredményei egyértelműen igazolják, hogy az élő természetben általánosan fellelhető és létfontosságú enantiomerfelismerés jelensége kiváltható viszonylag egyszerű szintetikus gazdamolekulákkal is, mint amilyenek például a koronaéterek.

Az ilyen egyszerű szintetikus gazdamolekulákkal végzett enantiomerfelismerés tanulmányozása nemcsak azért fontos, mert ezek révén jobban megérthető és megismerhető az élő szervezetekben fellépő bonyolult enantiomerfelismerés, hanem azért is, mert az ilyen jellegű kutatások hatékony enantioszelektív szenzor- és szelektormolekulák kifejlesztését eredményezhetik.

Az előadás egyszerű példák alapján igyekezett rávilágítani azokra a tényezőkre, amelyek a királis gazdamolekulák és királis vendégmolekulák enantioszelektív komplexképzését befolyásolják, és azt is bemutatta, hogy ezen tényezők elemzéséből kiindulva hogyan lehetséges enantioszelektív szenzor- és szelektormolekulákat kifejleszteni.

2. Az enantiomerfelismerés mértékét, vagyis az enantioszelektivitást a 3D térben fellépő vonzó és taszító kölcsönhatások különbsége szabja meg. Míg az egymással diasztereomer viszonyban lévő komplexek stabilitását növeli, ha minél több ponton minél több másodlagos vagy gyenge intermolekuláris vonzó kölcsönhatás lép fel a gazdamolekula, illetve a vendégmolekula sztereoelektronos szempontból komplementer részei között, addig az enantioszelektivitást jelentősen befolyásolhatják a taszító kölcsönhatások (nem kötött atomok, illetve csoportok közötti taszítás) is.

3. A kutatás végső célja, hogy olyan királis HPLC-állófázisokat készítsünk, amelyek hatékonyan választják el a racém biogén protonált aminok, aminosavak és származékaik, vagy esetleg más típusú racémátok enantiomerjeit. Ez analitikai és preparatív szempontból egyaránt fontos lehet a gyógyszer-, növényvédőszer-, élelmiszer-, illatszert- és egyéb iparágakban.



A röntgensugárzás szóródása: képpalkotás atomi fölbontással

Czugler Máttyás ■ MTA KK, www.chemres.hu

A Laue 1912-es kísérletét követő Nobel-díjak sora is jelzi, hogy a röntgensugárzás – főként egykristályokon való – szóródásának módszere a kémiai, majd a biokémiai szerkezetvizsgálat, a különféle molekulákról való képpalkotás egyik leghatékonyabb eszközévé lett. Ennek az általunk közvetlenül megismerhető világtól méreteiben is nagyon elütő mikrokozmosznak a megismerése a saját, „kézzelfogható” világunk képét is megváltoztatta. Az atomi szintű szerkezeti részletek világitanak rá egyes klasszikus kémiai fogalmaink – például a sztöchiometria vagy a kiralitás – antropomorf voltára, azok valódi természetére.

Három példán keresztül bemutatjuk, hogy kutatócsoportunk jelenlegi munkájában hogyan látszik a kristályokban élő molekulák világa. Az elmondottakat demonstrálandó kiválasztottuk

- egy 1861 óta ismert, de alig tanulmányozott anion általunk szintetizált szerves/steres komplex *akirális sói* által alkotott *királis kristályszerkezeteinek* földerítését;

- a Pintér István által fölfedezett *ribózsármazékok új sókomplexeinek* szerkezetmeghatározását, ami megvilágította sztöchiometriájuk valódi természetét, ezzel együtt a közönséges alkalisók váratlan „képességeit”;

- egyes borkósvámszármazékok *rezolválási kísérleteiből* kapott kristályok szerkezetei pedig a *királis molekuláris fölmerési folyamat* molekuláris részleteit tárják föl.

E kiragadott példák csak illusztrációk, de nem csak a röntgensugár szóródása által föltárt kép méretei, vagy ezek részletei miatt izgalmasak: a molekuláris mozgások, eloszlások is megjelennek az értő szem előtt. A röntgensugárzás szórása a kristályt alkotó elektroneloszlás *térbeli* és *időbeli* állapot-

összegzésével azok *átlagát* mutatja meg a diffrakciós kísérlet eredményeként. Ennek közvetlen következményeként valójában nem egy molekula szerkezetéről kapunk információt, hanem az előbbi átlag tér- és időbeli *eloszlási képét* láthatjuk. Persze, megfelelő korlátokkal, de ez az eloszlás föllebbentheti a fátylat a szilárd fázisban ülő molekulák dinamikájának, egyes reakcióútjaiknak lehetőségeiről, vagy molekuláris mozgásoknak az irányáról is.

A kérdésekre adott válaszok

1. Az egykristályra eső röntgensugárzás hullámainak szóródása a kristályt alkotó elektroneloszlás (*tér-*) és (*időbeli*) állapotösszegeinek (*átlagát*) adja meg a szórt sugárzás foltjaiban. Ez az átlag nemcsak a közvetlenül nem látható világról ad információt, de egyes fogalmaink is más megvilágítást kapnak. Ennek illusztrációjaként a klasszikus kémia egyik alapvető fogalmával, a (sztöchiometriával), illetve annak e mikrovilág által föltárt valós jelentésével foglalkozom néhány, általunk újabban tanulmányozott kristály szerkezetét bemutatva. Az előadás másik része újabban végzett kísérleteinkből kapott eredményekkel a szerkezeti modellek (időfüggő viselkedésének) leírását mutatom meg.

2. A szórási kép optikai fölbontása elvileg az alkalmazott sugárzás fél hullámhossza. A praxisban „atomi fölbontás” alatt a szerves vegyületekben közönségesen előforduló atomok egymástól való elkülöníthetőségét értjük. Ez távolságokban kifejezve közönségesen a 0,84–1,2 Å (0,084–0,12 nm) közti fölbontási tartomány elérését jelenti, aminek elérhetősége erősen függ a kristály minőségétől is. A módszer dinamikus (azaz időfüggő) jelenségek (pl. szilárd fázisú reakciók követése, vagy kristályos aszociátumok bomlásának föltérképezése) tanulmányozására is alkalmas lehet.

3. A módszer föntebb vázolt alkalmazásai úttörők, a tanulmányozott és bemutatott rendszerek, ill. megközelítésük is világviszonylatban is egyedieknek mondhatóak.

Peptidfoldamerek „gépi kódja”: de novo hélixtervezés sztereokémiai mintázatokkal

Martinek Tamás–Fülöp Ferenc ■ Szegedi Tudományegyetem, Gyógyszerkémiai Intézet, www.pharm.u-szeged.hu/gyki

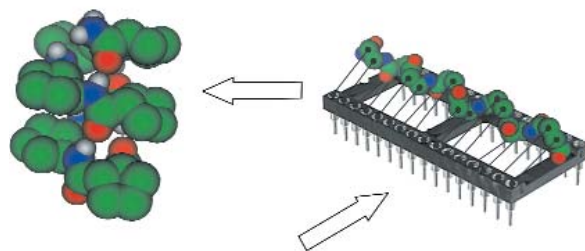
Az önstabilizált szerkezeti elemek vagy röviden *foldamerek* önrendeződési folyamatainak irányítása jelentős kihívás. Nagy érdeklődésre tart számot ez a terület, mivel az eredményül kapott biomimetikus szerkezeteknek többféle alkalmazásuk lehet a bioaktív anyagoktól a nanostruktúrák létrehozásáig. Az önrendeződő, β -aminosavakat tartalmazó peptidok a leginkább vizsgált molekulák közé tartoznak, mert számos másodlagos szerkezeti típust képesek szabályozható módon létrehozni.

A fő célkitűzésünk az volt, hogy általános összefüggést találjunk a lánc szte-

reokémiai mintázata és az indukált másodlagos szerkezet között. Ehhez definiáltunk egy kontextusfüggetlen bináris leíró paramétert az önrendeződésért felelős királis építőelemekre, majd megvizsgáltuk a deszkriptor mintázatait a már ismert másodlagos szerkezeteken. A felismert szabályszerűségek segítségével *de novo* terveztünk és szintetizáltunk helikális *foldamerszekvenciákat*. Az oligomereket molekulamodellezés, NMR-spekt-

roszkópia és cirkuláris dikroizmus spektroszkópia segítségével jellemeztük. Eredményeink szerint a bináris deszkriptor és

Peptidgerinc mint analóg számítógép



$[01]^\beta [10]^\beta [00]^\beta [01]^\beta [10]^\beta [00]^\beta [01]^\beta [10]^\beta$



a szabályok predikációs ereje megfelelő; a szabályok szerint tervezett oligomerek az irodalomban eddig nem ismert hélixeket formáltak, míg a kontrollszekvenciák nem

mutattak periodikus másodlagos szerkezetet.

Ezek a megfigyelések egy érdekes analógiát vetnek fel. A bináris sztereokémiai

deszkriptorok szekvenciája programként hajtódik végre a peptidgerincen mint analóg számítógépen, ahol a kimenet a másodlagos szerkezet.

A kérdésekre adott válaszok

1. A foldamerek olyan szintetikus oligomerek, amelyek utánozni képesek biomolekulák szerkezeti és/vagy funkcionális tulajdonságait: térszerkezetüket hierarchikusan és önrendeződő módon alakítják ki. A peptidfoldamerek a természetes α -peptid-szegmensek homologizált származékai lehetnek, és idetartoznak a legalaposabban vizsgált β -peptidek. Jól ismert a biológiai homokiralitás jelensége, eredetét gyakran összekötik az élet eredetével. Azonban a foldamerek konformációs és sztereokémiai viselkedése arra utal, hogy a homokiralitás túl szigorú feltétel az önrendeződéshez. Bemutattuk, hogy a peptidfoldamerek gerince mentén a sztereokémiai konfigurációkat megfelelő periodikus mintázatban kódolva az önrendeződés szabályozható és a másodlagos szerkezet racionálisan tervezhető. Ebben a vonatkozásban a polipeptidlánc analóg komputernek tekinthető, amely a bináris sztereokémiai utasítássorozatot (gépi kódot) végrehajtva rendezett kimenetet ad.

2. Mint ahogy a fehérjék biológiai funkciója szorosan ösz-

szekapcsolódik a térbeli szerkezetükkel, az őket utánozó funkcionális *foldamerek* térszerkezete is kulcsfontosságú és nagy befolyással van az esetleges bioaktivitásukra vagy magasabb szintű önrendeződésükre. Különösen fontos az aszimmetria térbeli megnyilvánulása már a monomerek szintjén, mert így jól használható eszközt ad a kezünkbe a térszerkezet tervezett kialakításához.

3. A *foldamerek* jelentősége abban áll, hogy egyrészt képesek fehérjékkel specifikusan kölcsönhatni, illetve önrendeződés útján nanostrukturált részecskéket alkotni. Hatóanyag-felfedezési szempontból az előbbi tulajdonság tarthat érdeklődésre számot. Bizonyos fehérje-fehérje kölcsönhatások nem, vagy nehezen befolyásolhatók kismolekulákkal. Ilyenkor a jól ismert antitestmegközelítés mellett a *foldamerek* merülhetnek fel mint az antitestek kötődését utánozó hatóanyag. Ennek egy példája, amikor a p53 tumorszupresszor és a hDM2 onkoprotein kölcsönhatását gátolták egy H14 hélix *foldamerrel*.

Fehérjék tánca

Gáspári Zoltán ■ ELTE, Kémiai Intézet, <http://www.chem.elte.hu/departments/protnmr>

Előadásomban az élet molekulái, a fehérjék a főszereplők, méghozzá olyan nézőpontból, amelyből talán kevesen ismerik őket. A mozgás az élet minden szintjén jelen van: az állatok mozgása nyilvánvaló, de a sejtek belseje is folyamatos áramlásban van. Ennél kisebb struktúrákat már nem tudunk közvetlenül megfigyelni, a sejtalkotók mozgása esetében a mégoly sok kísérleti adat értelmezésekor is a fantáziánk lép előtérbe. Bár az egyedi fehérjék, fehérjemodulok mozgását is csak közvetett módszerekkel tudjuk leírni, arra kívánok rámutatni, hogy az ezen a szinten kapott kép a valóságot tükrözi.

A fehérjék térszerkezetének ismerete elengedhetetlen működésük pontos megértéséhez. A térszerkezet felderítésének egyik legcélravezetőbb módja a röntgenkrisztallográfia, amely bár kismolekulák esetében immár mintegy 100 éve rendelkezésünkre áll, a fehérjék hatékony vizsgálata csak a XX. század második felében vált gyakorlattá.

A kristályban a fehérjék többé-kevésbé rögzítettek, kristallográfiával erről a „kimerévített” konformációról kapunk egy precíz, informatív, de alapvetően statikus képet. A fehérjék azonban nem merev

molekulák, erre utal, hogy működésük különböző fázisaiban „lencsevégre kapva” őket sokszor más-más, akár nagymértékben eltérő térszerkezetet kapunk. A sejt–sejt kapcsolatokat közvetítő integrinek, melyek a sejtek membránjába fűzve találhatóak, a villamos áramszedőjéhez hasonlóan rendelkeznek egy zárt és egy nyitott állapottal, utóbbiban kapcsolódnak a szomszédos sejteken, illetve a sejt közötti állományban lévő más molekulákhoz. Mintegy 20 éve képesek vagyunk oldatfázisban is térszerkezetet meghatározni NMR-spektroszkópia segítségével. Az oldatfázisban nyert térszerkezeti információk azonban a fehérjék első mozgásaiból adódóan kevésbé tűnnek precíznek, mint a röntgenkrisztallográfiából kapott adatok, és tipikusan több konformer is megfeleltethető nekik. Ezért egy szerkezetcsaládot kapunk, amely azonban nem tükrözi a molekula valós dinamikáját. A fehérjemolekulák ugyanis széles időskálán dinamikusak, különböző típusú mozgásaik mintegy 14 nagyságrendet ölelnek fel. Ez nagyobb időtartomány, mint egy szívdobbanás és az emberi élet hossza közötti különbség.

A fehérjék mozgásai számos módszerrel vizsgálhatóak, atomi szintű felbontás

azonban a kísérletes vizsgálati módszerek közül csak az NMR-spektroszkópia ad. A fehérjék mozgásai közül a leglassabbak az összetett folyamatok, mint például a feltekeredés, amelynek során a molekulák egy többé-kevésbé nyújtott állapotból indulva felveszik a működéshez szükséges, alacsony energiájú, kompakt térszerkezetüket. Ennél lényegesen lassabbak az alacsony energiájú, kompakt térszerkezetek mozgásai, amelyek esetében egy-egy kiterjedtebb molekularészlet mozdul el, ennek sokszor funkcionális jelentősége van. Végül több időtartományt ölelnek fel az ennél gyorsabb, tipikusan kisebb részeket, kötéseket érintő mozgásformák. A ps–ns időskálájú dinamikát NMR-spektroszkópiával atomi szinten jellemezhetjük. A kapott rendezettségi paraméterek a kötések mozgásainak kiterjedésére jellemzőek.

A mérések során kapott paramétereket a szerkezetcsalád számításakor felhasználva statikus képek sorozatát kapjuk, amelyek esetében az egyes egyedi szerkezetek kötései közötti különbségek megfelelnek a mérési eredményeknek. Az eset hasonló ahhoz, amikor a vágató ló mozgását állóképek segítségével elemezzük, és ebből következtetünk a mozgás valódi természetére. A fehérjék esetében az



egyedi kötésvektorok mozgásának paramétereit felhasználva olyan, ún. dinamikus sokaságot kapunk, ahol az egyes konformerek közötti különbségek nem bizonytalanságból fakadnak, hanem legjobb tudásunk szerint a valós dinamikát tükrözik. A dinamikus sokaságok előállításához használt módszer esetében a nukleáris Overhauser-effektusból származó térbeli és a relaxációs mérésekből kapott dinamikai paramétereket együttesen használjuk fel. A konkrét módszerben ügyelünk arra, hogy a különböző típusú paramétereket más-más méretű sokaságra vegyük figyelembe, míg a dinamikai paramétereket például akár 8 molekulára egyszerre vesszük figyelembe, a térbelieket páronként átlagoljuk a molekulákra.

A kutatócsoportunkban is vizsgált Tc5b becenevű molekula az egyik legkisebb ismert olyan fehérje, amely vizes oldatban jól meghatározott térszerkezettel rendelkezik. Kiváló modellrendszer a fehérjék stabilitásának és dinamikájának modellezésére, és nem mellesleg egyik származékát idén vezették be gyógyszerként a cukorbetegség gyógyítására. Több változatát is elkészítettük ennek a fehérjének, melyek közül az eredeti mellett egy stabilizált és egy destabilizált változatot mutatok be. Egyetlen, a hurokrégióban

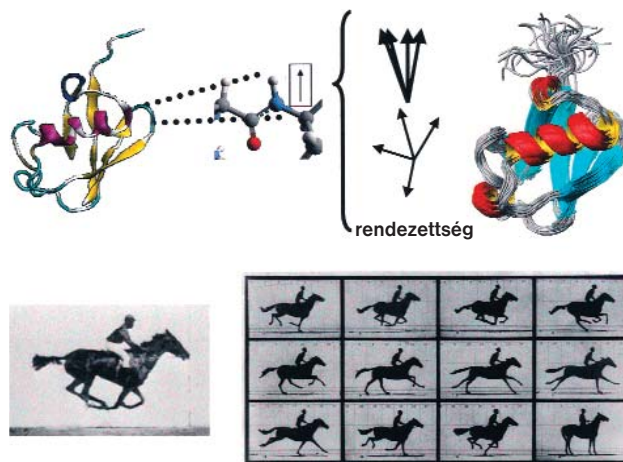
elhelyezkedő aminosav cseréje nem csupán a hőstabilitás, hanem a térszerkezet és a belső dinamika megváltozását is okozza.

A fehérjék szerepüket tipikusan nem önmagukban töltik be, hanem partnermolekulákkal, például egyéb fehérjékkel kölcsönhatásba lépve. Egy általunk is tanulmányozott bemutatott példa egy enzim és fehérjetermészetű gátlója, inhibitora közötti interakció. Az inhibitor egészen kicsinek számít a fehérjék között, és bár három diszulfidhíd is stabilizálja, igen jelentős mozgékonyt mutat a ps–ns időskálán. A partner kimotripszin lényegesen nagyobb nála, és emiatt nem is vizsgálható olyan részletességgel, mint az inhibitor, ezért a kölcsönhatást az inhibitor szemszögéből nézzük. Az inhibitor viszonylag kis részlete lép közvetlen kölcsönhatásba a partner enzimmel, mégis, NMR-spektroszkópiával követve a molekula egészében észlelünk változásokat.

A dinamikai vizsgálatok azt is megmutatták, hogy a szabad formában mért dinamika egy része megmarad a kötött állapotban is, tehát a két molekula nem csupán térben illeszkedik, hanem dinamikai értelemben is összeillik.

Összefoglalásul elmondható, hogy a fehérjék széles időskálán dinamikusak, ez a dinamika szorosan összefügg a működéssel, valamint a mai eszközökkel oldatfázisban atomi szinten jellemezhető.

Az NMR-spektroszkópiából származó térbeli és dinamikai paraméterek felhasználásával olyan dinamikus sokaságot kapunk, amely hűen tükrözi a molekula mozgékonyt, hasonlóan ahhoz, amikor a vágató ló mozgását képkockákként elemezzük



A kérdésekre adott válaszok

1. A mozgás az egyedi fehérjének szintjén számos időskálán megjelenik. A fehérjék dinamikája szoros összefüggésben áll működésükkel, ezen molekuláknak különböző funkcionális állapotoknak megfelelően több, lényegesen eltérő konformerje is lehetséges, a fehérje-fehérje kölcsönhatásokban pedig a partnermolekulák nem csupán térben, hanem dinamikailag is komplexen egymásnak. A fehérjék dinamikája a ps–ns időskálán ún. dinamikus sokaságok segítségével atomi szinten jellemezhető.
2. A fehérjék esetében a széles időskálán megjelenő dinamika a térszerkezettel összemérhető jelentőséggel bír a biológiai funkció kialakításában.
3. Ha képesek vagyunk atomi szinten jellemezni és megérteni a fehérjék belső mozgásait, akkor lehetővé válhat adott mozgékonyt rendelkező molekulák tervezése, s így kívánt tulajdonságokkal (enzimaktivitás, partnermolekula-aktiválás vagy -gátlás) rendelkező biomakromolekulák tervezése és előállítása.

Fehérjék másképp: rendezetlenség a proteomban

Tompa Péter ■ MTA SzBK Enzimológiai Intézet, <http://www.enzim.hu>

Az előadás célja annak bemutatása, hogy vannak olyan fehérjék, amelyek nem engedelmessé válnak a fehérjékkel kapcsolatban felállított klasszikus szabályoknak. Nincs hidrofób magjuk és katalitikus centrumuk, működésükhöz nem szükséges jól definiált térszerkezet, funkciójuk nem társul evolúciós konzerváltsághoz, egyes környezeti hatásokra rendkívül érzékenyek, másokkal szemben viszont szokatlanul ellenállóak.

A közelmúlt eredményei azt mutatják, hogy ezen „furcsa” fehérjék szerkezeti rendezetlensége funkcionális előnyöket jelent, a sejt alapvető folyamataiban játszanak szerepet és a genom jelentős része ilyen fehérjéket kódol. Az előadás a rendezetlen fehérjék szerkezeti sokféleségét, dinamikáját, szokatlan evolúcióját, sokrétű és gyakran inkább valószínűségi, semmint determinisztikus funkcióit mutatja be. Létük a fehérjék világában alapvető

funkcionális munkamegosztásra utal, amennyiben a rendezett – globuláris – fehérjék katalitikus, szerkezeti és receptor-funkciókat látnak el, míg a rendezetlen fehérjék elsősorban a szabályozásban vesznek részt. Az előadás végkövetkeztetése annak bemutatása, hogy a rendezetlen fehérjék léte, dinamikája, szerkezeti és funkcionális sokfélesége túlmutat a molekuláris biológia hagyományos determinisztikus szemléletén.



A kérdésekre adott válaszok

1. A hagyományos szerkezet-funkció összefüggés szerint a fehérjék működéséhez jól definiált háromdimenziós térszerkezetre van szükség. Újabban felismertük, hogy sok fehérje, illetve fehérjeszakasz nem rendelkezik ilyennel, hanem rendezetlen. Ezek a fehérjék nagyszámú alternatív szerkezet között fluktuálnak, mégis fontos funkciókat látnak el, elsősorban a jelátvitelben és a transzkripciós szabályozásban. Sok rendezetlen fehérje betegségekkel is kapcsolatban van. Ezeknek a fehérjéknek a szerkezeti-funkcionális jellemzése a molekuláris biológia új kihívása, ugyanakkor a fehérjékről alkotott nézeteink lényeges kibővülését eredményezi.

2. A rendezetlen fehérjék működésének lényege a dinamika, mivel statikus szerkezeti képpel nem lehet a funkciójukat értelmezni. Funkcióik fő megnyilvánulása vagy a partnerhez való kötődés és rendeződés, ami konformációs szelekció révén valósul meg, vagy a rendezetlenség közvetlen megnyilvánulása. Ez utóbbiakat „etropikus lánc” funkció-

nak hívjuk, lényegük, hogy a fehérje nagyszámú alternatíva közötti fluktuációja révén külső hatásokkal szembeni erőt fejt ki, ami a sejt alkotóinak plasztikusságot kölcsönöz. A fehérjék ilyen szintű megértéséhez a szerkezeti sokaság dinamikájának, vagyis az alternatív szerkezeteknek, illetve átalakulásuk kinetikájának pontos leírása nélkülözhetetlen.

3. A terület számos részterületén várok lényeges előrelépést. Új bioinformatikai eszközökkel jósolni tudjuk a rendezetlenséget és funkcionális következményeit. *Proteomikai* megközelítések nagyszámú ilyen fehérje azonosítását segítik elő. A szerkezeti vizsgálatok és funkcionális elemzések pontos leírását tesznek lehetővé, ami a szerkezet-funkció paradigmát lényegesen kiterjeszthetik. Mindezen eredmények odavezetnek, hogy a rendezetlen fehérjék és partnereik kötődését felhasználva új, fehérje-fehérje interakciókat gátló gyógyszereket leszünk képesek kifejleszteni.

Az élet édes szavai, avagy mit rejt a szénhidrátkód?

Somsák László ■ Debreceni Egyetem, Szerves Kémiai Tanszék, <http://szerves.science.unideb.hu/oktatok/sl/sl-hun.htm>

A biológiai információátvitel és -átadás alapfolyamatai a nukleinsavakhoz és fehérjékhez kapcsolhatók. Az intra- és intercelluláris felismerési jelenségek átfogó megértése azonban nem lehetséges pusztán a nukleotidok és az aminosavak már igen jól ismert kódrendszerének segítségével. A felnőttkorba lépő új tudományterület, a glikobiológia mind több és több bizonyítékot szolgáltat egy harmadik biológiai jelátviteli és felismerő rendszer létezésére és működésére. E rendszer kódszavait cukrok alkotják, az ezekből összeálló mondatok pedig a szénhidrát-felismerő fehérjék egyik speciális csoportja, a lektinek által olvashatók. A szénhidrátkód szerepe olyan alapvető jelenségekben kulcsfontosságú, mint például a sejtdadézis, a sejtosztódás kontakt gátlása, a patogének elleni immunvédelem, az ivarsejtek egymásra találása.

A sejtszintű felismerés kódjának igen szigorú követelményeket kell kielégítenie a

biokémiai affinitás, az információ félreérthetősége vagy éppen félremagyarázása terén. Ehhez igen nagy tárolókapacitás és ezzel együtt az egyszerű előállítás, illetve további módosítás lehetősége szükséges.

Az előadásban bemutatjuk, hogy a szénhidrátok milyen módon képesek a fenti el-

várásoknak megfelelni, mely statikus és dinamikus kémiai és sztereokémiai saját-ságaik biztosítják az egyes sejtek ujjlenyomatának kialakítását, illetve ezen ismeretek felhasználási potenciálját például szénhidrátalapú gyógyszerek kifejlesztésében.

A kérdésekre adott válaszok

- 1.** A szénhidrát-oligomerek információhordozó és -tároló kapacitása a legnagyobb a biológiailag fontos makromolekulák között, ami egy sejtszintű jelátviteli és azonosító kód létezésének az alapja. Ennek a kódnak vagy talán még inkább nyelvnek a megértése, egy adott sejt teljes szénhidrátkészletének, a *glikomnak* a feltérképezése és azok biológiai funkcióinak feltárása összemérhető jelentőségű a genom/proteom szerepének felderítésével, és a biológia teljes vertikumában új felismeréseket alapozhat meg.
- 2.** A szénhidrátok inherens kiralitása és multifunkcionalitása az alapja a kódrendszer variabilitásának, melyet kibővít a konformációs tér kitöltöttségén alapuló differenciális felismerés.
- 3.** A szénhidrátok jelentősége biokompatibilitásuk miatt sokrétű: diagnosztikumok, vakcinák, specifikus gyógyszerek tervezése, előállítás; gyógyszerek (sejt)specifikus célbajuttatása úgy, hogy közben a mellékhatások minimális szinten tarthatók.

Részletes reakciómechanizmusok felhasználásával elért sikerek a környezetvédelemben és a technológiában

Turányi Tamás ■ ELTE Kémiai Intézet, Reakciókinetikai Laboratórium, www.turanyi.eu

A kémiai folyamatok során a kiindulási anyagokból a termékek több száz, vagy akár több ezer reakciólépésen keresztül keletkeznek. A folyamat reakciókinetikájának vizsgálata magában foglalja annak

leírását, hogy melyek ezek a reakciólépések és azok sebessége hogyan függ a reakció körülményeitől, például a hőmérséklettől vagy a nyomástól. Mindezeket az ismereteket a részletes reakciómechaniz-

musok tartalmazzák. Ha egy kémiai folyamatra részletes reakciómechanizmus áll rendelkezésre, akkor meg lehet határozni azokat a körülményeket, amelyek esetén a folyamat környezetbarát módon meg-



végbe. Ipari folyamatok esetén a környezetvédelmi szempontok mellett fontos a technológiai optimalizálás is, ami biztosíthatja a gyártás gazdaságosságát. Ma már nagyon sok kémiai folyamat vizsgálatának egyik első lépése a pontos, részletes reakciómechanizmus meghatározása. Az előadás során több sikertörténetet ismertettünk, amelyekben fontos szerepet játszott a reakciómechanizmus alkalmazása.

Az ötvenes években az autóforgalom növekedésével az iparilag fejlett országokban nyaranta megjelent a fotokémiai szmog. Ennek kémiai oka, hogy a levegőbe került szénhidrogének és a levegő oxigénjének reakciójából, a napsugárzás és a nitrogén-oxidok katalitikus hatására, ózon és más légszennyezők keletkeznek. Hamar kiderült azonban, hogy a keletkező ózon mennyiségét a szénhidrogének és a nitrogén-oxidok mennyisége együtt határozza meg, és a folyamat lejátszódásához több órára van szükség. A részletes reakciómechanizmus alapján olyan számítógépes modellt lehetett készíteni, amely nemcsak a nagyvárosok levegőtisztaságának számítására alkalmas, de meg-

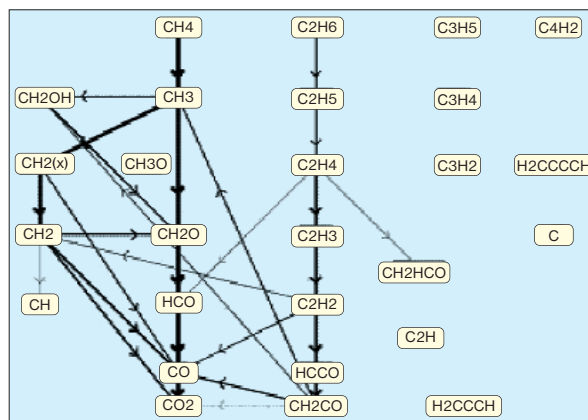
adja azt is, hogy a szennyezett városoktól akár több száz kilométerre milyen károsodás érheti a szántóföldi növényeket. A modell alapján optimalizálni lehet a levegőszennyezést csökkentő intézkedéseket.

Néhány évvel ezelőtt a földgáztüzelésű villamos erőművek nagy mennyiségű nitrogén-oxidot bocsátottak ki és ezzel jelentősen hozzájárultak a fotokémiai szmog kialakulásához. A földgáz égésének kémiaiáját és a nitrogén-oxidok keletkezését az égések során viszonylag jól ismerjük. A részletes reakciómechanizmus felhasználásával olyan módosításokat lehetett kidolgozni, amivel tizedrészére lehetett csökkenteni a nitrogén-oxidok kibocsátását. Ezeket a módosításokat végrehajtották a működő erőműveken és az új erőművek már ilyen elvek alapján készülnek.

A kőolaj árának ugrásszerű növekedésével még fontosabb lett a gépjárművek alacsony üzemanyag-

fogyasztása. Kevés üzemanyagot fogyasztó autók kevés szén-dioxidot bocsátanak ki, így kevésbé járulnak hozzá a globális felmelegedéshez is. A motorbenzin égésének kémiaiáját már eléggé jól ismerjük ahhoz, hogy ennek alapján az autómotorok működése optimalizálható legyen. A legújabb autómotorok sokkal gazdaságosabbak és ugyanakkor kevesebb szennyezőanyagot bocsátanak ki, mint az akár néhány évvel korábbiak.

A vegyületek egymásba alakulása a metán égése során



A kérdésekre adott válaszok

1. A reakciókinetika most már eljutott odáig, hogy több ezer reakciólépésnek ismerjük a sebességi együtthatóját, pontosabban a sebességi együttható hőmérséklet- és nyomásfüggését. További több tízezer reakció esetén ezekre az adatokra jó becslés áll a rendelkezésünkre. Ezek alapján részletes reakciómechanizmusokat lehet összeállítani. A kisebb részletes mechanizmusok jellemzően 50 anyagfajta 500 reakciólépését, a nagyobbak pedig 2000 anyagfajta 10 000 reakciólépését tartalmaznak. Ezek alapján számos tudományos és ipari szempontból fontos folyamatot lehet reálisan modellezni.
2. A kémiai reakciók a 3D térben játszódnak le úgy, hogy jellemzően minden pontban mások a koncentrációk, a hőmérséklet és esetleg a nyomás is. Fejlett matematikai és számítástechnikai eszközök ma már lehetővé teszik, hogy reális és részletes kémiával modellezzünk időben lezajló folyamatokat.
3. Ez a terület most éri el az első sikereit és robbanásszerű növekedése várható a közelebbi és távolabbi jövőben. A gyors növekedésnek a következők az okai:

– Egyre több ismeret gyűlik össze az elemi reakciók kinetikájáról. Gyorsan fejlődnek az elméleti kémiai és a kísérleti módszerek is, ezek alapján egyre pontosabban határozzák meg a kinetikai paramétereket és egyre több reakcióra.

– Egyre több ismeret gyűlik össze a magas hőmérsékletű folyamatokról, például a molekulák közötti energiaátadásról.

– Egyre növekszik a számítógépek sebessége, így évről évre egyre gyorsabb és pontosabb szimulációk válnak lehetségessé.

– A numerikus matematika fejlődése egyre gyorsabb és pontosabb számítási módszereket szolgáltat a merev parciális differenciálegyenletek megoldására. Jelenleg már lehet ipari szempontból fontos rendszerek modellezését elvégezni, de a rendszer geometriája gyakran egyszerűsített és a végeredmény még közelítő pontosságú. A fejlődés során bonyolultabb rendszereket, egyre jobb térbeli és időbeni felbontással, egyre pontosabban fognak szimulálni. Ez a hatékonyság és a szennyezőanyag-kibocsátás további jelentős javulásához vezet, aminek közvetlen pozitív hatásai vannak a környezetvédelemre.

Molekulák önszerveződése: időben és térben periodikus reakciók

Orbán Miklós ■ ELTE Kémiai Intézet, Nemlineáris Kémiai Dinamika Laboratórium, <http://www.chem.elte.hu/node>

Egy kémiai rendszerben a specieszek – ionok, molekulák – koncentrációja mind időben, mind térben rendeződhet, ha a reagáló anyagok közötti bruttó reakcióban (+) és/vagy (–) visszacsatolások érvényesülnek. A rendeződés eredménye a kémiai oszcilláció, más szóval a periodikus viselkedés.

Az oszcilláló kémiai reakciókban a rendszer egyes elemeinek koncentrációja és az ehhez kapcsolódó tulajdonságok, paraméterek periodikusan változnak az időskálán. Ha az oszcillációra képes reakciókban a rendszer keveredését megakadályozzuk, a visszacsatolások és a diffú-

zió kölcsönhatásában térben periodikus, dinamikus és stacionárius mintázatok jönnek létre. Az előadás a kémiai rendszerekben megvalósuló spontán önszerveződések kialakulásának feltételeit ismerteti és sor kerül egy-egy jellemző példa részletes bemutatására is.



A kérdésekre adott válaszok

1. Speciális tulajdonságokkal bíró kémiai rendszerekben – speciális feltételek teljesülése esetén – a molekulák makroszkopikus önszerveződése következik be, amely folyamán a kezdetben homogén rendszerek időben vagy térben szabályos (periodikus) struktúrákká rendeződnek. Időben periodikus struktúráként tekintjük az oszcilláló kémiai reakciókat (itt a koncentráció az időskálán periodikusan változik).

2. A térkoordináták mentén kialakuló periodikus koncentrációeloszlás 1, 2 vagy 3D formájú mintázatképződés kialakulásához vezet. Az időben és térben jelentkező koncentrációoszcilláció és rokon jelenségek (pl. káosz, multistabilitás, gerjeszthetőség) számos kémiai rendszerben megvalósul vagy megvalósítható, kialakulásuk törvényszerűségei tanulmányozhatók és megismerhetők.

3. Az így szerzett ismeretek felhasználhatók az élő és élettelen természetben (biológiai, technológiai, társadalmi folyamatokban) gyakran és sokkal bonyolultabb szinten megnyilvánuló periodikus jelenségek jobb megértésében és befolyásolásában.

Epilógus

Hollósi Miklós ■ ELTE, Kémiai Intézet Kiroptikai Szerkeztéviszsgáló Laboratórium, <http://szerves.chem.elte.hu>

Mit jelent a tér és az idő a biológiában? A tér a sejt, az idő a biokémiai reakciók óriási sebességével kapcsolatos. A legkisebb baktérium mérete 1 mikrométer körül van, protoplazmájában mintegy 800 millió (!) molekula található. A baktériumok kb. 70 súlyszázalék vizet tartalmaznak. A makromolekulák (fehérjék, nukleinsavak és poliszacharidok) mennyisége 22%, kb. 5000 féle makromolekula fordul elő a sejtekben. A szervetlen ionokból (1%) legalább 20 féle található a baktériumokban.

A növényi és állati sejtek sokkal nagyobb és bonyolultabbak. Mit jelent az idő? Az *E. coli* osztódásához 20 percre van szükség, a DNS-szintézis 1000 bázispár/s sebességgel folyik. Mindez csak a sejt hihetetlen szervezetsége mellett képzelhető el (a baktérium jól szervezett és vezérelt gyár, ahol molekuláris futószalagok juttatják el a molekulákat a megfelelő időben a megfelelő helyre). A jelen és a jövő egyik óriási feladata a sejtek csodálatos szervezetségének vizsgálata.

Összeállította: P. A.

Magyar vonatkozású kémia- és vegyipartörténeti évfordulók

Próder István

■ OMM Vegyészeti Múzeuma

5 ÉVE

2004-ben a Sanofi-Synthelabo egyesült az Aventisszel, ezzel Európa legnagyobb gyógyszervállalata jött létre Sanofi-Aventis néven. A vállalatcsoportnak tagja a Chino in is.

2004-ben a Messer Hungarogáz Kft. 25%-os kapacitásbővítést hajtott végre a TVK új Olefin-2 gyára és polietilénüzeme nitrogén és levegő ellátására.

2004 óta az Országos Műszaki Múzeum (OMM) fiiláléjaként működik a székesfehérvári Magyar Alumíniumipari Múzeum, OMM Alumíniumipari Múzeuma néven.

2004. máj. 1-jén a Nitrokémia Rt. (Balatonfüzfő) értékesítette lőporüzemét, egyúttal bezárta nitrocellulózüzemét.

2004 második félévében a TVK Rt. nagy sűrűségű polietilént gyártó új üzemében (HDPE-2) lefolytatták az üzembe helyezés munkálatait, az üzem termékei 2005 januárjától kereskedelmi forgalomba kerültek.

2004. nov. 4-én a MOL és a német E.ON Ruhrgas International képviselői partnerségi szerződést kötöttek a MOL gázüzletágának további közös működtetéséről.

2004. nov. 19-én a TVK Rt.-nél, Linde-technológiával épült Olefin-2 üzem elérte a mechanikai komplexitás állapotát és megkezdődtek üzembe helyezésének munkálatai.

2004. márc. 24-én hunyt el Kékedy László vegyész, a kolozsvári Babeş-Bolyai Tudományegyetem egyetemi tanára. A Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszéken oktatott, kutatásait az elektroanalitika, a termoanalitika és a félvezető-alapú gázszenzorok területén végezte. Az Erdélyi Múzeum Egyesületnél tudomány-szervező és tudomány-népszerűsítő feladatokat vállalt. A Múzeumi Füzetek főszerkesztői teendőit is ellátta.

2004. ápr. 13-án hunyt el Horváth Csaba



vegyészmérnök, egyetemi tanár. 1952-ben védte meg vegyészmérnöki diplomáját a Budapesti Műszaki Egyetemen. 1956 után a Farbwerke Hoechst AG-nél kapott állást, majd PhD-értekezését 1960-ban a J. W.

Goethe Egyetemen készítette el. 1964-től haláláig a Yale Egyetemen (New Haven) dolgozott. A nagy hatékonyságú folyadékromatográfia (HPLC) megteremtőjeként tartják számon. Kiemelkedő eredményeket ért el a fordított fázis alkalmazása, az első micropore HPLC-oszlop kifejlesztése, a kiszorításos preparatív HPLC, a nagy hatékonyságú kapilláris elektroforézis (HPCE), a kapilláris elektrochromatográfia (CEC), az ultragyors és az extrém hőmérsékletű elválasztások területén. A szerkesztésében megjelent könyvsorozat: High Performance Liquid Chromatography, Advances and Perspectives (New York, 1980) a szakterület alapvető forrásmunkája.

2004. júl. 11-én hunyt el Szűcs Miklós vegyészmérnök, címzetes egyetemi tanár, a Fővárosi Gázművek nyugalmazott műszaki igazgatóhelyettese. Az Óbudai Gázgyár üzemvezetője, majd főtechnológusa lett. 1969-től a Fővárosi Gázművek fejlesztési főmérnökeként, majd műszaki igazgatóhelyetteseként dolgozott. Szakterülete a kémiai technológia és energetika volt. Előkészítette a főváros földgázra történő áttárlását. Szakcikkei a tüzelőanyag-cellák alkalmazása témakörben jelentek meg.

10 ÉVE

1999-ben 100 millió Ft értékű fejlesztési programot valósított meg barcsi gyárában a Henkel Magyarország Kft.



1999 májusában a Nitrogénművek Rt. megvásárolta a nádudvari Hajdúság Agrár-
ipari Rt. agrokémiai központját. Ezzel
40 ezer tonnás raktárhoz jutott.

1999-ben a Gyógyszerkutató Intézet Kft. tel-
jes tulajdonát az IVAX Corp. floridai
gyógyszercég vásárolta meg. Kezdetben
a Richter Rt. 1/6 tulajdonrészt megtar-
tott, de év végére a Richter Rt. része az
IVAX hollandiai leányvállalatához került.

1999. július 12-én adták át a TVK Rt. Biafol
Üzletághoz tartozó BOPP III. üzemet.
A hétmilliárd Ft-os beruházás 1997-ben
kezdődött, az üzem kapacitása 15 ezer
t/év.

1999 júliusában elkészült a Dorogi Hulla-
dékégető dioxinmentesítőjének máso-
dik lépcsője. A német kivitelezésű beru-
házás értéke 500 millió Ft volt.

1999-ben befejeződött egy kapacitásbőví-
tés a TVK Rt. olefingyárában. A gyár eti-
léntermelése 290 ezer t-ról 350 ezer t-ra,
propiléntermelése 140 ezer t-ról 180 ezer
t-ra emelkedett.

1999 szeptemberében a Budapesti Vegyi-
művek Rt. leállította a növényvédőszer-
gyártást a vállalat Kén utcai telepén.

1999. ápr. 20-án hunyt el Nagy Lajos György,
a BME Vegyészmérnöki Karának pro-
fesszora, tudományos és nemzetközi
dékánhelyettes (1979–82), a kar dékán-
ja (1982–88). A Radiokémia és a Felületek
fizikai kémiája tárgyakat adta elő, a
magkémiai és az adszorpciós vizsgálatok
terén nemzetközileg elismert eredmé-
ményeket ért el.

1999. nov. 1-jén hunyt el Cornides István
fizikus, az MKE Tömegspektrometriai
Társaságának örökös tiszteletbeli elnöke.
Ő tervezte és építette az első magyar-
országi, dinamikus elven működő tö-
megspektrométert és lerakta az alkalmazott
tömegspektroszkópiái kutatás
alapjait.

15 ÉVE

1994 áprilisában a Human Oltóanyag-ter-
melő és Gyógyszergyártó Rt. és a Hoechst
Frankfurt am Main egyik leányvállalata,
a Behringwerke AG szerződést írt alá a
vérplazmából előállított készítmények
gyártásáról. A gyártáshoz Gödöllőn 500
millió Ft-os beruházást hajtottak végre.

1994 áprilisában a Pharmavit Rt. Lengyel-
országban leányvállalatot alapított.

1994 elején az Alkaloida Vegyészeti Gyár
Rt.-nél 10 ezer m² alapterületű tablettá-
üzem építését fejezték be.

1994. ápr. 21-én a Phylaxia-Sanofi Oltó-
anyagtermelő Rt.-nél 60 milliós beruhá-

zással új állatházak és laboratóriumokat
adtak át.

1994. júl. 14-én avatták fel a Dorogi Hulla-
dékégetőmű új hulladékvizsgáló labo-
ratóriumát.

1994 októberében a magyar származású
kémia professzornak,
Oláh Györgynek adták
át a kémiai Nobel-díjat:
az indoklás szerint „a
karbokation-kémiához
való hozzájárulásért”.
Oláh György 1927. máj.
22-én született Buda-



pesten, a Piarista Gimnáziumban érettsé-
gizett. A Műegyetemen folytatta ta-
nulmányait, majd a Zemplén Géza ve-
zette Szerves Kémia Tanszéken végzett
kutatásaiért nyerte el a kémiai tudomá-
nyok doktora címet. 1954-ben az akkor
létesített Központi Kémiai Kutató Intézet
igazgatóhelyettesévé nevezték ki.
1956-ban külföldre távozott, előbb ka-
nadai, majd egyesült államokbeli egye-
temeken dolgozott. Clevelandben két
egyetem egyesítésében is részt vett. Je-
lenlegi munkahelyén, a Dél-kaliforniai
Egyetemen kutatóintézetet létesítettek
számára. Az USA Nemzeti Tudományos
Akadémiájának tagja, az MTA tisztelet-
beli tagja. A pozitív töltésű szénhidrogé-
nekkel kapcsolatos kutatásairól több
mint 1100 publikációban számolt be.
Szabadalmainak száma több mint 100.

1994 novemberében a Richter Gedeon Rt.
szerkezetkutatási laboratóriumában meg-
kezdte működését az ország első 500
MHz-es mágneses magrezonancia spekt-
rométere (NMR).

1994 decemberében megkezdődött a pró-
baüzem a MOL Rt. almásfüzitői új fla-
kongyártó és -kiszerező üzemében.

1994. júl. 7-én hunyt el Ötvös Dániel ve-
gyészmérnök, a Magyar Vegyészeti Mú-
zeum egyik szervezője. 1901. ápr. 27-én
született Kolozsvárott, a húszas évek
mérnökgenerációjának kiemelkedő alak-
ja volt. A Műegyetemen Putnoky László
mellett tanársegédként kezdte pályáját,
majd több ipari üzem irányítójaként
dolgozott: a Hungária Műtrágya- és Kén-
savgyárban, a szabadkai Zorka Gyár-
ban, a Műtrágya és Erdőtakarmány Gyár-
ban, az Ipari Robbanóanyaggyárban,
Peremartonban, majd Szolnokon a Ti-
szamenti Vegyiművekben. 1961–62-ben
döntő szerepe volt a Magyar Vegyészeti
Múzeum megszervezésében, amely 1963-
ban meg is kapta működési engedélyét.
Gazdag életútja során megszervezte a
Nyugdíjas Kémikusok Körét, titkára volt

az MTA Szervetlen Kémiai Technológiai
és Vegyi Környezetvédelmi Munkabi-
zottságának.

1994. okt. 5-én hunyt el Szőr Péter fizikus,
a volt Gumiipari Kutató Intézet igazga-
tóhelyettese. Hozzájárult a gumiipari
vizsgálati módszerek korszerűsítéséhez,
számos új, elsősorban más anyagokkal
társított gumigyártmány előállításával
foglalkozott. Nagy szerepe volt a magyar
gumiipar műszaki fejlesztésében.

20 ÉVE

1989. jan. 1-jén jegyezték be a cégbíró-
ságon az Akropolisz Kft.-t. A tulajdonosok
a BVK (ma: BorsodChem Zrt.), a Buda-
pesti Szeszipari Vállalat és a görög Arva-
nitisz cég. A Kft. PVC csomagolóanya-
gokat, üdítőitalok flakonjait, illetve pa-
lackok alapanyagát gyártja.

1989. febr. 4-én kezdődött meg a termelés
a TVK harmadik polipropilénüzemé-
ben.

1989. jún. 13-án új gyárat avatott a
CHINOIN a Miskolchoz tartozó Csanyik-
völgyben. A csúcstechnológiának számí-
tó injekciógyártó gépsor termelése évi
150 millió ampulla.

1989. jún. 21-én vegyesvállalati szerződést
írt alá extrudált polisztirol gyártására a
Nitrokémia, a Chemolimpex és a Dow Che-
mical.

1989. jún. 29-én megkezdődött a próba-
üzem a TVK polipropilén alapanyagú
szóttzsákgyártó üzemében.

1989. júl. 7-én avatták fel a Pannonplast
csepeli gyárat, ahol PVC csőköti idom-
okat gyártanak, valamint kozmetikai
csomagolóeszközöket állítanak elő.

1989. júl. 27-én a TVK a német BASF Salz-
gitter céggel kis sűrűségű polietilént gyár-
tó üzem vásárlásáról írt alá szerződést.
A gyár 60 000 t polietilént állít elő évente.

1989. aug. 2-án hozta létre a Varga József
Alapítványt a BME Vegyészmérnöki Kara.
Az alapítvány nyitott, fő célja a korszerű
vegyészmérnök-képzés támogatása.

1989. aug. 6-án kezdte meg a folyamatos
termelést az akkori DKV (ma: MOL Zrt.
Dunai Finomító) új fumársavüzeme. A
világbanki hitelből 870 millió Ft-os költsé-
gessel, amerikai licenc alapján létesített
üzem termékét üdítőitalok készítéséhez,
élelmiszerek savanyításához használják
fel.

1989. szept. 5-én teljes üzemben kezdett
termelni a DKV átalakított maleinsav-
anhidrid-üzeme.

1989 szeptemberében készült el Dorogon a
három nagy budapesti gyógyszergyár



(Richter Rt., Chinoín, EGIS) közös leányvállalata, a veszélyeshulladék-égetőmű.

1989. szept. 18-án volt a Pharmavit Rt. veresegyházi telephelyének műszaki átadása. Az Rt.-t 1988-ban a svájci HCH Pharma cég, a Chinoín, a Gyógyért, az Interág és a Budapest Bank hozta létre gyógyszer pezsgőtabletták előállítására.

1989. aug. 10-én hunyt el **Bartha Zoltán**, az egykori Gumiipari Kutató Intézet igazgatója. Fő kutatási területe a gumi-textil rendszerek vizsgálata, gyakorlati alkalmazása volt. Az általa kidolgozott eljárás a Bartha-féle kordfárasztási módszer néven terjedt el.

25 ÉVE

1984 első negyedévének végén a Borsodi Vegyi Kombinátnál (ma: BorsodChem Zrt.) két és egy negyed milliárd forintos beruházással három új termelőegység kezdte meg a termelést: a műanyag-feldolgozó, a növényvédőszer- és a gyógyszeripari intermediereket előállító üzem.

1984 augusztusában elkészült a szegedi szénhidrogén-medencében az a harmincezer m³-es tartály, amely az ország egyetlen propán-bután gázellátását segíti elő. A beruházás költsége csaknem 700 millió Ft volt.

1984. aug. 17-én Százhalombattán felavatták a Dunai Finomító katalitikus krakk-üzemét.

1984. okt. 15-én állt le Óbudán a 71 éves gázgyár, amellyel lezárult a hazai gázipar egyik szakasza, a szénalapú városi gázgyártás.

1984-ben megkezdődött a termelés a Péti Nitrogénművek kombinált salétromsav-üzemében. A japán (Sumitomo) tervezésű üzem 60 kt/év híg sav (60%), vagy 30 kt/év tömény sav (98%) előállítására alkalmas.

1984-ben adták át a napi 5500 m³ ipari szennyvizet tisztító telepet a tiszavasvári Alkaloida Vegyészeti Gyárban.

1984 decemberében a Nitrokémia Ipartelepken munkába állt a habosított polisztirolüzem.

1984. jún. 12-én hunyt el **Freund Mihály** vegyészmérnök, akadémikus, egyetemi tanár, a magyar szénhidrogén-kémiai tudományos kutatás egyik megalapítója. 1948-ban ő alapította a Magyar Ásványolaj- és Földgázkísérleti Intézetet. Az intézetet 1997-re felszámolták.



30 ÉVE

1979. márc. 30-án adták át a Borsodi Vegyi Kombinát (ma: BorsodChem Zrt.) PVC III. gyárát. A beruházás összege 11,3 milliárd Ft volt. A polimerüzem technológiáját és fő berendezéseit a japán Shintetsu cégtől vásárolták, kapacitása 150 kt/év szuszpenziós PVC.

1979. jún. 1-jén adták át a Tiszai Vegyi Kombinát I. számú polipropilén gyárát. Az üzem teljesítménye: 40 kt/év PP. Az eljárást a Hercules Inc. (USA) cégtől vásárolták, a berendezések zömét a Lurgi cég szállította.

1979. máj. 23-án hunyt el **Vajta László** vegyészmérnök, akadémikus, a Budapesti Műszaki Egyetem Kémiai Technológiai Tanszékének egyetemi tanára. Kőolajfeldolgozó-ipari fejlesztőtevékenysége számottevő. Jelentős eredményeket ért el a kenőolajok, kenőolaj-adalékok előállításában, a kemény bitumenek gyártásában, a petrolkémiai aromások gyártásában.

1979. júl. 31-én hunyt el **Issekutz Béla** orvosprofesszor, gyógyszerkutató, a SOTE Gyógyszertan Tanszékének volt vezetője.

1979. okt. 28-án hunyt el **Csűrös Zoltán** vegyészmérnök, akadémikus, egyetemi tanár. Az 1943–44. tanévben a Gépész- és Vegyészmérnöki Kar dékánja, 1946 és 1949, majd 1957 és 1961 között a Budapesti Műszaki Egyetem rektora volt. Alapításától vezette a Textilkémiai, későbbi nevén Szerves Kémiai Technológiai Tanszékét. Jelentős eredményeket ért el a szál- és rostkémia, illetve -technológia, a heterogén katalízis és a szerves szintézisek területén.



40 ÉVE

1969. szept. 27-én nyílt meg Zalaegersze- gen a Magyar Olajipari Múzeum.

1969-ben vezették be a többlépcsős oktatási rendszert a felsőfokú vegyészképzésben.

1969. jún. 1-jén hunyt el **Magyar Károly** vegyészmérnök. A Chinoín Gyógyszer- gyárban, majd a Gyógyszeripari Kutató- intézetben az antibiotikumgyártás fejlesztésén munkálkodott. Hosszú időn át végezte a Magyar Kémikusok Lapja felelős szerkesztői teendőit.

1969. nov. 6-án hunyt el **Balló Rudolf** vegyész, a Budapesti Műszaki Egyetem Mű-

anyag- és Gumiipari Tanszékének első professzora. 1922-ben Isola Művek Rt. néven üzemelt hozott létre, ebben gyártottak hazánkban először műanyagot.

50 ÉVE

1959-ben a Nagynyomású Kísérleti Intézet tervei alapján Pétfürdőn megkezdődött a furfúril-alkohol gyártása. A terméket számos területen alkalmazták, így oldószerként vagy gyantaalanyagként. Továbbhidrogénezésével tetrahidrofurfúril-alkohollá alakították. Az üzemeltetést 1992-ben leállították.

1959. febr. 27-én kezdték meg a Hungária Vegyiművekben egy 600 t/év kapacitású kísérleti PVC-üzem próbaüzemeltetését. A kísérleti üzemben nyert adatokat nem használták fel a hazai termelőüzem létesítésénél.

1959 februárjában a Hungária Vegyiművekben üzemszerű termelésbe állították hazánk első 300 t/év kapacitású kaprolaktámüzemét.

1959-ben üzembe helyezték a Magyar Viscosagyárban az ország első szintetikus- szál-gyártó üzemét. Az egykori Német Demokratikus Köztársaságból vásárolt eljárással és berendezéssel kezdődött meg a PA-vágottszál gyártása.

1959 tavaszán avatták a Veszprémi Vegyipari Egyetem (ma: Pannon Egyetem) első műszaki doktorait.

1959. máj. 27-én hunyt el **Tuzson Pál** vegyészmérnök, gyógyszerkutató. Munkásságát **Zechmeister László** mellett kezdte, majd a 30-as évek végétől gyógyszeripari kutatásokkal foglalkozott. 1953-ban megszervezte a Gyógyszeripari Kutató Intézet Növénykémiai Osztályát, melyet haláláig vezetett.

60 ÉVE

1949-ben a József Nádor Műszaki Egyetem neve az 1949. évi XXII. törvény alapján Budapesti Műszaki Egyetemre (BME) változott. A BME-n az 1934 óta a gépészekkel közös kart alkotó vegyészek önállósultak és megalakították az egyetem Vegyészmérnöki Karát.

1949-ben jelent meg **Széki Tibor** „Gyógyszerészi kémia: Szerves vegyületek csoportjába tartozó gyógyszerkészítmények” c. kétkötetes munkája, melyet **Széki** előadásai alapján állított össze **Végh Antal** és **Kovács László**.

1949-ben jött létre a Borsodi Nitrogénművek Nemzeti Vállalat. 1952-ben a gyár Sajómenti Vegyiművek néven szerepelt,



majd 1954-ben a Borsodi Kokszművekkel vonták össze, ezzel megalakult a Borsodi Vegyi Kombinát (ma: Borsod-Chem Zrt.).

1949-ben alapították a sajóbabonyi Észak-magyarországi Vegyiműveket.

1949-ben alakult meg a Nagynyomású Kísérleti Intézet. Később: Magyar Szénhidrogénipari Kutató-, Fejlesztő Intézet, majd Nitroil Vegyipari Termelő-, Fejlesztő Közös Vállalat (ma: Huntsman Co., USA).

1949-ben Magyaróváron a timföldgyár közelében megkezdték az első hazai műkorundgyár építését, amelyben a termelés 1950 szeptemberében indult meg. 1951-ben a timföld- és műkorundgyárat egyesítették Magyaróvári Timföld és Műkorundgyár néven. 1991-ben állami vállalatból társasággá alakult, 1995-ben privatizálták (mai neve: Timföld és Műkorund Zrt.)

1949-ben a felsőoktatási reform a tudományegyetemi vegyészképzést kilenc, majd tíz félévre emelte.

1949. ápr. 23-án jelent meg a 3600/1949. Korm. rendelet, amely ipari kutatóintézetek, központi kutatólaboratóriumok és kutatási bizottságok létrehozásáról intézkedett. Öt új intézet jött létre: a Vasipari Kutató Intézet, a Szerves Vegyipari Kutató Intézet, a Szervetlen Vegyipari Kutató Intézet (1949. jún. 8-tól Nehézvegyipari Kutató Intézet), a Hőtechnikai Intézet és a Papíripari Kutató Intézet.

1949. máj. 16-án az oktatási reform kapcsán a budapesti tudományegyetemen a Bölcsészettudományi Karról leválasztották a Természettudományi Tanszékét és felállították az önálló Természettudományi Kart (rövidítése: TTK).

1949. aug. 19-én jelent meg az 1949. évi XXIII. törvény, amely alapján létrejött a Miskolci Nehézipari Műszaki Egyetem. Az egyetem neve 1990. július elsejével Miskolci Egyetemre (ME) változott.

1949 szeptemberében megkezdődött az oktatás a Veszprémi Egyetemen, mint a Budapesti Műszaki Egyetem kihelyezett Nehézvegyipari Karán. Ezt követően az 1951. szept. 9-én közzétett 1951. évi 25-ös számú törvényerejű rendelet kimondta, hogy a kar kiválik a BME szervezetéből és Veszprémi Vegyipari Egyetem elnevezéssel önálló egyetemenként működik. (Az egyetem neve ma Pannon Egyetem, amely Gazdaságtudományi, Mérnöki, Műszaki Informatika és Tanárképző Karokból áll.)

1949. okt. 31-én az MTA rendes és levelező tagjainak egy részét jogfosztó jellel

tanácskozó taggá minősítették vissza, gyakorlatilag megfosztva őket tagságuktól. Az érintettek között sok kémikus is volt, pl. *Bodnár János, Doby Géza, Gróh Gyula, Náray-Szabó István, Plank Jenő*. A jogfosztó rendelkezést 1989-ben hatályon kívül helyezték és a kizártak, valamint átminősítették tagságát folyamatosnak nyilvánították.

70 ÉVE

1939-ben a Goldberger-gyár anyagi támogatásával Textilkémiail Tanszék alakult a Műegyetemen, melynek megszervezésével és vezetésével Csűrös Zoltánt bízták meg.

1939-ben a Chinoiban előállították a nagy jelentőségű szulfonamidkészítményt, az Ultraseptylt.

1939-ben kapta meg vegyész-mérnöki oklevélét *Pogány Judit*, az első vegyész-mérnök-hallgatónő Magyarországon.

1939. ápr. 14-én hunyt el *Winkler Lajos* vegyész, gyógyszerész, akadémikus, a Budapesti Tudományegyetem I. számú Kémiai Intézetének professzora, a magyar analitikai kémia elismert, nemzetközi hírű képviselője. Számos új analitikai módszert fejlesztett ki. A vízben oldott oxigén meghatározására kidolgozott módszerét mind itthon, mind külföldön korszerűsített formában ma is használják.

1939. szept. 30-án hunyt el *Sigmond Elek* vegyész-mérnök, akadémikus, a talajtan elismert művelője. 1908-ban megalapította és 30 éven át vezette a Műegyetem Mezőgazdasági Kémiai Technológia Tanszékét. Vizsgálati módszereivel megteremtette a talajjavítás tudományos alapjait.

75 ÉVE

1934. jún. 11-én alakult meg a Pécsi Kokszművek Rt. Az építkezés 1934 augusztusában indult meg a Didier Werke AG tervei alapján.

1934. szept. 29-én alakult meg a Bauxit Ipar Rt. Ez az önálló részvénytársaság lett hazánk első timföldgyárának, a Magyaróvári Timföldgyárnak a tulajdonosa. A magyaróvári gyárba a bernburgi Chemische Fabrik Dr. H. Wagner und Co. üzem leállított timföld-hidrát-gyártó berendezését vásárolták meg 1933-ban.

1934. okt. 7-én átszervezéssel megalakult a József Nádor Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, amelyet a József Műegyetem, a Soproni Bánya-, Kohó- és

Erdőmérnöki Kar, az Állatorvosi Főiskola, a Közgazdasági és Mezőgazdasági Kar egyesítésével hozták létre.

1934. dec. 8-án helyezték üzembe a Péti Nitrogén Műtrágyagyár Rt. kísérleti hidrogénező üzemét. Az üzemet *Varga József* szabadalma alapján tervezték, amely napi 10 t kátrányolaj gőzfázisú hidrogénezését végezte motorhajtóanyagok előállítására céljából. A kísérletek alapján a szabadalom hasznosítására 1935. okt. 21-én részvénytársaságot alapítottak, Magyar Hydrobenzin Rt. néven. A gyártás három éven át folyamatos volt, akkor azonban a zalai kőolajmezők felfedezése a kátrányolaj nagy nyomású hidrogénezésével való motorhajtóanyag-gyártást gazdaságtalanná tette.

80 ÉVE

1929 szeptemberében helyezték üzembe a Nitrokémia Ipartelepeken, Balatonfűzfőn, a trinitrotoluolgyárat.

1929. szept. 1-jén Peremartonban toronyrendszerű, a Lurgi-féle intenzív eljárás szerint működő kénsavgyárat helyezték üzembe.

1929-ben a rendszeres kutatómunka eredményeképpen kibontakozott a Zemplén-iskola újabb, nagyszabású eredménye, az ún. „higany-acetátos módszer”, mely mind a glükozidok előállítására, mind az oligoszacharidok szintézisére alkalmas volt. Ezzel



Zemplén Géza laboratóriumában

a módszerrel **Zemplén Géza** munkatársaival (*Gerecs Árpád, Bruckner Zoltán, Sz. Nagy Zoltán*) számos oligoszacharidot állított elő.

1929-ben hunyt el *Helvey Tivadar* vegyész, a magyar kémiai ipar egyik úttörője. 1887-ben lépett be *Weil József* építőanyag-kereskedési és kátrányvegyészeti vállalatához. Ebből fejlődött ki a „Dr. Helvey Tivadar Vegyészeti Gyár”, a KEMIKÁL Építőipari Rt. jogelődje.

90 ÉVE

1919-ben a Budapestre költözött pozsonyi és kolozsvári egyetem hallgatói részére az Állatorvosi Főiskolán *Gróh Gyula* tartott kémia-előadásokat három éven át. Ezen a kurzuson a két egyetem orvos-tanhallgatói, illetve a matematika-termesztudományi kar hallgatói vettek részt.



1919. ápr. 28-án a Selmecebányáról elmenekült Bányászati és Erdészeti Főiskola Sopronban, a volt Károly-laktanyában megkezdte működését. Ideiglenes helyéről 1922-ben átköltözött végleges helyiségeibe, a volt soproni honvéd főreáliskola épületébe. E helyen mint Bányamérnöki és Erdőmérnöki Főiskola működött 1934-ig, ettől kezdve a József Műegyetemmel összevont egyetem Bányá-, Kohó- és Erdőmérnöki Karaként folytatta működését 1946-ig. A főiskolán a következő kémiai tanszékek voltak: a Kohómérnöki Osztályon az Általános és Elemző Vegytan Tanszék, amelyet *Proszta János* vezetett, az Erdőmérnöki Osztályon az Erdészeti Vegytan Tanszék *Romwalter Alfréd* vezetésével.

1919. ápr. 8-án hunyt el *Eötvös Loránd* fizikus, egyetemi tanár, miniszter, az MTA rendes tagja, a rendszeres kísérleti- és elméleti fizikai kutatások első hazai nagy művelője. Heidelbergben végezte tanulmányait *Bunsen*, *Kirchhoff* és *Helmholtz* mellett. *Jedlik Ányos* utódaként a budapesti tudományegyetem kísérleti-fizika-professzora lett, tanszékét haláláig vezette. Elnöke volt az MTA-nak, alapítója és első elnöke a Matematikai és Fizikai Társulatnak, 1894–1895-ben vallás- és közoktatásügyi miniszter. Folyadékok felületi feszültségével kapcsolatban 1886-ban megfogalmazta az Eötvös-szabályt. A gravitációs tér térbeli változásainak mérésére szerkesztett Eötvös-inga révén vált világhírűvé.

100 ÉVE

1909 januárjában megjelent *Zemplén Géza* és a Nobel-díjas *Emil Fischer* közös tanulmánya „A cellobióz és ozonjának viselkedése néhány enzimmal szemben” címmel Selmecebányán, az Erdészeti Kísérletek című szaklapban, valamint a Heidelbergben kiadott *Liebig's Annalen der Chemie*-ben. *Zemplén Géza* selmecebányai főiskolai adjunktus *Emil Fischer* híres berlini egyetemi szerves kémiai intézetében két évet (1908–1910) dolgozott, s ez alatt az idő alatt négy, *Fischerrel* együtt írt dolgozata jelent meg.

1909. jan. 30-án Erdélyben – Nagysármáson – kálisók utáni kutatás közben nagyméretű földgázforrásra bukkantak. Hasznosítására különböző tervek készültek. *Szarvasy Imre* és *Pfeifer Ignác* a földgázban levő metán kémiai értékesítésére 1910-ben metánklórozó eljárást dolgozott ki, amelynél a klórozást cse-

des elektromos kisülések közben végezte, nagy mennyiségű metil-kloridot állítottak elő. Eljárásukat a magyar, német és amerikai szabadalmi hivatalok is oltalmukba vették. (1910. évi 51.111. sz. magyar szab.)

1909. nov. 28-án elkészült a József Műegyetem új épületegyüttese a lágymányosi (Gellért tér – Dunapart – Promontor u., ma a Budafoki út és a Bertalan Lajos u. által határolt) telepen. A központi főépület *Hauszmann Alajos*, a könyvtár és egyéb épületek *Pecz Samu* tervei alapján épültek 1906-ig. *Wartha Vince* műegyetemi rektor e napon, az 1909/1910-es tanévet megnyitó beszédében jelezte az építkezés befejezését. A zárókövetételére a király jelenlétében 1910. máj. 25-én került sor.

1909. máj. 10-én hunyt el *Böckh János* geológus, a Földtani Intézet igazgatója, a hazai állami kőolajkutatás kezdeményezője, az első sikeres erdélyi olajkútúrás (1893) irányítója.

1909. júl. 26-án hunyt el *Schenek István* akadémikus, a Selmecebányai Bányászati és Erdészeti Akadémia Kémia Tanszékének professzora. Tanártársával, *Farbaky Istvánnal* együtt tökéletesítette az ólomakkumulátort.

110 ÉVE

1899-ben hozták létre a Fiumei Vegykísérleti Állomást, amely a korábban szervezett állomásokhoz hasonlóan elsősorban mezőgazdasági termeléssel kapcsolatos kémiai kutatásokat folytatott.

1899. máj. 20. és 25. között Bécs után a következő, a II. Nemzetközi Acetilén Kongresszust Budapesten tartották. A kongresszus 215 külföldi és hazai szakemberre a Városháza dísztermében ülésezett, ezzel egyidejűleg a városligeti Iparcsarnokban acetilénkiállítást rendeztek. A kongresszuson a hazai kutatók közül előadást tartott *Bittó Béla*, *Grittner Albert*, *Pfeifer Ignác*, *Wartha Vince* és *Zipernowsky Fülöp*.

1899. márc. 7-én született *Vastagh Gábor* vegyészmérnök, az Országos Közegészségügyi Intézet főigazgatója. A gyógyszerellenőrzés elméletének és gyakorlatának élvonalában dolgozott. *Schulek Elemérrel* fejlesztették ki a gyógyszerkészítmények hazai törzskönyvezésének alapelveit. Tudományos munkássága során behatóan foglalkozott a vitaminokkal.

1899. ápr. 11-én született *di Gléria János* vegyész, egyetemi tanár. Első elnöke

volt a Magyar Agrártudományi Egyesület Talajtani Társaságának. Megszervezte az első mezőgazdasági izotóplaboratóriumot.

1899. máj. 29-én született *Cholnoky László* egyetemi tanár, akadémikus, a pécsi egyetem kémiai intézetének igazgatója. Jénában a Carl Zeiss Intézet laboratóriumában, Grazban *Fritz Pregl* professzornál megismerkedett a szerves mikroanalízis legkorszerűbb módszereivel. Pécsen *Zechmeister László* professzorral végzett kutatásai középpontjában a karotinoidok álltak. A karotin katalitikus hidrálásával igazolták annak képletét. Az oszlopkromatográfias módszert hatékony szerves kémiai elválasztással fejlesztették.

1899. júl. 20-án született *Náray-Szabó István* vegyészmérnök, egyetemi tanár, az MTA tagja. Fizikai kémiai, szerves kémiai, kristályszerkezeti kutatásokkal foglalkozott. Kristálykémia c. könyvét magyar kiadása után angolul, Szerves kémia I–III. c. könyvét németül és oroszul is megjelentették.

120 ÉVE

1889-ben *Than Károly* „A volumetrikus normáldatok készítéséről” című, a Matematikai és Természettudományi Értesítőben írott értekezésében faktorbeállításra ajánlotta a kálium-hidrogén-jodátot a tioszulfát-mérőoldat esetében. A róla „Than-sónak” elnevezett vegyület máig is használatos.

1889-ben *Ilosvay Lajos* bevezette az első ionspecifikus kémszert (*Griess-Ilosvay-reagens*) a nitrit kimutatására és meghatározására. *Ilosvaynak*, a József Műegyetem kémiai tanárának kutatásai főleg az analitikai kémia és a szerves kémia területén jelentősek. Főbb munkái: A chemia alapelvei (1888); A levegőben égéskor keletkező nitrogéntartalmú melléktermékek mennyiségi meghatározása (1893); Bevezetés a szerves chemiába I. Szénhidrogének (1905) és száznál több tudományos ismeretterjesztő közlemény. Szerkesztette a Magyar Chemiai Folyóiratot 1897-től 1913-ig, majd a Természettudományi Közlönyt 1906-tól.

1889-ben jelent meg *Lengyel Béla* munkája: *Chemia tankönyv a felső tanintézetek számára I. Szerves kémia*.

1889. máj. 3-án *Schenek István* kémikus az MTA Matematikai és Természettudományok Osztálya levelező tagjának választotta. Székfoglalóját „Kísérleti ada-



tok az akkumulátorok működéséhez” címmel 1890. márc. 17-én olvasta fel.

1889. szept. 15-én avatták fel a *Hauszmann Alajos* tervei szerint épült díszes palotát, az ún. Technológia épületét. A József krt. és a Népszínház u. sarkán emelt épület-együttesben kapott közös hajlékot a Technológiai Iparmúzeum és az Állami Felső Ipariskola *Hegedűs Károly* főigazgatónak, az ipariskola vezetőjének irányításával. Az ipariskola vegyész szakán *Petrik Lajos* szerves kémiai, *Klemp Gusztáv* szerves kémiai tanított.

1889. ápr. 3-án született **Götz Irén Júlia** kémikus, az első magyar női egyetemi tanár. Vegyészdoktori dolgozatában (ő volt a harmadik női vegyészdoktor) a rádium-emanáció meghatározásának kérdésével foglalkozott.



1889. ápr. 27-én született *Gloetzer József* vegyész mérnök, a Budapesti Gázművek műszaki igazgatója, majd a Vegyiműveket Tervező Vállalat főtechnológusa. Energiagazdálkodási és tüzeléstechnikai kérdésekkel foglalkozott.

1889. máj 14-én született *Zechmeister László* vegyész mérnök, az MTA tagja, a Műegyetem, a Pécsi Orvostudományi Egyetem, majd Pasadenában a California Institute of Technology kémia professzora. Kutatásait a szénhidrátkémia-ban kezdte cellulóz lebontását célzó kísérleteivel. Kiemelkedőbbek azonban azok a kutatásai, melyek középpontjában a természetes anyagok klorofillját kísérő vegyületek, a karotinoidek álltak. Vizsgálatuk során *Zechmeister* professzor *Cholnoky Lászlóval*, *Tuzson Pállal*, *Vrabély Verával* 1927–28-ban számos új karotinoid, kapszorubin, likofill, likoxantin stb. mellett a piros paprika festőanyagát, a kapszantinot izolálta. A kutatások további jelentős sikere, hogy e vizsgálatok során a kezdetleges oszlop-kromatográfiát (amelyet *M. Sz. Cvet* dolgozott ki 1901-ben) az 1933–1935 közötti években *Zechmeister* munkatársai-val nagy hatású preparatív szerves kémiai elválasztó módszerre fejlesztette. Eljárásukat a szerves anyagok kémiai elválasztásában eredményesen alkalmazták. A tapasztalatok felhasználásával írta meg *Zechmeister László* és *Cholnoky László* híres kézikönyvét. E munka, a „Die chromatographische Adsorptionsmethode” nemzetközi sikerét mutatja, hogy Bécsben kétszer, 1937-ben és 1938-ban, majd Londonban „Principles

and practice of chromatography” címen háromszor is kiadták (1943, 1948, 1953). A művet a kémiai szakirodalom mint a legelső kromatográfiai kézikönyvet tartja számon. Az Akadémia – a Matematikai és Természettudományok Osztálya javaslatára – Zechmeister 1940-ben rendes tagjává választotta. Székkfoglalóját „A chromatographia néhány újabb alkalmazásáról” címmel 1940. október 21-én olvasta fel. Könyvei mellett nevét megőrizte az általa alapított híres sorozat (Fortschritte der Chemie organischer Naturstoffe...) elindítása, amelynek a bécsi Springer kiadónál megjelent köteteit 1938–1970 között szerkesztette.

1889. szept. 10-én született *Kiss Árpád* vegyész, akadémikus, a szegedi József Attila Tudományegyetem Vegytani Intézetének professzora. Fizikokémikusként elsőnek foglalkozott hazánkban a Brönstedt–Lowry-féle sav-bázis elmélettel. Intézetében alakult az ország első elektrokémiai korróziós kutatócsoportja.

1889. nov. 27-én született *Finkey József* bányamérnök, az MTA tagja, műegyetemi tanár. Alapvető munkát végzett a szén- és ércelőkészítés ásványtani és kémiai elméletének kidolgozása terén.

1889. dec. 31-én született *Bodnár János* vegyész, akadémikus, a debreceni egyetem Orvos Vegytani Intézetének vezetője. Növénybiokémiai kutatásaival a hazai növényvédelem alapjait teremtette meg.

125 ÉVE

1884-ben Szegeden Vegykísérleti Állomás létesült, amely elsősorban a mezőgazdasági termeléssel kapcsolatos ellenőrző vizsgálatokat, kémiai elemzéseket végzte.

1884-ben *Berg Adolf* kőolaj-finomítót létesített, amely 1891-ben részvénytársasággá alakult Budapesti Ásványolajgyár Rt. néven. 1933-ban a Fanto Egyesült Magyar Ásványolajgyárak Rt. tagja lett, 1944-ben lebombázták, nem építették újjá.

1884-ben megszervezték a Fővárosi Vegyszereti és Tápszervizsgáló Intézetet.

150 ÉVE

1859-ben az Osztrák Államvasúttársaság Oravicán (Krassó-Szörény vármegye) kőolaj-finomítót épített, ahol román nyersanyag mellett a környéken talált bitumenes anyagokat is feldolgozták.

1859. máj. 5-én született *László (Löwy) Ede Dezső* vegyész mérnök, műegyetemi tanár. Főként borvizsgálatokkal foglal-

kozott. Tanulmányai a borászat köréből jelentek meg.

1859. szept. 6-án született *Muraközy Károly*, a budapesti Kereskedelmi Akadémia kémia tanára. *Than Károly*, majd *Ilosvay Lajos* munkatársaként főleg gázreakciók tanulmányozásával foglalkozott.

175 ÉVE

1834-ben *Lichtl Károly* pesti termény- és papírkereskedő az országban először Spódiumgyárat létesített.

1834-ben *Zucker Lázár* megindította az első pesti gyufaüzemet. Üzemét kezdetben családi vállalkozásként működtette, azonban hat év után már 40 emberrel dolgozott.

1834. jún. 1-jén született *Felletár Emil* gyógyszerész, az Országos Művegyészeti (Orsz. Bírósági Vegyészeti) Intézet vezetője. A törvényszéki toxikológia művelője, hazai megteremtője volt.

1834. dec. 20-án született *Than Károly* vegyész, akadémikus, az MTA másodelnöke. 1848-ban tizennégy évesen részt vett a szabadságharcban. Egyetemi tanulmányait a bécsi egyetemen végezte, ahol a kémiai tanulmányokba *Redtenbacher* vezette be, majd Heidelbergben *Bunsennél* tanult. 1860-ban kezdte meg tanári működését a pesti egyetemen, 1862-ben pedig mint rendes tanár vette át a kémiai tanszék vezetését. Negyvenhat éves egyetemi tanári működése alatt európai színvonalra emelte a hazai kémia, analitika oktatását. Érdeme a pesti egyetem I. sz. Kémiai Intézetének létesítése, amely akkor Európa legkorszerűbb kémiai intézete volt. 1895-ben kezdeményezésére alakult meg a Természettudományi Társulat Kémiai Szakosztálya és indult meg a Magyar Kémiai Folyóirat.

200 ÉVE

1809. dec. 24-én hunyt el *Bárótzsi Sándor* prózaíró, *Kazinczy Ferenc* barátja, az első és egyetlen magyar nyelvű alkimista könyv szerzője. Könyve, *A mostani Adeptus*, vagy is a szabad kőművesek valóságos titka csak halála után, 1810-ben jelent meg.

250 ÉVE

1759. máj. 29-én királyi rendelet jelent meg, amely a gyógyszerek ellenőrzésére kötelezte a városi és megyei tisztiorvosokat.





Szörfszintézis

Tudományos publikációik ismeretében nehéz eldönteni, hogy a University of Hawaii tudósai a munkaidejüket töltik rendszeresen a strandon, vagy esetleg strandolás közben sem tudnak elszakadni munkájuktól. Egy honolului kutatócsoport a napfény által kiváltott szerves kémiai reakciók tanulmányozása közben egy szörfdeszkára szerelhető reaktort készített az A-vitamin egyes származékainak előállításához. Így a szükséges megvilágításról a Naprendszer legnagyobb ingyenes fényforrása, az erősen exoterm reakcióban szükséges hűtésről pedig a Föld legnagyobb termosztátja, a Csendes-óceán gondoskodik. A folyamat kétségtelenül környezetbarát – ráadásul a hallgatók sem panaszkodnak a túl sok laboratóriumi munkára.

Green Chemistry 10, 1038. (2008)

TÚL A KÉMIÁN

Homérosz, a csillagász

A törtélemtudomány szerint az Iliászt egy valóban megtörtént háború ihlette. Az Odüsszeiával kapcsolatban azonban már korántsem egyértelmű a helyzet. Szerencsére az eposzi szöveg természettudományos vizsgálata jelentős útmutató lehet ebben az esetben, mert *Homérosz* gyakran írt le csillagászati jelenségeket. A szövegből például egyértelmű, hogy újhold volt azon a napon, amikor *Odüsszeusz* megölte felesége kériit. A főhős hazafelé tartva egyszerre látta a Pleiádok és a Bootes (Ökörhajcsár) csillagképet, ami évente csak néhány hétig lehetséges. A Vénusz látszólagos égi helyzetére közvetlen, a Merkúréra pedig közvetett utalások vannak az Odüsszeiában, ezek elemzése szerint az eposzban leírt összes csillagászati jelenség egy időben kb. 2000 évente egyszer fordul elő. Így a kériók megölésének napja csakis (a Julianus-naptár szerinti) i. e. 1178. április 16. lehetett. Ez nem mond ellent a törtélemtudomány trójai háború időpontjára vonatkozó becsléseinek.

Az elemzéshez érdekes adalék még *Theoklümenosz* jóslata (Odüsszeia XX. ének, 356–358. sor, Devcseri Gábor fordítása): „árnyakkal telt már meg a csarnok, telt meg az udvar, szállnak a mély Ereboszba, homályba; a nap kialudt már nincs odafönt, s a sötétség vészholdó köde terjeng.”

Ezek a sorok új értelmet nyernek, ha azt is tudjuk, hogy i. e. 1178. április 16-án teljes napfogyatkozás volt, amelyet a Jón-tengeri szigetekről jól láthattak.

Az Odüsszeusz hazatéréséről szóló eposzi leírásnak is valós történelmi gyökerei lehetnek?

Proc. Natl. Acad. Sci. USA 105, 8823. (2008)

Az i. e. 1178. április 16-i teljes napfogyatkozás sávja



APRÓSÁG

A smaragdot nem érdemes folyóhordalékban keresni: sehol sem dúsul, mert sűrűsége (2,7 g/cm³) majdnem pontosan megegyezik a homokot főként alkotó kvarccal (2,65 g/cm³).

Mitől halt meg Napóleon?

Bonaparte Napóleon 1821-ben, 52 éves korában halt meg Szent Ilona szigetén. Halálának oka orvosa szerint gyomorrák volt, de néhány történész a nagy arzéntartalmat mutató hajszálanalízis-eredmények és a betegség tüneteiről maradt leírások alapján inkább arzénmérgezésre gyanakodott. Néhány hónapja olasz fizikusok viszont kizárták a gyilkosság lehetőségét. A tudósok Napóleon mai napig megőrzött hajszálait vizsgálták neutronaktivációs módszerrel, s elemezték a volt francia uralkodó fiának, feleségének és tíz másik kortársának a hajmintáját is.

Az arzénkoncentráció az összes mintában a ma általános érték nagyjából százszorosa volt. Napóleon haja egyéves korában 8,3 ppm, néhány nappal halála előtt pedig 18,9 ppm arzént tartalmazott. Abban az időben az arzén gyakori volt festékekben, gyógyszerekben és tartósítószerekben is, így aztán az emberi szervezetben is nagyobb volt a szokásos koncentrációja. Az eredmények egyértelműen bizonyítják, hogy Bonaparte Napóleon nem lehetett szándékos mérgezés áldozata.

Science 322, 23. (2008)

Il Nuovo Saggiatore 24 (1–2), 19. (2008)

Zöld robbanószer

Német tudósok környezetbarát, ólmot nem tartalmazó, új detonátoranyagot állítottak elő. A detonátorokat mechanikai vagy elektromos hatásra könnyen robbanó vegyületekből készítik. Manapság majdnem minden ilyen anyag ólom-azidot (is) tartalmaz, amely mind egészségügyi, mind környezetvédelmi szempontból igen ártalmas lehet. Az újonnan kifejlesztett detonátoranyag az 5-nitrotetrazolácion nátrium- vagy lítiumsóját tartalmazza. Ezekben a sókban kristályvíz is van, így mechanikai behatásra vagy súrlódásra nem különösebben érzékenyek. Ugyanezen anion más alkálifémekkel képzett sói kristályvízmentesek: ezek már jóval érzékenyebbek. Az előállított új anyag stabilitása és tárolhatósága megfelel a szokásos katonai alkalmazásokhoz. Így aztán a robbanóanyagok is kevésbé veszélyesek lehetnek a jövőben – persze csak a rendeltetészerű felhasználás megkezdéséig.

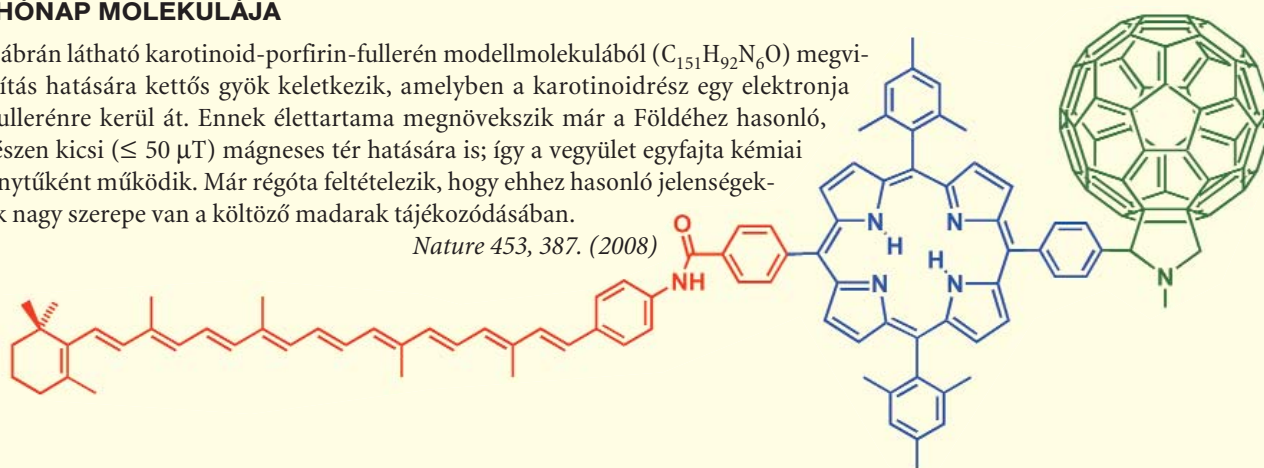
Dalton Trans., 6372. (2008)



A HÓNAP MOLEKULÁJA

Az ábrán látható karotinoid-porfirin-fullerén modellmolekulából ($C_{151}H_{92}N_6O$) megvilágítás hatására kettős gyök keletkezik, amelyben a karotinoidrész egy elektronja a fullerénre kerül át. Ennek élettartama megnövekszik már a Földéhez hasonló, egészen kicsi ($\leq 50 \mu T$) mágneses tér hatására is; így a vegyület egyfajta kémiai irányítúként működik. Már régóta feltételezik, hogy ehhez hasonló jelenségeknek nagy szerepe van a költöző madarak tájékozódásában.

Nature 453, 387. (2008)



Szupersebességű kaméleonmolekula

Japán tudósok egy színét nagyon gyorsan változtató vegyületet állítottak elő a közelmúltban.

A molekula alapja naftalincsoportokat tartalmazó gyűrűrendszer. A vegyület alapállapotú formája színtelen, UV-megvilágítás hatására azonban a másodperc töredéke alatt zöld színű származékká alakul, amelyben egy szén-nitrogén kötés felhasadása után a naftalinyűrűkre még két delokalizált elektron kerül, így azok gyökjellegűvé válnak. A megvilágítás megszűnése után a vegyület visszaalakul az alapállapotú, színtelen formába. A színváltozás oldatban és szilárd fázisban is gyors és reverzibilis, ezért az újonnan előállított anyagnak igen jelentős felhasználása lehet a színváltó lencsék előállításában, illetve az adattárolásban.

Org. Lett. 10, 3105. (2008)

Szójaarany

Fémnanorészecskéket sokféleképpen lehet előállítani. A legtöbb ma használt módszer mérgező vagy vízzel nem elegyedő reagenseket és oldószereket használ, s ez a tény gátolja a képződő termék *in vivo* alkalmazását. Egy új kísérlet-sorban arany-nanorészecskéket állítottak elő nátrium-[tetraakloro-aurát(III)] és szójaolaj-kivonat összekeverésével. Ha a $Na[AuCl_4]$ oldatába magát a szójababot rakják, a nanorészecskék lassabban, kb. egy nap alatt keletkeznek. A szójaolaj kis és nagy molekulatömegű alkotórészei is kiváltják a reakciót, a nanorészecskék azonban csak a nagy molekulatömegű frakció hatására stabilizálódnak aggregáció nélkül. Az előállított szol sók, hisztidin és humán szérumalbumin hozzáadására sem változik meg jelentősen, így a módszer alkalmas lehet biokompatibilis nanorészecskék előállítására.

Small 4, 1425. (2008)

NO problem

A nitrogén-monoxid (NO) az emlősállatok szervezetében többféle jeltovábbítási folyamatban is szerepet kap. Keletkezését több különböző NOS (nitrogén-monoxid-szintetáz) enzim is katalizálja a biokémiai reakciókban. Az egyik, iNOS jelű ilyen NO-előállító enzim aktivitása néhány betegség, például az Alzheimer-kór esetében túlságosan nagy. Így az iNOS szelektív inhibitorai gyógyszerek lehetnek, ezek előállítása azonban nehéz, mert más NOS-enzimek aktív centruma is nagyon hasonló. Amerikai tudósok a közelmúltban új stratégiát dolgoztak ki szelektív iNOS-inhibitorok előállítására. Kiindulópontnak két olyan ismert gyógyszert tanulmányoztak, amelyek az iNOS működését kicsit jobban akadályozzák, mint más NOS-enzimét. A tapasztalatok alapján már olyan új inhibitorot tudtak tervezni, amely először az enzim aktív centrumához kötődik, majd egy másik, már csak az iNOS-ban megtalálható részlettel való kölcsönhatás konformációváltozások olyan sorozatát indítja el, amelyek miatt végeredményben az enzim még szorosabban köti az inhibitor. Ez a stratégia más esetekben is hasznos lehet hasonló problémák megoldására.

Nature Chem. Biol. 4, 700. (2008)



CENTENÁRIUM

O. Diels, R. Rhodius: Über Reduktionen mit Natriumamylat

Berichte der Deutschen Chemischen Gesellschaft 42, 1072–76. (1909 január–március).

Otto Paul Hermann Diels (1876–1954) a berlini egyetemen doktorált Emil Fischer tanítványaként. 1916-tól 1945-ig a kielii egyetem professzora volt. 1950-ben tanítványával, Kurt Alderrel kémiai Nobel-díjat kapott a (később Diels–Alder-reakciónak elnevezett) diénszintézissel kapcsolatos kutatásáért.

Ha észrevétele vagy ötlete van ehhez az oldalhoz, írjon e-mailt Lente Gábor rovatszerkesztőnek: lente@dragon.klte.hu.



A TUDOMÁNYOS ÉLET HÍREI

Beszámoló az EUChEMs Working Party on Green and Sustainable Chemistry (WPGSC) 1. találkozásjáról

Róma, 2008. február 28.

A találkozó az elnök, *Pietro Tundo* köszöntésével kezdődött, amelyet a jelen lévő képviselők bemutatkozása követett. Mint magyar képviselő kifejeztem a Magyar Kémikusok Egyesületének készségét nemzetközi konferencia szervezésére a zöld kémia területén.

A beszélgetés folyamán hosszasan folyt a vita arról, mi sorolható a „Green and Sustainable Chemistry” témakörhöz. Éppen emiatt arra a következtetésre jutottak a résztvevők, hogy először az ide tartozó tevékenységeket kell definiálni, a célokat meghatározni, ami eleinte gyakoribb találkozást és folyamatos kapcsolattartást igényel, ugyanakkor a többség szerint még nem célszerű kizárólag ebben a témakörben önálló nemzetközi konferenciát szervezni.

A görög képviselő (*T. Poulos*) jelezte, hogy 2009-ben Thesszalonikában kerül sor a „3rd Panhellenic Symposium on Green Chemistry and Sustainable Development” nevű rendezvényre, amelyet az európai kémikusok számára is nyitottá lehetne tenni. A bizottság elnöke kifejezte azon kérését, hogy minél többen vegyünk részt a zöld kémiát is érintő különböző nemzetközi konferenciákon (Toulouse, Moszkva, Torino stb.).

A fentiek alapján arra a következtetésre jutottam, hogy Magyarországon úgy szervezhetünk belátható időn belül ebben a témakörben nemzetközi konferenciát, ha valamilyen hazai rendezvényhez kapcsolódóan, vagy egy szervezés alatt álló nemzetközi konferencián belül először külön szekcióként meghirdetjük a „Green and Sustainable Chemistry” témakört is.

A fentiekon kívül a bizottság tervei között szerepel a világhálón honlap létesítése, amihez a nemzeti képviselőktől várnak adatokat. Megfogalmazták, hogy támogatás céljából különböző vegyipari cégeket kellene megkeresni, továbbá az EU-pályázatok illetékes szerveinél pályázati forrásokhoz kellene hozzájutni.

Szakácsné Földényi Rita

A XXV. EMS Nyári Egyetem

Leuven, Belgium, 2008. szeptember 8–11.



Az idei huszonötödik EMS (European Membrane Society) Nyári Egyetemet a Brüsszeltől alig 30 kilométerre keletre fekvő egyetemi városban, Leuvenben rendezték meg az európai uniós Euro-membranes projekt támogatásával. A gyönyörű Arenberg-kastélyban tartották a legtöbb előadást. A *Solvent resistant membranes* címmel tartott előadás-sorozatra bejelentett 33 előadás és 29 poszter az alábbi témakörök között oszlott meg: polimer membránok, kerámiamembránok, membránok előállítása, transzportfolyamatok, jellemzési technikák, SRNF- (Sol-

vent Resistant Nanofiltration) alkalmazások, SRNF és PV (pervaporáció).

A nyári egyetemen közel 100 fő vett részt, legfőképpen PhD-hallgatók. Az első nap a polimer membránokról szólt – olyan neves, szakma által elismert előadókkal, mint *Nunes Suzana* Németországból (Geesthacht, GKSS) vagy *Andrew Livingston* Angliából (London, Imperial College), hogy csak a legismertebbeket említsük. A poszter-szekcióra is az első napon került sor, amit egyórással, négy csoportban rendezett diszkusszió követett. A magyarok három poszterrel képviselték magukat a következő PhD-hallgatókkal: *Cserjési Petra* (Study on gas separation by supported liquid membranes applying novel ionic liquids, Pannon Egyetem, Veszprém), *Fogarassy Eszter*



Az Arenberg-kastély

(The processing of apricot juice by using multistep membrane technique, Budapesti Corvinus Egyetem) és *Kertész Szabolcs* (Treatment of synthetic wastewaters by micellar-enhanced ultrafiltration, Szege-di Tudományegyetem).

A második nap a kerámiamembránok és a transzportfolyamatok napja volt. Az első előadást általános membrán-előállítási módszerekről a francia *A. Ayrault* (Institut Européen des Membranes) „General preparation methods” címmel hallhattuk, majd *T. Tsuru* (Hiroshima University, Japán) és *B. Bonekamp* (ECN, Hollandia) a kerámiamembránok szintéziséről tartott érdekes előadást. A délutáni szekcióban *J. Crespo* (Universidade Nova de Lisboa, Portugália) a modellezés alapjaiba vezette be a hallgatóságot mind mechanikai, mind statisztikai/hibrid módszereket részletezve.

A harmadik napon *M. Cheryan* (University of Illinois, USA) előadása bizonyult a legérdekesebbnek. Munkatársaival növényi olajokból

A szerzők és műveik





származó értékes anyagok kinyerésével és dúsításával próbálkoztak, nanoszűrítés és ultraszűrítés alkalmazásával.

Az utolsó, negyedik napon egy nagyon érdekes, ipari méretű alkalmazásáról hallhattunk előadást A. Nijmeijentől (Shell, Hollandia) „Solvent filtrations at Shell” címmel. Ezen a délutánon betekintést nyertünk a leuveni egyetem membránlaboratóriumaiba is.

A nyári egyetem szakmailag magas szintű, sok információt átadó, néhány ipari alkalmazást is ismertető hatékony konferenciának bizonyult. Egy PhD-hallgatónak igen jó dolog, hogy túlnyomórészt hasonló életkorú és érdeklődési körű fiatalokkal találkozhat és beszélgethet olyan témákról, amelyek szakmailag közel állnak hozzájuk, és erre kiválóan alkalmas volt az idei „Summer School”.

A szerzők köszönetet mondanak a Magyar Kémikusok Egyesületének, az NKTH-nak, valamint a KPI-nek a kiutazás támogatásért (RET-07/2005).

Kertész Szabolcs

SZTE Környezettudományi Doktori Iskola

Fogarassy Eszter

BCE Élelmiszer-tudományi Doktori Iskola

Beszámoló a 2008. évi Őszi Radiokémiai Napokról

Az Őszi Radiokémiai Napok (ŐRN) elnevezésű radiokémiai konferenciát ebben az évben október 29. és 31. között rendezték meg Hajdúszoboszlón.

Visszatekintés

A mostani rendezvény a 14. volt abban a sorban, amelyben 1995-től kezdődően Őszi Radiokémiai Napok névvel illetjük a hazai radiokémikus társadalom évenkénti seregszemléjét.

És ha már a sorszámot és a hozzá tartozó évszámot említetem, néhány mondattal hadd idézzem fel e konferenciák korábbi szakaszait. Ebben részben saját emlékeimre, részben Kónya tanár úr egészen a kezdetekig visszanyúló eseménynaptárára támaszkodhattam.

A hatvanas évektől kezdődően a hazai radiokémiai konferenciákat előbb *Magkémiai Konferencia*, később *Radioanalitikai Konferencia* gyűjtőnéven rendezték meg, de voltak olyan közbülső évek is, amikor az aktuális téma, például a nukleáris környezetvédelem volt a konferencia címadója.

A *Magkémiai és Radioanalitikai Konferenciák* sorozata 1963-ban Debrecenben kezdődött I. Magkémiai Szimpózium néven. Később a sor Szekszárdon, Keszthelyen, Visegrádon, Kecskeméten, Balatonkenesén, Tengelicen, Hajdúszoboszlón, Verőcemaroson, Tatán, Egerben folytatódott.

Az új elnevezés bevezetése után, ami *Vértes Attila* professzor úr nevéhez fűződik, az *Őszi Radiokémiai Napok sorozata 1995-ben indult Szegeden, Imre Lajos-emléküléssel*. A sor aztán Balatonkenesén, Tatán, Pakson, Kecskeméten, Hévízen, Mátraházán, Gyulán, Balatonföldváron, Egerben, Mátraházán, Siófokon és Sopronban folytatódott.

Erre a kis *visszatekintésre a hely szelleme készített*, hiszen az egyik radiokémiai konferenciát éppen itt, Hajdúszoboszlón tartottuk 1989-ben, „Korszerű radioizotópos eljárások és eszközök, különös tekintettel a nyomjelzéstechnikára” címmel.

A 2008. évi konferencia témáinak áttekintése

A szimpóziumon 6 szekcióban összesen 29 előadás hangzott el. Bár az egyes szekcióknak nincs külön megnevezése, az előadások csoportosításából jól kitapinthatók a hazai kutatóhelyeken művelt témakörök, amelyek egyébként megfelelnek a Radiokémiai Bizottság és munkabizottságai által képviselt szakterületeknek.

Szokás a rokon szakterületekről vendég előadót is befogadni. Ezen a rendezvényen vendégként a nukleáris fizika szerepelt a hasadási és a fúziós reaktorok típusainak és problémáinak ismertetésével. Az atommag hasadásán alapuló reaktoroknál a kiégett fűtőelemek elhelyezése jelent kihívást, hiszen a világban működő reaktorok eddig már több mint 2000 tonna plutóniumot halmoztak fel. A fúziós reaktoroknál a típusokat a plazma-bezárási modellek szerint különböztetik meg. Az előadó a lézerrel indukált gyors fúziós reaktortípust a jövő erőműveként aposztrofálta, ami a jövő energiájának kilátásait illetően az emberiség egyik sorskérdése.

A radiokémiai terén a *nukleáris analitika* többféle módszer fejlesztésével és alkalmazásával képviseltette magát.

Az egyik jól körülhatárolt nukleáris analitikai módszer a *prompt-gamma aktivációs analízis* (PGAA), amely a müncheni reaktor mellett kiépített új, hideg neutronnyalábra épülő PGAA-berendezéssel végzett összehasonlító mérésekkel, a velük való együttműködéssel, fejlesztésekkel, különféle alkalmazási lehetőségekkel, például műtárgyak vizsgálatával mutatkozott be.

Egy másik analitikai területen röntgenfluoreszcenciával (XRF), instrumentális neutronaktivációs analízissel (INAA), valamint PGAA-módszerrel *régészeti minták eredetazonosítását végezték*.

Különböző tömegszámú uránizotópokat tartalmazó törvényeségi minták gyors jellemzésére, eredetazonosítására *induktív csatolású plazma-tömegspektrográfiát* (ICP-MS) vetettek be.

Transzuránizotópok egymás melletti meghatározására az elválasztástechnikai módszerek mellett főleg *alfa-spektrometriát* használtak.

Atomerőművi minták elemzésére, dörzsminták jellemzésére kiterjedten alkalmazzák a *gamma- és béta-spektrometriát*.

Az *orvosi izotópalkalmazás* (nukleáris medicina) témakörében az egyik előadó a kész radiológyszerként forgalmazott, avagy a kit formában (külön radioaktív és külön inaktív komponensként) előállított és a felhasználó által jelzett radiológyszerek alternatíváját taglalta. Arra a következtetésre jutott, hogy ez utóbbi esetben a radiolitikus bomlás elkerülése a radiofarmakonok nagyobb stabilitásához vezet.

A *pozitronemissziós tomográfia* (PET) témakörében a Debreceni Nukleáris Medicina Intézet munkatársai tevékenységük teljes keresztmetszetét adták C-11 izotóppal jelzett molekulák és F-18 izotóppal jelzett peptidhormon-analógok szintézisének, F-18 FDG radiológyszer gyártásának, minőség-ellenőrzésének és minőségbiztosításának bemutatásával.

Az *ipari izotópalkalmazások előadásai* elsősorban a Paksi Atomerőmű vízkémiai és korróziós kutatásaihoz kötődtek. Ebben a témakörben a primer körű korróziós transzportfolyamatok vizsgálatáról, dekontaminálási eredményekről, a dekontaminálások korróziós és felületkémiai hatásairól, új dekontaminációs technológiák kifejlesztéséről, valamint urán- és transzuránizotópok fűtőelem-burkolatokon történő felhalmozódásáról hangzottak el előadások.

A *nukleáris környezet-ellenőrzés* témakörében a nagy aktivitású radioaktív hulladékok elhelyezésénél kulcsszerepet betöltő radioizotópok talajban való szorpciójáról és migrációjáról, a cézium ho-



mokon való megkötődéséről, a termolumineszcens és a GM-detektorok környezeti dozimetria keretében végzett összeméréséről és Magyarország radontérképeiről hallhattunk előadásokat.

A nukleáris szerkezetvizsgálatról egy előadás hangzott el, amelynek témája a glaukonitosodás (csillámmá való átalakulás folyamata a tengerfenéken) Mössbauer-spektroszkópiás vizsgálata volt.

Az ŐRN-en két tudományos dolgozatot is megvitattak a résztvevők: Révay Zsolt „In situ prompt-gamma aktivációs analízis” című MTA doktori értekezésének elővédésére és Pálfi Tamás: „Szerves színezékek vizes oldatának radiolízise” című PhD-értekezésének műhelyvitájára került sor.

Mindkettő – a szűkebb szakmai körben való megmérettetés lehetőségének kihasználása mellett – a rendezvény tudományos rangját is növelte.

Az előadói nívódíjért folyó verseny

Az Őszi Radiokémiai Napok üdítő – természetesen a versenyzők számára inkább izgalmas – színpoltja a fiatalok előadói versenye, amelyen ebben az évben Szilágyi Veronika (MTA Izotópkutató Intézet Nukleáris Kutatások Osztálya) lett az első, Furu Enikő (Debreceni Egyetem Természettudományi Kar Kolloid és Környezetkémiai Tsz. Izotópalkalmazási Laboratórium) pedig a második. Az eredményt hagyományosan a konferenciavacso-



Furu Enikő a gratulációt fogadja

A decemberi díjátadáson



Szilágyi Veronika – zsűritagokkal

rán hirdették ki. A díjat december 3-án „családias környezetben” adták át.

Az elhangzott témák között archeológiai minták eredetének meghatározása, szervesen ioncserélő katalizátorok fejlesztése, új atomerőművi dekontaminációs technológia fejlesztése, urán-oxid-minták eredetvizsgálata és nyomdetektorok fejlesztése szerepelt.

A versenyben meglepően érett előadásokat hallhattunk. Minden fiatal versenyző jól állta az előadást követő kérdéseket, logikus válaszaival szakszerűen érvelt és szállt vitába a kérdezővel.

Az előadók képesek voltak magukkal ragadni a hallgatóságot. A színvonalas előadáshoz gratulálok a győzteseknek, és remélem, ez a siker bátorítást ad és motivációt jelent további szakmai munkájukban.

Ha már névadóként megemlíttem, hadd emlékeztessék arra, hogy a fiatal előadók versenyének is Vértes Attila professzor úr volt az ötletadója.

A Debreceni Egyetem Nukleáris Medicina Intézetének meglátogatása

Az idei Őszi Radiokémiai Napok érdekes és igen hasznos eseménye volt a DE Nukleáris Medicina Intézetének bemutatkozása intéztlátogatás formájában. Mivel itt dolgozó kollégáink a konferencián egy egész szekciót az intézet munkájának ismertetésére szántak, a helyszíni látogatás során elég volt a látványra helyezni a hangsúlyt.

Az intézeti kollégák elkápráztattak bennünket modern be rendezéseikkel, szaktudásukkal, igen feszített és jól szervezett munkatempójukkal, amit a nem egészen kétórás felezési idejű F-18 radionuklid gyors bomlása kényszerít mind az előállítókra, mind pedig a felhasználókra.

A látogatás jól illeszkedett az RKB korábbi intéztlátogatásainak sorába, melyek keretében évenként egy-egy nukleáris/radiokémiával foglalkozó hazai kutatóhely bemutatkozására került sor. Itt most a látogatás szélesebb körű volt, nemcsak az RKB tagjai, hanem a szimpózium összes résztvevője jelen lehetett.

Radiokémiai bizottsági és munkabizottsági választások

Az Őszi Radiokémiai Napokon bonyolították a Radiokémiai Bizottság elnöki, illetve munkabizottsági tisztújító választásait. A négy munkabizottság vezetőinek választása a nyár folyamán levélben zajlott, ezen a rendezvényen csak az eredményt jelentették be.

Az újonnan megválasztott vagy megerősített tisztségviselőknek sok sikert kívánok jövőbeni munkájukhoz.



Összegzésként elmondható, hogy az idei Őszi Radiokémiai Napok gazdag programot felvonultató szakmai rendezvény volt. Kellemes helyszínen, kényelmes körülmények között, intenzív és eredményes munkával tölthettük ezt a három napot.

A megrendezés szakmai és tudományos része a Radiokémiai Bizottság munkája és érdeme, a technikai lebonyolítást most is a Magyar Kémikusok Egyesülete munkatársai végezték.

Mindkét csapat nemcsak a korábbi ŐRN-szimpóziumok, hanem most már a sikeres nemzetközi Nuclear and Radiochemistry Conference 7 (NRC7) konferencia tapasztalataira is támaszkodhatott.

Néhány szó az NRC7-ről. A konferencia megrendezésére 2008. augusztus 24. és 29. között került sor az Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Karának látványos épülettömbjében (elnök: Vértes Attila és Wojnárovits László, titkár: Vincze Árpád). A konferencia mintegy 250 résztvevője a világ 30 országából érkezett. A legtöbb külföldi kutató a Német Szövetségi Köztársaságból utazott ide. 10 nagyobb témakörhöz kapcsolódóan 16 szekcióban hangzottak el előadások, amelyeket 2 poszterszekció egészített ki. A konferencia során került sor a Hevesy-érem átadására is, melynek kitüntetettje 2008-ban Prof.



S. M. Qaim, a Forschungszentrum Jülich GmbH vezető kutatója.

A rendezőknek szóló elismerés mellett köszönet illeti a szakmailag tartalmas, magas színvonalú előadásokért az előadókat, a társszerzőket, a versenyzőket, a hozzászólókat és a szimpózium minden aktív résztvevőjét.

Baranyai Lajos

TALÁLKOZÓ

A Richter üzemi csoport ülése

A Magyar Kémikusok Egyesülete Richter munkahelyi csoportja 2008. október 28-án tartotta ülését. Dr. Szántay Csaba elnök rövid köszöntője után a meghívott előadók avatták be hallgatóságukat szervezeti egységük munkájába.

Sógor András, a Biztonsági, Tűz- és Környezetvédelmi Főosztály (BTKF) vezetője: A megbízható háttér – biztonság és egészségvédelem a Richter Gedeon Nyrt.-nél. Sógor András a BTKF szervezeti felépítését, a vállalati struktúrában elfoglalt helyét hangsúlyozta előadásában. Bemutatta az információs rendszer (MEBIR) felépítését, és beszélt ennek kiemelten fontos szerepéről a munka összehangolásában.

A biztonság kockázatkezelésen alapuló modellje lehetővé teszi, hogy felmérjük egy veszélyes tevékenység (például a gyógyszergyártás) részlemeinek kockázatát, majd megfelelő védelmi stratégiával és eszközökkel ezt a lehető legkisebb mértékre csökkentjük.

Részletesen kitért a felhasznált vegyi anyagok felhasználásának európai előírásaira (REACH), valamint a veszélyes anyagok és technológiák használatának kockázati tényezőire (SEVESO).

Szabó Zsolt, Környezetvédelmi Osztály, főosztályvezető-helyettes: Komplex elvárások és megoldások a környezetvédelemben. Mivel a gyógyszer társadalmi szempontból „bizalmi termék”-nek minősül, a Richter vezetőségének meggyőződése szerint a környezetvédelem megfelelő színvonala stratégiai jelentőségű. A környezetvédelmi tevékenységet a 2001 óta tanúsítottan működő Környezetközpontú Irányítási Rendszerben (KIR) a műszaki igazgató közvetlen szakmai felügyelete mellett Környezetvédelmi Osztály és Környezetvédelmi Laboratórium látja el. A budapesti környezetvédelmi szervezet létszáma 10 fő, ebből 6 fő diplomás.

Főbb tevékenységi területeik:

- a KIR-rendszer működtetése (külső és belső auditok, rendszerfejlesztés),
- hatósági adatszolgáltatások, külső kapcsolattartás,
- laboratóriumi mintázások, mérések, monitoring (1995 óta „Akkreditált mérőhely”),
- technológiák és fejlesztési tervek környezetvédelmi szempontú véleményezése,
- külső (nyári gyakorlatok, diplomázók) és belső oktatási tevékenység,
- részvétel érdekképviseleti szervek, szakmai szövetségek munkájában.

A kialakított – és folyamatosan fejlesztett – KIR-rendszer a biztosítéka annak, hogy a hazai és uniós jogalkotás egyre szigorodó követelményeinek a Társaság a jövőben is meg tudja felelni.

Ritz Ferenc, Biztonságtechnikai Labor: A biztonság laboratóriumi háttér – miben segíthetünk? A biztonságos mun-

kavégzés feltételeinek megtartása minden munkatárs érdeke, ezzel kapcsolatban a laboratórium feladata az ellenőrzés. Fontos tevékenység az adatszolgáltatás is: a termelt/felhasznált anyagok tűzveszélyességi paramétereit dokumentálni kell, a hatósági követelményeket teljesíteni kell. A tűzveszélyességi paraméterek folyamatos mérése is feladatuk, hiszen a munkahelyi környezet „megfelelőségét” (zaj, klíma, világítás, légtér stb.) mérésekkel kell igazolni a hatóságok előtt. Az esetleges váratlan helyzetek objektív tisztázása érdekében szükséges a technológia, anyagfelhasználás kockázatának értékelése is.

A címben szereplő szlogen („miben segíthetünk?”) azt a tevékenységüket jelzi, amelynek során a rendkívüli események, kvázibalesetek okainak felderítésére kísérleteket, elemzéseket végeznek. Feladatuk továbbá az anyagok használatának, a technológiai lépések kockázatának előzetes felmérése. Az előadásban ezeknek a tevékenységeknek az illusztrálására mérési eredményeket, reakcióelemzéseket és hosszú távú előrejelzéseket szolgáló statisztikai eredményeket mutatott be. Ismertette a Richter belső intranetes rendszerében elérhető adatbázisok alkalmazását; bemutatta, hogy egy veszélyes – mint például a médiából is ismert solymári – hulladékártolóban történt robbanás okainak elemzése is elvégezhető, ha az anyagok veszélyes reakcióinak gyűjteményéből a jelen lévő anyagokat megkeressük.

Dr. Czibula László, Technológiai Fejlesztési Laboratórium I., laborvezető: A Wartha Vince-díj – kínládások és sikerek a feladatmegoldásban. Dr. Czibula László (*képünkön*), a Wartha Vince-díj elnyerése kapcsán a Paroxetin – amely a Richter egyik készítményének Innovációs Nagydíjat nyert hatóanyaga – szintéziséről beszélt, kiemelve a kutató-fejlesztő munka során felmerülő szakmai nehézségeket, szenvedéseket. A díjazott munkatársaival feladatuk kapta eredeti szintézisen alapuló, az originátorral terápian egyenértékű készítmények hatóanyagának előállítását.

A kutatómunka eredményeit több megadott szabadalom tartalmazza. A díjazott és munkatársai munkájuk során egy oldószer nélkül kivitelezett konténeres brómozást valósítottak meg, továbbá a témában elsőként használtak új védőcsoportot, amelynek előnyeit azóta számos más kutatócsoport is alkalmazza munkájában. Legjelentősebb innovativitásuk a kutatómunka során kidolgozott, biztonságosan kivitelezhető Grignard-reakciós megoldás, valamint a végső molekulafelépítés során alkalmazott inverziós éterképzés és nem utolsósorban az egyszerű védőcsoport-eltávolítás.

A díjazott munkájával nemcsak a laboratóriumi és félüzemi méretű reakciók tervezésében és kivitelezésében, illetve azok irányításában vett részt, hanem szakmai tapasztalatával az üzemi méretű megvalósításban is jelentős szerepet vállalt. A műszaki megoldás a 2002. évi Innovációs Nagydíj kitüntetést kapta, mert az eljárás új, szabadalmilag független, ipari méretben megvalósítható, környezetkímélő technológiákat alkalmaz, az így előállított hatóanyag minősége a szigorú nemzetközi követelményeket is kielégíti és a termék gyártása gazdaságos.

Ritz Ferenc–Chladek István





HÍREK AZ IPARBÓL

Tervezett Pfizer-együttműködés Szegeden

A Szegedi Tudományegyetem Gyógyszerésztudományi Kara közös projekt megvalósítására tett javaslatot a világ egyik legnagyobb, originális gyógyszereket gyártó vállalatának. (A Pfizer a világ legnagyobb kutató-fejlesztő gyógyszergyártója, Magyarországon a magyar gyógyszerpiac hatodik legnagyobb szereplője.)

A több fordulóban kidolgozott projektjavaslat eredményeként Szegeden létesítheti új, kelet-közép-európai kutató-fejlesztő (K+F) központját a Pfizer. A Pfizer hazai leányvállalata június 13-án terjesztette be a megvalósíthatósági tanulmányt az anyavállalat vezetéséhez. Bár a javaslatot nem utasították el, a végső döntés a projektről még nem született meg – a tervezett beruházás kapcsán az eddig elmaradt, illetve azzal ellentétes irányba ható, tervezett kormányzati intézkedések következtében.

A Szegedi Tudományegyetem és Szeged városa maximálisan támogatja a projektet. Az egyetem a kampusszal egybeépült területet jelölte ki a projektnek. A város a vállalkozásnak nagyvonalú beruházási kedvezményeket nyújt és az egyetemi területekkel szomszédos, jelenlegi MÁV-raktárbázist a rendezési tervben egyetemi fejlesztési területnek nyilvánította. Így a belvároshoz közeli területen további fejlesztések valósulhatnak meg a jövőben: más vállalkozásoknak, spin-off cégeknek, kutató- és szolgáltatóintézményeknek, sőt a Gyógyszerésztudományi Kar új épületének is helyet adhat a Boszorkánysziget ezen területe. Ez azt jelenti, hogy a projekttel az egyetemi kutatás is új, közvetlen hasznosítható eredmények irányába mozdul el.

A magyar kormány levélben már biztosította támogatásáról a Pfizer nemzetközi menedzsmentjét, ugyanakkor a szabályozási környezet Magyarországon nem a megfelelő irányban változik: eddig semmi nem történt azért, hogy elfogadják a vonatkozó adótörvényeknek azt a módosítását, amely lehetővé tenné a K+F kiadások levonását például a gyógyszergyártókat érintő, tavaly bevezetett 12 százalékos különadó alapján, és lehetőség lenne az alkalmazott kutatók és PhD-hallgatók számának levonására az ún. regisztrációs díjjal terhelt orvoslátogatói létszámból. (Az orvoslátogatói adó visszavezetése a jelenleg hatályos és érvényes alkotmánybírói határozattal szemben áll.)

Amennyiben a beruházás megvalósulna, a tervek szerint a Pfizer mintegy 18–20 millió dollárt fordítana az új központ kialakítására, ahol várhatóan 3000 m²-en 75–120 – akár a határokon is átnyúló régióból érkező – kutató dolgozna. A kutatóközpont bekapcsolódna a Pfizer originális gyógyszerkutatásának teljes vertikumába: a gyógyszertervezéstől a kémiai szintézisen, izoláláson keresztül a hatóanyag hatástani tesztelésén, technológiai formulálásán, analitikáján át egészen a különböző szintű klinikai kipróbálásig. Szegeden a Gyógyszerésztudományi Karon rendelkezésre állnak a sikeres és eredményes gyógyszerkutatás feltételei, amihez a Természettudományi és Informatikai Kar, a Juhász Gyula Pedagógusképző Kar kémiai, fizikai és biológiai intézetei, az Általános Orvostudományi Kar intézetei és klinikái, valamint a Szegedi Biológiai Központ további fontos tudományos háttérrel tud szolgálni.

A tervezett projekt már jelenlegi állapotában is nagy elismerés a Szegedi Tudományegyetem, a régió és egyben Magyarország kutatói és tudományos teljesítménye előtt. Bízunk abban, hogy a fiskális akadályok elhárultával szabad utat kap ez a nagy jelentőségű beruházás.

Dombi György

MKE-HÍREK

A Magyar Kémikusok Lapja szerkesztőbizottságának 2008. október 17-i ülése

Jelen vannak: *Antus Sándor, Buzás Ilona, Gál Miklós, Hancsók Jenő, Kalász Huba, Keglevich György, Kiss Tamás, Kovács Attila, Nemes András, Rácz László, Szabó Imre, Szekeres Gábor, Szépvölgyi János, Lente Gábor.*

Kimentését kérte: *Androsits Beáta, Beck Mihály, Hermeicz István, Janáky Csaba, Körtvélyessy Gyula, Liptay György, Zékány András.*

Távollétét előzetesen nem jelezte: *Biacs Péter, Juhász Jenőné, Körtvélyesi Zolt, Mizsey Péter, Müller Tibor, Szabó Ilona.*

Az ülés napirendje a következő volt:

1. Az MKL megújulásával kapcsolatos helyzet, szakmai és egyéb tervek. **2.** Az SZB új Szervezeti és Működési Szabályzatának (SZMSZ) megvitatása. **3.** Egyebek.

1. napirendi pont

Kiss Tamás, az MKL felelős szerkesztője áttekintette az MKL megújulási folyamatának eddigi történetét. Elmondta, hogy a lap tartalmi és formai megújulásával kapcsolatban jelentős előrelépések történtek az elmúlt hónapokban:

- az MKE vezetése egyértelműen elkötelezte magát amellel, hogy az MKL, mint az egyesület hivatalos lapja, tartalmilag és formailag is megújuljon, és ehhez minden lehetséges támogatást megad a szerkesztőségnek és a szerkesztőbizottságnak;
- a megújulást külső, professzionális szinten dolgozó szakemberek (műszaki és tervezőszerkesztő, hirdetési szakemberek) bevonásával kívánja az egyesület elősegíteni;
- nagymértékben előrehaladtak a tárgyalások a lehetséges műszakiszerkesztő-jelöltekkel; két tartalmilag és formailag hasonló, a költségeket tekintve azonban jelentősen eltérő ajánlat érkezett be az egyesülethez; az MKE Intézőbizottsága – a GB ajánlása alapján – 2008. október 20-i ülésén ezek közül kívánja kiválasztani az együttműködő partnert;
- mindkét ajánlattevő részletes grafikai terveket is készített (a terveket az SZB tagjai az ülésen megtekinthették, és felvetődött a kérdés, hogy a megújult lap teljes terjedelmében színes nyomtatásban, vagy – költségtakarékossági okokból – részben színes, részben fekete-fehér nyomtatásban jelenjen meg);
- a megújult tartalmú és formájú, magazin jellegű MKL első számát 2009 januárjára tervezik;
- az MKL havonta 3–4 tudományos ismertterjesztő cikket kíván közölni; a magazin jellegnek megfelelően részben új rovatok (Interjú, Kémia és gazdaság, Vegyészletek) indítását tervezi a szerkesztőség;
- újjászerveződött a szerkesztőség, fiatal kémikusok és újságírói tapasztalattal is rendelkező kollégák kerültek be a munkatársak közé;
- tervezik a szerkesztőség további bővítését egy műszaki és egy tervezőszerkesztővel;
- a szerkesztőség véleménye szerint a lapban megjelent szakmai cikkekhez nem szükséges angol nyelvű összefoglalót mellékelni, és angol nyelvű tartalomjegyzékre sincs szükség, tekintettel arra, hogy a lap magyar célközönséget kíván megszólítani.



A beszámolót követően a lap tartalmával, szerkezetével, tipográfiájával, a lapban megjelenő hirdetésekkel, a hirdetésszervezéssel, a más hazai műszaki lapok szerkesztőivel történő konzultációkkal, az angol nyelvű tartalomjegyzékkel és a szakmai cikkek angol összefoglalóival, valamint a szerzőknek szóló ajánlások kidolgozásával kapcsolatban alakult ki vita. A vitához hozzászóltak: *Kalász Huba, Buzás Ilona, Antus Sándor, Szekeres Gábor, Szabó Imre, Rácz László, Lente Gábor, Kovács Attila, Gál Miklós, Kiss Tamás, Szépvölgyi János.*

A vita lezárásaként az SZB – egyhangú szavazással – a következő határozatokat hozta:

- A szerkesztőbizottság támogatja a szerkesztőség és az MKE vezetésének az MKL megújulására vonatkozó terveit.
- Az SZB javasolja, hogy a lap teljes terjedelemben színes nyomtatásban, egységes arculattal jelenjen meg.
- Az SZB javasolja, hogy a lapban jelenjen meg angol nyelvű tartalomjegyzék, és a szakmai cikkekhez tartozzon angol nyelvű összefoglaló is.
- Az SZB javasolja, hogy a lap megújulási folyamatának részeként a szerkesztőség készítse el a szerzőknek szóló ajánlások új változatát, amely tartalmazza a terjedelmi és formai korlátokat és kívánalmakat is. Az ajánlásokat a szerkesztőbizottság véleményezni kívánja.

2. napirendi pont

Az MKE Felügyelő Bizottsága 2/2008 (2008.04.25) sz. határozatában felkérte az MKE Intézőbizottságát és az MKL szerkesztőbizottságát, hogy az MKL megújulásával egyidejűleg, 2008. szeptember 30-i határidővel alkossa meg az MKL új működési szabályzatát, és ebben rendezze és biztosítsa az MKE mint lap-tulajdonos elvárásainak érvényesítését, valamint az MKL felelős szerkesztőjének és szerkesztőbizottságának szakmai szuverenitását. A határozat teljesítéséért felelősök: az MKE főtítkára, az MKL–SZB elnöke és az MKL felelős szerkesztője.

A fentiek alapján az SZB-ülést megelőzően elkészült az MKL szerkesztőbizottságának és szerkesztőségének Szervezeti és Működési Szabályzata (MKL–SZMSZ), amit az SZB tagjai az ülés előtt elektronikusan megkaptak. Az SZMSZ sürgős megtárgyalását az indokolta, hogy egyidejűleg elkészült az „Egyesületi lapok és kiadványok ügyrendje” című egyesületi anyag, és a két szabályzatot az MKE–IB 2008. október 20-i ülésén együtt kívánta megtárgyalni.

Az SZB ülésén a jelenlévők tételesen megvitatták az SZMSZ egyes pontjait, és számos módosító javaslatot tettek. Ezeket a javaslatokat az MKE főtítkára és az SZB elnöke végigvezették az anyagon, és az így átdolgozott változatot terjesztette az SZB elnöke az MKE–IB elé.

3. napirendi pont

Antus Sándor az MTA Szerves és Biomolekuláris Bizottságának elnökeként kérte a szerkesztőbizottság támogatását ahhoz, hogy a bizottság által havonta megtartott Bruckner-termi előadások 1–1 oldalas kivonata megjelenhessen az MKL-ben. Ily módon ugyanis ezek a szakmai anyagok a PhD-hallgatók szélesebb köréhez jutnak el, ami előnyös lehet mind az érintettek tájékoztatása, mind az MKE taglétszámának bővítése szempontjából. A kérést az SZB egyhangúan támogatta.

Budapest, 2008. október 20.

Összeállította: **Szépvölgyi János**

Tájékoztató az MKE IB

Hol talákoztam a kémiával és miért vonzó számomra?

című rajzpályázat résztvevőinek

A rajzpályázat meghosszabbított határidejéig, 2008. november 30-ig váratlanul nagyszámú, az ország 21 iskolájából összesen 100 pályázat érkezett be. A pályázatok feldolgozása folyamatban van. A pályázók teljes névsorát közzétesszük az egyesület honlapján, de az összes pályamű közszemlére bocsátására sajnos nincs lehetőségünk. Ezért a zsűri a pályázatokat előzsűrizésnek vetette alá, és 30 pályamunkát ítelt olyannak, melyre az MKE honlapján szavazni lehet. A zsűri is ebből a 30 műből választotta ki az általa legjobbnak ítelt 10 munkát. A 30 alkotás beszkennelése folyamatban van, és hamarosan látható lesz az egyesület honlapján (www.mke.org.hu). A közönségzavazatokat 2009. január 5. és 25. között lehet leadni a honlapon megadott módon. A végső eredményhirdetésre a lap márciusi számában kerül sor.

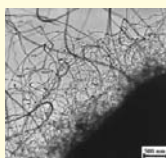
A pályázók elnézését kérjük az értékelés elhúzódásáért, de ezt kérjük betudni az örömdetesen nagy számban beérkezett pályázatoknak.

Budapest, 2008. december 8.

Kiss Tamás
főtítkárhelyettes

HUNGARIAN CHEMICAL JOURNAL

LXIV. No. 1. January 2009



Contents

Klára Hernádi–Zoltán Németh:
On the Carbon Nanotubes – In a Nutshell

György Fráter: Recent Results in Fragrance Chemistry–New Molecules, Processes, Precursors and the Sweat



Molecules in Space and Time
Scientific Meeting of the Section of Chemical Sciences of the Hungarian Academy of Sciences

István Próder: Historical Anniversaries in Chemistry with Hungarian Reference in 2009

ChemBits (Edited by **Gábor Lente**)

The Society's Life

News of the Month



INFORMÁCIÓK

Tájékoztató Munkatársaink részére

Tartalmi célkitűzések

1. A Magyar Kémikusok Lapja (MKL) a Magyar Kémikusok Egyesületének havonta megjelenő hivatalos lapja; téma-, hír- és magazin-folyóirat, amely műszaki ismeretterjesztő feladatokat is ellát. A lap az egyesület tagjait és az érdeklődőket a kémia és a vegyipar újdonságairól és az e területeket érintő hírekről, eseményekről összefoglaló és közérthető módon, magyar nyelven, mérnöki szinten tájékoztatja.

2. A lap célja a gyakorlatban is felhasználható, általános érdeklődésre számíto, közérthető információk és aktuális egyesületi és szakmai hírek közlése cikkek és szemleszerű blokkok, rovatok formájában. Ismeretterjesztő cikkeink témái: alaptudományi összefoglalók, új gyártmányok és új technológiák, új gépek, készülékek és műveleti megoldások, folyamatirányítás, gyakorlati analitika, vállalatok élete és működése, hazai mérnöki megoldások, egészségvédelem–biztonságtéchnika–környezetvédelem, vegyipari termékek fogyasztóvédelme, termékfelelősség, üzemtechnika, vegyipar-tervezés, vegyipari gazdasági és pénzügyek, iparpolitika, a kémia oktatása. A blokkok, rovatok címei: *A kémia és a társadalom, Interjúk érdekes személyiségekkel, A kémia és a gazdaság, A vegyipar és kémiatudomány, Szakmatörténet, egyesülettörténet, Arképcsarnok, Kémia a közép- és felsőoktatásban, Újdonságok, érdekességek a kémiában, A kémia a médiában, Könyvajánló, Egyesületi hírek.*

Egy-egy közlemény témáját vagy a szerkesztőség jelöli ki, amelynek kidolgozására felkéri az illetékes szerzőt, de örömmel fogad a szakmai közönség köréből a fenti célokra megfelelő kéziratokat is. A szerkesztőség spontán felvetődött témákat is fogad, de ezeket és tartalmi körüket célszerű előzetesen egyeztetni a szerkesztőséggel. A szerkesztőség egy-egy fejlődési irányzat, egy-egy új gyártmány vagy technológia teljes egészének bemutatását kéri a szerzőktől.

3. Kérjük szerzőinket, hogy mondanivalóikat *tömören és jól érthetően* fogalmazzák meg. Mellőzzék az öncélú történeti áttekintést, az általános bevezetést, illetve ezeket csak a közlemény megértéséhez okvetlenül szükséges terjedelemben adják meg. A közlemény *címe* legyen rövid és konkrétan tájékoztasson a tartalomról. A *bevezetés* tartalmazza a munka célkitűzéseit és tárgyát. A közlemény *fő részét* a téma logikus szerkezetű, tömör és középfokú végzettségű vegyész számára érthető leírása képezze. Csak feltétlenül szükséges számú irodalmi hivatkozást adjunk meg.

4. Kérjük, hogy *közleményeik teljes terjedelme* (a kézirtartozékokkal együtt) *ne haladja meg a 10 gépelt oldalt* (szóközökkel együttesen legfeljebb 25 ezer karaktert, ábrák és táblázatok esetén ebből levonva az elfoglalt felületnek megfelelő karakter-számot).

5. A beérkezett közleményeket szerkesztőségünk először témájuk és kidolgozásuk jellege szerint értékeli, fenntartva a jogot a közlemények lektoráltatására. Ezt követően a közleményeket tartalmi helyesség, nyomdai előkészítés szempontjából értékeli és véleményét a lektori véleménnyel együtt visszaküldi az elsőnek feltüntetett szerzőnek, kérve a kézirat módosítását. A szerzők a közleményen a szükséges javításokat elvégzik és a javított változatot eljuttatják a szerkesztőségre. A tördelési munkák elkészülése után még kérhetjük a kefelevonatok elektronikus változatának gyors ellenőrzését is a szerzőktől. A szerkesztőség fenntartja a jogot a közlemény stilisztikai, egyértelmű elírási hibáinak javítására és a kismértékű rövidítésre.

6. A közlemények *tartalmáért* (adatvédelem) és *közölhetőségéért* (pl. szabadalmi szempontok) a szerzők felelősek. Szakmai vita esetén a szerkesztőség közli a szerző álláspontját, de fenntartja a jogot a szakmai ellenvéleményeknek a lapban való nyilvánosságra hozatalára.

7. Szerzőink, hagyományainknak megfelelően, tiszteletdíjban nem részesülnek, de a közleményüket tartalmazó pdf-fájlt a lapszám megjelenését követő 2 héten belül e-mail címükre megküldjük.

Kézirat-előkészítés és külalak

8. Kérjük, hogy a *word.doc* vagy *word.rtf* fájlformátumban elkészített, a szöveges részen kívül *elhelyezett táblázatokat és ábrákat tartalmazó közleményt* közvetlenül az mk1@mke.org.hu elektronikus levelezési címre is küldjék be, de kérjük, hogy az esetleges torzítások kizárására ez esetben is egy kinyomatott és aláírt példányt postázzanak szerkesztőségünkbe (1027 Budapest, Fő u. 68.). A kézirtaton legyen bejelölve a cikkszerkezet: **Főcím**, **Alcím**, **Belső alcím**. A tördelt szövegek elektronikus változatának gyors ellenőrzéséhez és az esetleges gondok gyors elintézésére érdekében kérjük, szíveskedjenek elérhetőségüket (e-mail cím, telefonszám) a közlemény benyújtásakor külön közölni.

9. A címdoldalon a szerzők nevei után lábjegyzetben kérjük feltüntetni munkahelyi vagy lakcímeiket és e-mail címeiket. Amennyiben e-mail címüknek a közleményben való megadásához nem járulnak hozzá, kérjük, ezt külön jelezzék.

10. A számszerű adatokat a szöveges rész után elhelyezett *táblázatban* vagy *ábrán* (de nem mindkettőben) is célszerű bemutatni. Ezeknek legyen arabszámú és ma-

gyar címe, az adatok mértékegységei szerepeljenek a megfelelő rovatokban és a szöveges részen legyen hivatkozás rájuk. A számokat helyi érték szerinti hármastagolásban jelöljük (pl. 12 345,6). Az ábrák méreteit úgy kell megválasztani, hogy lehetőleg ne haladja meg a cikkek esetén a 80 mm-es hasábszélességet, de a bemutatni kívánt összefüggés a kellő pontossággal leolvasható legyen. Kérjük, hogy az ábrák, diagramok szövegeinek méretezésénél vegyék figyelembe, hogy a betűk a végső méretnél is jól olvashatóak legyenek. Ehhez az ábrák betűmérete nem lehet 4 mm-nél kisebb. A szerzők – kihasználva a színes megjelenés adta lehetőségeket – törekedjenek *színes ábrák, fényképek közlésére*. Ezeket 300 dpi felbontással jpg, pdf vagy tif kiterjesztésű fájlokban kérjük csatolt fájlban beküldeni. Az ennél kisebb felbontásban kapott képeket át kell állítani erre az értékre, ami mindenképpen a kép méretének csökkenését eredményezi. A 72 dpi-s képek a nyomdai feldolgozás során át lesznek állítva 300 dpi-s felbontásra. Ezzel az eredeti kép mérete a negyedére csökken. 45 mm/300 dpi-nél keskenyebb/kisebb képet nem érdemes illusztrációként leadni. Ekkora kép pl. a 4 hasábos oldalon 1 hasábnyi.

Nem saját illusztrációk esetén azok jogtisztaságáról a szerzők kötelesek gondoskodni; a forrásnak az ábra aláírásában való feltüntetésével is. Vonatkozik ez az internetről származó anyagokra is.

Az ábrák számát és címét az ábra alatt középen helyezték el például a következőképpen: *2. ábra.* Ábracím leírása. Az ábrákon a feliratokat nagybetűvel szíveskedjenek kezdeni. A szám- vagy betűjelzések magyar nyelvű magyarázatát minden esetben az ábracím alatt közöljük. A közlés módja: szám vagy betű (félzárójel, illetve pont nélkül dőlt betűvel, utána kisbetűvel kezdve a magyarázó szöveg, azután pontosvessző, majd a következő szám, ill. betű stb.). Az ábraaláírás tartalmazza az ábra jobb megértését szolgáló szövegrészt is.

A táblázatok felett fel kell tüntetni jobbra zártan, dőlt betűvel a táblázat számát (pl. 2. *táblázat*) és alatta középtűt félkövérrel a címet. Fontos, hogy tabulálás nélkül ne készítsenek táblázatot, mert a táblázat rekonstruálása a kiadványszerkesztő programba való behívást követően igen nehézkes. Kérjük a táblázat oszlopait bevonallazni és a fejezatsorokba lévő szöveget, a mennyiség nevét vagy jelét a mértékegységtől vesszővel elválasztani.

A közleményben levő *képletekre, egyenletekre* félkövér római számmal hivatkozzanak a szövegben. A matematikai egyenletek mennyiséget kifejező tényezőit dőlt betűsen kell szedni. Kérjük, hogy a nem magyar betűjeleket, különleges írásjeleket a nyomda részére külön jelöljék a kézirat bal oldali margóján, és ha mód van rá, ne a „szimbólumbeszúrás” menüt, hanem a symbol fontkészlet karaktereit használják. Hasonlóképpen elveszhetnek a képletek speciális karakterei; ezek csak az írott anyagból való beszkeneléssel nyerhetők vissza.

Kérjük szerzőinket, hogy a közleményük szöveges részében kiemelését szeretnének alkalmazni, a dőlt betűs jelölést és ne a vastag betűt alkalmazzák.

11. Az irodalmi hivatkozás az *Irodalom* bibliográfiai adatainak sorszámával történjen. Az irodalmakat azok sorszámával, a szöveges részen szögletes zárójelbe való helyezéssel adják meg. A közlemény végén összegyűjtött Irodalomban adják meg a szerző családnévét és utónevének kezdőbetűjét. Az utónev kezdőbetűje után pontot tegyenek. Több szerző esetében az egyes neveket vesszővel választák el. Az utolsó szerző neve után is tegyenek vesszőt, amit a mű címe követ. Idegen nyelvű könyv esetén az eredeti címet közöljük. Könyvirodalomnál ezt követi a könyv kiadójának megnevezése, a kiadás földrajzi helye (város), majd a kiadás éve. Folyóiratcímek esetében a folyóirat rövidítése kerül a mű címe helyébe, utána pont következik. Ezután adják meg a megjelenés évét kerek zárójelben, majd az évfolyam számát (a kötetszámot), utána vesszővel, majd az idézet kezdő oldalszámát, utána ponttal. (Pl. A. K. Hámori, P. T. Miskolci, S. Y. Hertz, Inorg. Chem., (1978) 32, 178. H. C. Freeman, Coordination Chemistry, Wiley, New York, 2003. Kolosi T., in Az energiagazdálkodás kémiai vonatkozásai, Akadémiai Kiadó, Budapest 1999, 158.o.)

12. Az ismeretterjesztő cikkek esetén a kézirat végén adják meg a közlemény rövid (max. 10 gépelt soros) *összefoglalását* (tartalmi kivonatát) magyar és angol nyelven. Ez tartalmazza a szerző(k) neve(i)t dőlt betűvel, kettőspont után a közlemény címét félkövér betűvel, majd a rövid tartalmi ismertetést.

A mértékegységek jelölése

13. Az alábbiakban felsoroljuk a leggyakrabban használt mennyiségek és mértékegységek nevének és jelének szabályos alakját. A decimális szorzókat előtaggal, ún. prefixummal helyettesítsék. A tört és a szorzat alakú egységben a prefixumot az egység elé írják: pl. kJ/kg, mN/m². Összetett prefixumot ne alkalmazzanak.

a) A nem SI-mértékegységek használatát lehetőség esetén kerüljük. Különösen vonatkozik ez azokra, melyek rövidítése az alap betűkészletben nem található meg, pl. az Angström, helyette a nm-be vagy a pm-be átszámolt érték használatát ajánljuk.

b) Az anyagmennyiség mértékegységének neve mol, nemzetközileg elfogadott jele mol. Helytelen, ha az anyagmennyiség neve helyett mólok számát vagy mólszámot írunk.

c) További használható mértékegységek (jelük): perc (min), óra (h), nap (d).

d) További használható mértékegység (jel): tonna (t), törtrész: gramm (g), deka-gramm (dag vagy dkg).



A Magyar Kémikusok Lapjának médiaajánlata

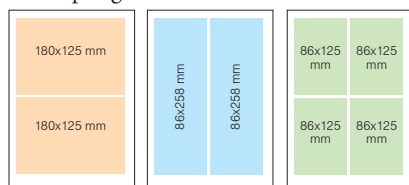
Tisztelt Partnerünk!

A Magyar Kémikusok Lapja (MKL) a Magyar Kémikusok Egyesületének (MKE) 1945-ben alapított, egyetlen magyar nyelvű, a kémiával általában, annak minden területével foglalkozó folyóirata, az MKE hivatalos lapja. Szerkesztésének legfontosabb célkitűzése a szakmai ismeretterjesztés és tapasztalatcsere a kémia valamennyi területén; a vegyipari és kémiatudományi, a közép- és felsőfokú szakoktatási és egyesületi hírek közlése.

Az MKL-ben megjelenő *hirdetések és fizetett közlemények* havonta az MKE tagjaihoz és az előfizetőkhez jutnak el. Olvasóink között található az ország valamennyi vegyipari gyárának, illetve kémiával és kémiailag technológiával foglalkozó oktatási és kutatóintézetének és intézményeinek döntéshozói és véleményformálói.

Az MKL színes és fekete-fehér hirdetéseket egyaránt megjelentet. Kérjük, hogy a hirdetéseket az alábbi minőségi követelmények szerint küldjék meg szerkesztőségünknek.

A lap vágott mérete: 205×290 mm.



A hirdethető felület mérete kifutó egész oldal esetén 215×300 mm (körben 5–5 mm rátöltéssel); egész oldal esetén 180×258 mm (laptükör);

- fekvő fél oldal esetén 180×125 mm;
- álló fél oldal esetén 86×258 mm;
- negyed oldal esetén 86×125 mm.

Lapunk a tárgyhoz 5. napjáig jelenik meg.

Hirdetési alapidjaink a következők (ezer Ft-ban, ÁFA nélkül):

Terjedelem	Fekete-fehér	Színes belív	Borító II., III.	Borító IV.
Egész oldal	88	160	+20%	+30%
Fél oldal	50	100	+20%	+30%
Negyed oldal	32	–	+20%	+30%

Többszöri megjelenéskor engedményt biztosítunk. A negyed oldalnál kisebb felületű hirdetési igényt egyedi megbeszélés alapján tudjuk kiélegetni.

A *fizetett közlemények (PR-cikkek)* megjelentetésének díja megegyezik a fekete-fehér hirdetés alapidjával. Megegyezés szerint A4 méretű (205×290 mm, vágott) *szórólapot és prospektust* is elhelyezhetünk a Magyar Kémikusok Lapjában. A PR-cikk kéziratának leadási formája megegyezik az egyéb cikkekével (lásd az MKL útmutatóját).

Fogalom	Mértékegység neve	Mértékegység rövidítése
Erő	newton	N
Nyomás	pascal	Pa
Munka és energia	joule	J
Hőmérséklet	kelvin, Celsius-fok	K, °C
Frekvencia	hertz	Hz vagy s ⁻¹
Fordulatszám		Hz vagy s ⁻¹
Hővezető képesség		Wm ⁻¹ ×K ⁻¹ = J×s ⁻¹ ×m ⁻¹ ×K ⁻¹
Hőátadási tényező		J×s ⁻¹ ×m ⁻² ×K ⁻¹
Felületi feszültség		N×m ⁻¹
Dinamikai viszkozitás		N×s×m ⁻¹
Kinetikai viszkozitás		m×s ⁻¹

Várjuk jelentkezésüket, kérdéseikkel forduljanak szerkesztőségünkhöz! További felvilágosítással készséggel állunk rendelkezésre.

Süli Erika, 1027 Budapest, Fő u. 68.

Tel.: 201-6883.

E-mail: mkl@mke.org.hu.

Kiss Tamás
felelős szerkesztő

Tisztelt Hirdető!

Technikai tudnivalók a Magyar Kémikusok Lapjában megjelenő hirdetések leadásához

Nyomatási eljárás: íves ofset.

Papírminőség:

- borító: 150 g műnyomó;
- belív: 80 g műnyomó.

Mivel a nyomda CtP-rendszerrel dolgozik (*Computer to Plate – a filmre világítás és a montrozás helyett közvetlenül lemezre másolják az oldalakat*), csak elektronikus formátumban fogadja a hirdetéseket. A kész anyagot pdf-ben (Press pdf) vagy tiff képformátumban kérjük leadni. A képfelbontás: 300 dpi.

Minden esetben kérünk egy színhelyes próbanyomatot a hirdetésről.

Előkészített, de nem nyomdakész hirdetés esetén

- emblémákról, fotókról jó minőségű papír eredetit, diát vagy negatívot kérünk;
- a számítógépes adathordozón átadott grafikai elemek minimális felbontása: 300 dpi;
- amennyiben nem tördelt hirdetést küldenek, kérjük a hirdetés vázlatát nyomaton mellékelni.

Az adathordozón érkező hirdetések fájlformátumai:

- szövegállomány: doc, rtf, txt;
- képállomány: tiff, eps, psd, jpg/jpeg;
- tördelt hirdetések: qxd, cdr, tiff, eps, psd.

A kép- és a szövegállomány külön fájlban legyen, a hirdetésben szereplő fontokat kérjük mellékelni.

- Fogadott adathordozók: CD-R, CD-RW, pendrive.

A hirdetések anyagait igény szerint az ftp-szerverre is feltölthetik.

A digitális anyagokra vonatkozó nyomdai követelmények a <http://www.avaloni.hu/digianyag.htm> linkről letölthetők.

Az esetlegesen még felmerülő kérdésekre készséggel válaszolunk! (Horváth Imre: e-mail: thimre@chello.hu.)

Írásmód

14. Az általánosan elfogadott szakkifejezéseket, vegyületeket a „Kémiai helyesírási szótár” (Fodorné Csányi Piroška, Fábíán Pál, Hőnyi Ede, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1982), a mértékegységeket és a mennyiségek nevét és jelét „A fizikai-kémiai definíciók és jelölések” (Riedel Miklós, Tankönyvkiadó, 1990) szerint kell írni. A magyar kémiai elnevezés és helyesírás szabályait a „Szervetlen kémiai nevezéktan” (Fodorné Csányi Piroška, Akadémiai Kiadó, Budapest, 2008) és az „Útmutató a szerves vegyületek IUPAC-nevezéktanához” (Nyitrai József, Nagy József, Magyar Kémikusok Egyesülete, 1998) című kiadványokban foglaltak szerint alkalmazzák. A műszaki helyesírás szabályait a „Műszaki helyesírási szótár” (Fodorné Csányi Piroška, Fábíán Pál, Csengeri Pintér Péter, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1990) szerint kérjük követni.

A szerkesztőség