A TARTALOMBÓL:

A megosztott dicsőség dupla dicsőség

A laboratóriumi munkának nem csak izzadságszaga van

Kémikus a kávézóban

MAGYAR KÉMIKUSOK LAPJA

A MAGYAR KÉMIKUSOK EGYESÜLETE HAVONTA MEGJELENŐ FOLYÓIRATA • LXVII. ÉVFOLYAM • 2012. SZEPTEMBER • ÁRA: 850 FT

Az IUPAC periódusos rendszere

1																	18
1 H hydrogen [1.007; 1.009]	2											13	14	15	16	17	2 He helium 4.003
3 Li lithium [6.938; 6.997]	4 Be beryllium 9.012											5 B boron [10.80; 10.83]	6 C carbon [12.00; 12.02]	7 N nitrogen [14.00; 14.01]	8 O oxygen [15.99; 16.00]	9 F fluorine 19.00	10 Ne neon 20.18
11 Na sodium 22.99	12 Mg magnesium 24.31	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13 Al aluminium 26.98	14 Si silicon [28.08; 28.09]	15 P phosphorus 30.97	16 S sulfur [32.05; 32.08]	17 Cl chlorine [35.44; 35.46]	18 Ar argon 39.95
19 K potassium 39.10	20 Ca calcium 40.08	21 Sc scandium 44.96	22 Ti titanium 47.87	23 V vanadium 50.94	24 Cr chromium 52.00	25 Mn manganese 54.94	26 Fe iron 55.85	27 Co cobalt 58.93	28 Ni nickel 58.69	29 Cu copper 63.55	30 Zn zinc 65.38(2)	31 Ga gallium 69.72	32 Ge germanium 72.63	33 As arsenic 74.92	34 Se selenium 78.96(3)	35 Br bromine 79.90	36 Kr krypton 83.80
37 Rb rubidium 85.47	38 Sr strontium 87.62	39 Y yttrium 88.91	40 Zr zirconium 91.22	41 Nb niobium 92.91	42 Mo molybdenum 95.96(2)	43 Tc technetium	44 Ru ruthenium 101.1	45 Rh rhodium 102.9	46 Pd palladium 106.4	47 Ag silver 107.9	48 Cd cadmium 112.4	49 In indium 114.8	50 Sn tin 118.7	51 Sb antimony 121.8	52 Te tellurium 127.6	53 I iodine 126.9	54 Xe xenon 131.3
55 Cs caesium 132.9	56 Ba barium 137.3	57-71 lanthanoids	72 Hf hafnium 178.5	73 Ta tantalum 180.9	74 W tungsten 183.8	75 Re rhenium 186.2	76 Os osmium 190.2	77 Ir iridium 192.2	78 Pt platinum 195.1	79 Au gold 197.0	80 Hg mercury 200.6	81 Tl thallium [204.3, 204.4]	82 Pb lead 207.2	83 Bi bismuth 209.0	84 Po polonium	85 At astatine	86 Rn radon
87 Fr francium	88 Ra radium	89-103 actinoids	104 Rf rutherfordium	105 Db dubnium	106 Sg seaborgium	107 Bh bohrium	108 Hs hassium	109 Mt meitnerium	110 Ds darmstadtium	111 Rg roentgenium	112 Cn copernicium		114 Fl flerovium		116 Lv livermorium		

rendszám
Vegyjel
név
relatív atomtömeg

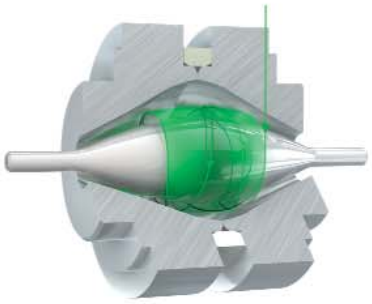
57 La lanthanum 138.9	58 Ce cerium 140.1	59 Pr praseodymium 140.9	60 Nd neodymium 144.2	61 Pm promethium	62 Sm samarium 150.4	63 Eu europium 152.0	64 Gd gadolinium 157.3	65 Tb terbium 158.9	66 Dy dysprosium 162.5	67 Ho holmium 164.9	68 Er erbium 167.3	69 Tm thulium 168.9	70 Yb ytterbium 173.1	71 Lu lutetium 175.0
89 Ac actinium	90 Th thorium 232.0	91 Pa protactinium 231.0	92 U uranium 238.0	93 Np neptunium	94 Pu plutonium	95 Am americium	96 Cm curium	97 Bk berkelium	98 Cf californium	99 Es einsteinium	100 Fm fermium	101 Md mendelevium	102 No nobelium	103 Lr lawrencium

Két elemmel több

Júniusban az IUPAC jóváhagyta a 114-es rendszámú fleróvium (Fl) és a 116-os livermórium (Lv) nevét

INTERNATIONAL UNION OF PURE AND APPLIED CHEMISTRY

Thermo SCIENTIFIC



HR-AM LC/MS rendszerek Orbitrap™ technológiával:

Q Exactive asztali hibrid kvadrupol-Orbitrap LC-MS/MS

A Q Exactive ideális eszköz célvegyületek mennyiségi meghatározására és egyedülálló felbontása révén (> 140 000) ismeretlen vegyületek azonosítására is, kompromisszumok nélkül. Egyesíti a hármas kvadrupol készülékek érzékenységét a nagyfelbontású és nagy tömegpontosságú analizátorok azonosítási képességeivel.

Orbitrap Velos Pro hibrid LC/MS^n tömegspektrométer

Az Orbitrap Velos Pro a megbízható szerkezetmeghatározás etalonja, amelyben az Orbitrap analizátor a Thermo Scientific legújabb, megnövelt érzékenységet biztosító LTQ Velos Pro lineáris ioncsapda tömegspektrométeréhez kapcsolódik. Fragmentációs lehetőségek széles választéka: CID, HCD, ETD.

Orbitrap Elite hibrid LC/MS^n tömegspektrométer

A Thermo Scientific legújabb, a korábbinál magasabb feszültségen működő Orbitrap analizátora a jelenleg elérhető legnagyobb tömegfelbontást biztosítja (> 240 000). Az LTQ Velos Pro lineáris ioncsapdával kiegészülve az Orbitrap Elite a legsokoldalúbb kutató LC/MS, amely a proteomikai, lipidomikai, metabolomikai kutatások ideális eszköze.

További információ: **www.planetorbitrap.com**

Kizárólagos képviselet:

UNICAM Magyarország Kft., 1144 Budapest, Kőszeg u. 27.
Telefon: 1-221-5536 • Fax: 1-221-5543
E-mail: unicam@unicam.hu • Web: www.unicam.hu

UNICAM Magyarország Kft.

MAGYAR KÉMIKUSOK LAPJA
HUNGARIAN CHEMICAL JOURNAL
LXVII. évf., 9. szám, 2012. szeptember

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

Szerkesztőség:
Felelős szerkesztő: KISS TAMÁS
Olvasószerkesztő: SILBERER VERA
Tervezőszerkesztő: HORVÁTH IMRE
Szerkesztők:
ANDROSITS BEÁTA, BANAI ENDRE, JANÁKY CSABA, LENTE GÁBOR, NAGY GÁBOR, PAP JÓZSEF SÁNDOR, ZÉKÁNY ANDRÁS
Szerkesztőségi titkár: SÜLI ERIKA
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, SZEBÉNYI IMRE, TÖMPE PÉTER, ZÉKÁNY ANDRÁS

Kapják az egyesület tagjai és a megrendelők
A szerkesztésért felel: KISS TAMÁS
Szerkesztőség: 1015 Budapest, Hattyú u. 16.
Tel.: 36-1-225-8777, 36-1-201-6883,
fax: 36-1-201-8056
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: 36-1-455-5050
Terjeszti a Magyar Kémikusok Egyesülete
Az előfizetési díjak befizethetők a CIB Bank 10700024-24764207-51100005 sz. számlájára „MKL” megjelöléssel
Előfizetési díj egy évre 10 200 Ft
Egy szám ára: 850 Ft. Külföldön terjeszti a Batthyany 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,
1015 Budapest, Hattyú u. 16. Tel.: 36-1-201-6883,
fax: 36-1-201-8056, e-mail: mkl@mke.org.hu
Aktuális számaink tartalma, az összefoglalók és egyesületi híreink, illetve archivált számaink honlapunkon (www.mkl.mke.org.hu) olvashatók
Index: 25 541
HU ISSN 0025-0163 (nyomtatott)
HU ISSN 1588-1199 (online)

A lap megjelenését a Nemzeti Kulturális Alap támogatja

Nemzeti Kulturális Alap

KEDVES OLVASÓK!

A vegyészutánpótlás-képzés egyik neuralgikus pontja már a középiskolában megjelenik. Sok iskolában nincs kísérleti oktatás – részben adminisztratív, részben anyagi szempontok miatt. A diákok nem jutnak élményhez a kémiaórákon, és ezért nem is érdeklődnek a tudományág iránt.

A folyamatot már 30 évvel ezelőtt érzékeltem, amikor a lányom kísérletet szinte sohasem látott a gimnáziumban. Egy beszélgetés során megkérdeztem, mit tud az arzénről. Jó tanuló volt, válaszolt: $1s^2\ 2s^2 2p^6\ 3s^2 3p^6$… És a vegyületeiről? Semmit! Mérgező? Azt nem tudom.

Egyetemi pályafutásom elején diákként, majd asszisztensként láttam, hogy Erdey László professzor óráinak 36–38%-ában kísérleteket mutatott be a vegyészhallgatóknak. Így tárgyalta a folyamatokat, magyarázta az effektusokat. Ezek után csodálkozunk azon, hogy nincs utánpótlás a vegyész- és tanárképzésben?

Az egyetemeken szinte megszűnt a szaktanárok oktatása. Van, ahol a jelentkezések hiánya miatt nem indult képzés, a többi egyetemen egy kézen megszámolható a hallgatók létszáma.

Ezek ismeretében nagyon biztatónak tűnik, hogy több helyen jelentős összegeket fordítottak a kísérletes középiskolai kémiaoktatásra. Különböző EU-s támogatásokból, pályázatokból a Petrik Lajos Szakközépiskola több mint 1 milliárd forintot kapott (625 milliót felújításra, 271 milliót eszközfejlesztésre, további 210 milliót szakmai-módszertani fejlesztésre), ahogy cikkünkben olvashatják. 11 iskola nyert 1–1 millió eurót a természettudományos szakok fejlesztésére, ahol a diákok saját kísérleteik során szerezhetnek ismereteket. A pályázatot elnyerő iskoláknak 10–12 kiválasztott iskola tanárait és diákjait is rendszeresen vendégül kell látniuk az új laborokban. További pályázatok is folyamatban vannak.

Az új lehetőségek, valamint a tanárképzés osztatlanná tételével a kémiát tanító pedagógusok száma emelkedni fog, és nő az érdeklődés a kémia és tanítása iránt.

Az oktatáshoz jó pedagógus is kell. Legyen szabad megemlítenem, személyes érintettségem miatt, hogy a kísérletező tanár munkája eredményes lehet. A legendás hírű tanár, Vermes Miklós első munkahelyén, a Fasori Evangélikus Gimnáziumban 1942-től (a kémia gimnáziumi bevezetésétől) 1952-ig (az iskola megszüntetéséig) 9 olyan személyt tanított, akik később az MTA doktorai lettek. Ez, azt hiszem, nem volt véletlen. Szeptemberben az iskola utca felőli kertjében szobrot avatnak tiszteletére!

A témához kapcsolódva megemlítem, hogy a kémikus-utánpótlás nevelése a középiskolák után az egyetemeken folytatódik. E számban köszönthetjük Pretsch Ernő professzort (Zürich, ETH), aki idén kapta meg az MKE legmagasabb kitüntetését, a Fabinyi Rudolf-emlékérmet, mert a továbbképzésben, doktoranduszképzésben jelentős segítséget nyújtott magyar fiataloknak. Gratulálunk, és további eredményes munkát, jó egészséget kívánunk!

Liptay György
az MKE alelnöke

TARTALOM

Címlap:
Az IUPAC periódusos rendszere
(I. 280. oldal)

KITÜNTETETT KÉMIKUSOK
A laboratóriumi munkának nem csak izzadságszaga van, hanem varázsa is. Beszélgetés **Szántay Csaba** Gábor Dénes-díjas akadémikussal 258
A megosztott dicsőség dupla dicsőség. Beszélgetés **Pretsch Ernő** Fabinyi-díjas kémikussal 260

VEGYIPAR ÉS KÉMIATUDOMÁNY
Oláh Julianna–Krámos Balázs: Számításos enzimológia. Számítógépes modellezés alkalmazása az enzimek működésének felderítésében 264
Zákányiné Mészáros Renáta: Élőlények hormonrendszerét befolyásoló anyagok eltávolítása hagyományos vízkezelési eljárásokkal 268
Lente Gábor: Kémikus a kávézóban – miniopera öt felvonásban 273
Bruckner-termi előadások
Pálovics Emese: Rokon molekulaszerkezet hatása az enantiomerkeverékek elválasztására 274
Székely Edit: Szuperkritikus szén-dioxid: új lehetőségek az optikailag aktív vegyületek előállításában 275

A KÉMIA KIVÁLÓSÁGAI
Baranyiné C Veres Anna: A Petrik Lajos Két Tanítási Nyelvű Vegyipari, Környezetvédelmi és Informatikai Szakközépiskola 277

VEGYIPAR ÉS KÉMIATÖRTÉNET
Vegyészkalendárium (**Pap József Sándor** rovata) 279
Ménes András: Százhatvan éve született Emil Fischer 281

VEGYÉSZLELETEK
Lente Gábor rovata 282

EGYESÜLETI ÉLET 284

A HÓNAP HÍREI 285

A laboratóriumi munkának nem csak izzadságszaga van, hanem varázsa is

Beszélgetés Szántay Csaba Gábor Dénes-díjas akadémikussal

Szántay Csaba 1928-ban született Salgótarjánban. 1946-ban érettségizett a ciszterci rend budai Szent Imre Főgimnáziumában. 1950-ben kitűnő minősítéssel szerzett vegyészmérnöki oklevelet a Budapesti Műszaki Egyetemen. 1955-ben a kandidátusi, 1965-ben a kémiai tudományok doktora fokozatot nyerte el. 1970-ben az MTA levelező tagjává, 1982-ben rendes tagjává választották. 1975-ben Állami Díjjal, 1993-ban Szent-Györgyi Albert-díjjal, 1996-ban a Magyar Köztársaság Érdemrend középkeresztjével, 1999-ben Széchenyi-díjjal tüntették ki. Az Arany János Közalapítvány Nagydíját 2003-ban, a Príma díjat 2006-ban, a Kametani Awardot 2008-ban nyerte el. 2011-ben megkapta a Gábor Dénes-díjat.

1967-ben nevezték ki egyetemi tanárnak. 1978-tól több mint 15 éven át a BME Szerves Kémiai Tanszékének vezetője, jelenleg emeritus professzora. 1989 óta a Magyar Feltalálók Egyesületének elnöke, több mint 250 szabadalom tulajdonosa.

– A kémia mellett milyen más tantárgyak vonzották a fiatal Szántay Csabát az általános és középiskolában?

– Az én ifjú és még ifjabb létemben más rendszerű volt a közoktatás. Hatéves koromtól négy évig (1936–1940) jártam az elemi iskolát. Méghozzá Kelenföldön, miután lakóhelyünk a Budapest–Kelenföld vasútállomás volt: Édesapám ott volt állomásfőnök. Egyetlen fiú voltam a hat testvér között, ezért férfiúi mivoltom (és a lányokkal szemben mutatott nagyképűségem) hamar kidomborodott a családban.

1940-től az érettségimig (1946) a Ciszterci Rend Villányi úton lévő gimnáziumába jártam. A kémia abban az időben még igen kevéssé tett rám mély benyomást, sokkal inkább a különböző sportágak vonzottak. A gimnázium előcsarnokában hosszú ideig függött az arcképem, amit korosztályos magasugró rekorderként érdemeltem ki. Cserkésztársaimmal együtt nyaranta sokszor táborozással töltöttem néhány hetet. Egyik osztálytársam és barátom viszont elkötelezett „kis kémikus" volt, imádott kísérletezni. Az ő hatására elhatároztam, hogy érettségim után én is a Műegyetemre iratkozom be, és vegyészmérnök leszek.

A kémiát elsőéves koromban szerettem meg, elsősorban a laboratóriumban. Fantasztikus élmény volt számomra, amikor két víztiszta folyadékot összeöntöttem, és hirtelen minden kékké vált. Másik két színtelen folyadék elegyítése viszont mélyvörös színt adott. Hirtelen varázslónak éreztem magam. Esténként egy-két kémcsövet és pici vegyszert hazacsempésztem, és vacsora után elkáprázttattam a családot bűvészetemmel. Meg kell mondanom őszintén, hogy a hatás, a megdöbbenés koránt sem volt akkora, mint amilyet vártam. „Úgy látszik, hiányzik rólam a csillagokkal, bolygókkal ékesített varázslóköpeny. Ez az öltözék adná az igazi hatást" – gondoltam magamban. No, de ez a korszak is elmúlt.

– Mikor vált a kémia iránti szeretet, fokozott érdeklődés meghatározóvá pályaválasztásában?

– Jött a magolási korszak, a vizsgákra való felkészülés korszaka. A szerves kémia professzora a legendás hírű Zemplén Géza volt, aki még az első világháború előtt Berlinben a Nobel-díjas Emil Fischernél tanult. Fischer egyike a legnagyobb szerves kémikusoknak, aki a cukroktól a peptideken keresztül a purinbázisokig alapvető felfedezéseket tett és még a gyógyszerkémiában is úttörő munkát végzett. Ő alkotta meg az első hatékony altatókat a barbiturátok körében. Egyik irodalmár kollégája kissé gunyoros mosollyal egyszer így üdvözölte: „Kedves barátom, Ön csodálatos altatót alkotott. Be sem kell vennem, csak le kell tennem az éjjeli szekrényemre és máris alszom." „Milyen csodálatos egybeesése a véletleneknek – válaszolta Fischer, jól rejtett bosszankodással. – Ha netán este az ágyamban az Ön valamelyik regényét kezdem olvasni, perceken belül kiesik a könyv a kezemből és mély álomba merülök."

Közvetlenül a második világháború után Zemplén Géza az Amerikai Egyesült Államokba ment, meghívásra. Sajnos, fejlődő szájrákja miatt hamar haza kellett jönnie. Én őnála vizsgáztam. Az eredmény azon is múlott, hogy megértettük-e a kérdést, hiszen betegsége miatt szavai sokszor nehezen voltak érthetőek. Akkoriban négy osztályzat létezett: jeles, jó, elégséges és elégtelen. Nagy ritkán kitűnő. Szerencsémre a kérdését (milyen gáz fejlődik ebben a reakcióban?) nálam még illusztrálta is, felfelé kanalazó kezeivel indikálva a választ. „Szén-dioxid" – vágtam rá. Megkaptam a kitűnőt, persze még néhány további kérdés után.

Akkoriban a laboroktatás heti 30 óra volt, tehát gyakorlatilag ott éltünk. Ott voltak a szemináriumok is, amelyeket mi, hallgatók tartottunk egymásnak.

A diploma megszerzése után jött a következő probléma. A frissen végző mérnökök a diktatúrában nem állást kerestek, hanem imádkoztak, hogy valami jó helyre irányítsák őket az illetékes minisztérium-

ból. Én a Műegyetemre kerültem a Zemplén-tanszékre.

– Kik, vagy milyen események voltak a legnagyobb hatással Professzor úr gondolkodásának alakulására?

– Zemplén Géza tematikájának megfelelően kutatómunkám először a szénhidrát-kémia területén folyt, és közleményeim is születtek ezen a téren, például a hét szénatomot tartalmazó cukrokról. Zemplén Géza 1956-ban bekövetkezett halála után Bognár Rezső intézeti tanár a debreceni egyetemre került, és az ottani, újonnan létesített Szerves Kémiai Tanszék vezetője lett. A budapesti tanszékre Beke Dénest nevezték ki intézeti tanárként, és engem mellé osztottak be. Mint ipari tapasztalatokkal rendelkező szakember, ő a gyakorlati aspektusokat is hangsúlyozta. Magyarországon hagyománya volt az alkaloidok kémiájának, az Alkaloida Gyár (Tiszaújváros) például morfingyártással foglalkozott.

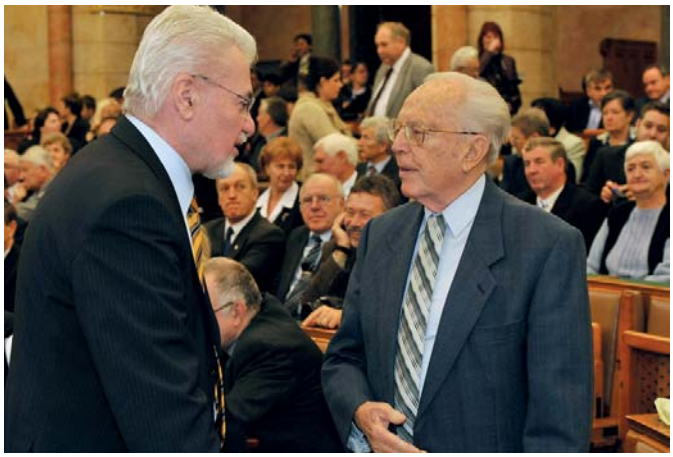
– Professzor úr a szintetikus szerves/gyógyszerkémia egyik nagy alakja. Bemutatná röviden tudományos pályáját, főbb kutatásait?

– Az első komoly célkitűzésem az amőbás dizentériára specifikusan ható Emetin nevű alkaloid iparilag is megvalósítható totálszintézisének kidolgozása volt, amely a Chinoinban realizálódott. Ezen a területen Tőke Lászlóval (későbbi akadémikussal) és Szabó Lajossal dolgoztunk együtt. Kicsit belenéztünk a rovarhormonok és feromonok területére is tanszékünkön, ebben a munkában elsősorban Novák Lajos vett részt. Ezeket a vegyületeket igen sikeresen használják, például Svédországban, hatalmas erdőterületek védelmében. Az EGIS gyógyszergyárral együtt dolgozva sikerült hazánkban is hasznos lépéseket tennünk.

– Azt hiszem, mindenki tudja, hogy Ön a Cavinton „atyja”. Ismertetne néhányat fontosabb tudományos eredményei közül?

– Legnagyobb ipari sikerünk mindeddig a Richter Gyógyszergyárban a növényi alapanyagokból kiindulva elkészített, Cavinton néven forgalmazott gyógyszer ipari totálszintézise volt. A növényi alapanyag (*vinca minor*, magyarul *téli zöldmeténg*) termesztése nagyon bizonytalan. Csak az árnyékos erdőszéleket szereti a növény. Bulgáriában is megpróbálták nagyobb táblákon termeszteni, de az erős napsütés nem kedvezett ennek a megoldásnak.

Nagy erőkkel láttunk neki a totálszintézisnek, és két év alatt megoldottuk a kérdést laboratóriumi szinten. Dr. Kreidl János üzemesítő csapatával együttműködve a méretnövelés is sikeres lett. Egyik este a televízió híradóját néztem odahaza, amikor a bemondó közölte: „Robbanás történt a Richter Gyógyszergyárban.” Jeges marok szorította össze a torkomat. „Csak nem a Cavinton-gyártás üzemesítése közben történt a szerencsétlenség?” – kérdeztem ijedten magamtól. Másnap kiderült, hogy sajnos igen. Szerencsére, személyi sérülés nem történt, de a technológiát módosítani kellett. A perklórsavas sót más sóra cseréltük, és így a robbanás veszélye elmúlt. A Cavinton azóta szép karriert futott be, az egyetlen eredeti magyar gyógyszer, amelynek forgalma meghaladta az egymilliárd dollárt, és ezzel az amerikai „szleng”-ben megkapta a „buck-buster” minősítést.



A Gábor Dénes-díj átadása előtt. Szántay Csabával (jobbra) Pálinkás József beszélget

– Hallgatom a rádiót. Egy jó nevű étterem főszakácsa nyilatkozza a riporternek, hogy ő inkább fizet 40–50 forinttal többet a természetes tengeri sóért, mint a kémiailag előállított konyhasóért, hogy ételeit ízesítse. Kommentálná a népbutítás eme iskolapéldáját?

– Nincs hozzá megjegyzésem.

– Professzor úr munkája során igen szoros kapcsolatot alakított ki a hazai gyógyszergyárakkal. Hogyan látja az egyetemi-akadémiai szféra és a gyógyszergyárak közötti kapcsolatok alakulását/változását/fejlődését az elmúlt 40–50 évben?

– A gyárakkal való együttműködésünk továbbra is folyamatos. A Chinoinban a prosztaglandinok gyártása és így az ebből származó bevétel is folyamatosan növekszik.

– A gyógyszeripar, az ipar – a vegyipar – húzóágazata. Milyen fejlődési irányokat lát perspektivikusnak ma, illetve a közeljövőben a gyógyszeriparban?

– Három kiemelkedő hazai gyógyszeripari cég van. Ezeknek a jelene eléggé különböző. A Richter a vezető cég, annak a kutatása is megmaradt, és fejlődik. Sajnos, a sanofi-aventis/Chinoin gyakorlatilag leépítette a magyarországi kutatását. A harmadik az Egis. A francia tulajdonos, a Servier cég néhány éve külön kutatóintézetet hozott létre szoros francia kapcsolódással, ami jól működik.

A kutatásban és a gyártásban is a biotechnológiai vonal az egész világon az előtérbe került. Ennek legutóbbi hazai megnyilvánulása a Richter által a közelmúltban Debrecenben felavatott kutatócentrum *(lásd az MKL 2012. májusi számát)*.

A gyártás területén vetekszik egymással a természetes és a szintetikus ágazat. Mára már nagyon sok, korábban természetes anyagokból kinyert hatóanyag totálszintézisét megoldották és változott a gyártás alapja. A szintetikus gyártás nagy előnye, hogy a természeti hatások változékonysága nem befolyásolja a gyártás biztonságát. Persze, vannak eljárások, amikor a természetes alapon való gyártás sokkal olcsóbb (pl. a morfin alkaloidok), ilyenkor nem vetélytárs a szintetikus termék. A biotechnológia területén is vetekszik a természetes és a szintetikus ágazat.

– Térjünk vissza az egyetemhez. Az egyetemi oktatói lét egyik nagy pozitívuma a viszonylag könnyű mozgékonyság külföldön, belföldön. Professzor úr fiatal korától kezdve sokszor és sok helyen járt külföldön. Milyen élményekkel, tapasztalatokkal gazdagodott útjai során?

– 1965-ben meghívtak a New York-i Egyetem (State University of New York at Buffalo) gyógyszerkémiai tanszékére. Ott töltöttem közel két évet családommal együtt, és a közös munkából szép közleményeim születtek. Hatéves fiam ott járt első elemibe, így a nyelvet jól megtanulta. Feleségem (szintén vegyészmérnök) ugyancsak az egyetemen dolgozott.

Amerikai tanulmányutam rendkívül hasznos volt. Magyarországon akkoriban még nem létezett például NMR-készülék, ott tanultam meg ennek használatát; az egyik JACS-közleményem kifejezetten ezen alapult.

Az Egyesült Államokban utazásokra is volt alkalmam. Meglátogattam például ké-

sőbbi Nobel-díjas ifjúkori barátomat, Oláh Györgyöt, akivel valaha együtt munkálkodtunk a Műegyetemen a Szerves Kémiai Tanszéken. Ő akkoriban a clevelandi egyetemen dolgozott. A vonat, amelyen utaztam, váratlanul elhagyta az Egyesült Államokat és átment Kanadába. Nagyon rossz érzés fogott el, hiszen az amerikai vízumom csak egyszeri belépésre jogosított: hogyan fogok visszamenni? Mi lesz a Buffalóban rekedt családommal? Végül is a vonat mindenfajta határvizsgálat nélkül visszadöcögött Clevelandbe. Visszafelé Oláh Gyuri hozott autóval, akinek éppen dolga volt New Yorkban és útba ejtette Buffalót.

Utazásaim közül igen emlékezetes volt a New York-i világkiállítás meglátogatása. Mint lelkes amatőr filmező nagyon sok érdekes témát találtam ott. A filmet látogatóimnak itthon ma is sokszor levetítem.

– Történt még valami, amire különösen szívesen emlékszik vissza?

– Hazatértünk – az odakint vásárolt, és idehaza meglehetősen ritka Mercedesszel, amivel akkoriban még fel lehetett vágni a kollégák körében.

Itthon pár éven belül műegyetemi tanár és akadémikus lettem.

– A kísérletes kutatómunka ma már nem egyéni passzió. Kutatók csoportjának összehangolt, jól megtervezett, célzott tevékenysége. Ebben a tevékenységben alapvető az utánpótlás nevelése. Professzor úrnak sikerült jól felkészült fiatalokat maga köré vonzania, akikkel a csoport munkája az aktív évek után is változatlan eredményességgel folytatódhat?

– A laboratóriumi munkának nem csak izzadságszaga van, hanem varázsa is, amivel meg lehet fogni a fiatalokat, és az érdeklődő hallgatókat be lehet csalogatni a tanszékre. Ki lehet, sőt kell építeni egy jó kis csoportot, ami azután tovább építi önmagát.

– Professzor úr több mint 250 szabadalom tulajdonosa. A Magyar Feltalálók Egyesületének elnöke. Az egyesület által adható legmagasabb kitüntetés birtokosa, tavaly innovatív kutatói tevékenysége elismeréseként megkapta a Gábor Dénes-díjat. Ugyanakkor tudja azt is, hogy ma a hazánkban beadott találmányok száma jó, ha tizede a tíz évvel ezelőttinek. Butábbak lettünk? A kutatók száma csökkent ilyen drasztikusan vagy a környezet vált kedvezőtlenebbé az innovatív meglátáshoz, a felfedezéshez? Az új terméket létrehozó, összetett folyamat megvalósításának képességéről már ne is beszéljek, mert ebben sohasem voltunk jók. Mit tegyünk a trend visszafordítása érdekében?

– A kérdésben felvetett gondolatok jó része valósnak tűnik. Ehhez még hozzátenném, hogy a találmányi tevékenység rendkívül összetett. Nagyon oda kell figyelni, időben kell szabadalmaztatni a terméket, ami mindig kockázatot is rejt magában, hiszen előre nem tudható, hogy a termék sikeres lesz-e vagy sem, ugyanakkor a költségek magasak.

A gyógyszeriparban a termék- és eljárás-szabadalom jogi tisztázódása és ez utóbbi megszűnte kétségtelenül visszavetette a találmányi bejelentések számát.

Van azért jó példa is. A nagyszámú (százon felüli típusú) rákbetegség elleni küzdelem ma is a gyógyszerkutatások élvonalába tartozik. A Richter által mintegy 30 éve gyártott és forgalmazott vinblasztin és vinkrisztin alkaloid az árával is kitűnik. A SIGMA cég katalógusa szerint 1 g vinblasztin-szulfát ára 34 000 euró, 1 g vinkrisztin-szulfáté 142 000 euró. Vagyis például az utóbbi alkaloid ezerötszázszor drágább, mint az arany. Nemhiába használták (és használják ma is) azt a szót, hogy *méregdrága*. És egy hölgyet is gyakran szólít így az udvarlója: *Drágám!* Tehát ez az igazán jó üzlet!

– Kívánom Professzor úrnak, hogy kutatóként és találmányi szakemberként is még sok hazai gyógyszer megszületésénél bábáskodjék!

Kiss Tamás

A megosztott dicsőség dupla dicsőség

Beszélgetés Pretsch Ernő Fabinyi-díjas kémikussal

Pretsch Ernő a zürichi Eidgenössische Technische Hochschule (ETH) nyugalmazott professzora, az elektroanalitika, a kémiai szenzorok és a kémiai szerkezetkutatás elismert tudósa.

1960 és 1963 között a Budapesti Műszaki Egyetem hallgatója volt; tanulmányait és későbbi tudományos munkáját Svájcban folytatta. A zürichi ETH-n szerzett diplomát (1965), majd ugyanott PhD-fokozatot (1968) Wilhelm Simon csoportjában. Rendkívüli sokoldalúságát és nyitottságát érzékelteti, hogy három gyakorlatilag független területen ért el meghatározó eredményeket: az NMR-spektroszkópia és általánosságban a szerves molekulák szerkezetének felderítésében, a kemometriában és a kémiai szenzorok fejlesztésében. Mindenben az újat, a kreativitást kereste és ezt leginkább talán a kémiai szenzorok területén találta meg, ahol munkája új szintetikus ionofórok bevezetéséből kiindulva a modern ionszelektív potenciometria kifejlesztésében csúcsosodott ki. Ennek alapján nyerte el az Amerikai Kémiai Társaság Analytical Division Award in Electrochemistry 2005 díját. Pretsch Ernő közel 300 tudományos cikk szerzője; 13 000 fölötti hivatkozással, és 58-as Hirsch-indexszel a világ élvonalbeli kutatóinak egyike.

Rendkívül szoros kapcsolatok fűzik hazánkhoz tudományos téren. 2001-ben az MTA külső tagjának választotta. Több magyar hallgató doktorált nála, és nagyon sok magyar vendégkutatót, doktoranduszt fogadott laboratóriumában. Több mint 10 éven keresztül tagja volt a Magyar Kémiai Folyóirat szerkesztőbizottságának. Kurzusokat tartott doktoranduszoknak a BME-n. Társszervezője volt több hazai konferenciának.

A Magyar Kémikusok Egyesületének Intézőbizottsága Pretsch Ernőnek kiemelkedő szakmai munkásságért és a magyarországi kémia fejlődésében szerzett elévülhetetlen érdemeiért a Fabinyi-emlékérmet adományozta, és 2012. június 25-én ünnepélyes keretek között adta át a kitüntetettnek. Ez alkalomból készült az alábbi beszélgetés.

– Tudomásom szerint kettős célja van a mostani magyarországi látogatásodnak. Mennyiben volt sikeres a szakmai utad?

– A múlt héten a „Svájci hozzájárulás/ Kutatás és fejlesztés – tudásalapú gazdaság prioritási terület" természettudományi projektjeinek szakértőjeként vettem részt egy információs napon, amelyen a támogatott projekteket értékeltük. Ezenkívül több kollegával folytattam szakmai megbeszélést. A mai napon vehettem át a számomra nagy megtiszteltetést jelentő Fabinyi-emlékérmet.

– Legalább két területen maradandót alkottál a kémiában. Röviden bemutatnád kutatásaidat olvasóinknak?

– Abban a szerencsés helyzetben voltam, hogy több érdekes területen is kutathattam. Az egyetemen először a spektroszkópia különböző módszereivel dolgoztam (diplomamunka: IR, disszertáció: proton-NMR, utána a Fourier-spektroszkópia kezdetekor, az 1970-es évek elején a szén-NMR-spektroszkópia). Nem sokkal az ionofóralapú ionszelektív elektródok felfedezése után ionofór tervezéssel és szintézissel kezdtem foglalkozni. Ezt követte a számítógépes ionofór tervezés, amit Enrico Clementinél, az első általánosan használható *ab initio* program (IBMOL) alkotójánál tanultam. A modellezés egyik problémája az, hogy a számítógépes optimálás eredménye nem független a kutató elvárásától. Mivel a programok nem képesek a globális optimum keresésére, a beadott kiinduló konfiguráció befolyásolja az eredményt. Ezért kezdtem genetikus algoritmusokkal foglalkozni, amelyek sokféle kiindulási konfigurációt generálnak automatikusan, függetlenül a tervező vegyész elképzelésétől.

Ezzel párhuzamosan a számítógépes spektruminterpretácó területén is folytattam sok éven keresztül kutatásokat. Még az internet feltalálása előtt készítettünk egy elektronikus könyvet, amely referenciaadatok és -spektrumok mellett spektruminterpretáló és szerkezetgeneráló programokat tartalmazott. Máig is világszerte használják az ekkor készült és azóta folytonosan optimált NMR-spektrumot becslő programjainkat, amelyeket több képletrajzoló és spektrumkiértékelő programcsomagba integráltak.

– Említenél néhányat?

– A ChemDraw talán a legismertebb és a legtöbbek által használt program, és van egy feltörő spanyol cégnek (Mestrelab) egy ugyancsak eléggé elterjedt programja, a Mnova, amelyik szintén alkalmazza a mi becslő modulunkat.

Pretsch Ernő átveszi a kitüntetést Sarkadi Liviától

Wilhelm Simon váratlan halála után, 1992-től kezdve megint főleg ionszelektív elektródákkal foglalkoztam. Az ezt követő évek munkája vezetett a leglátványosabb eredményeinkhez, mivel sikerült 5–6 nagyságrenddel megjavítani az elektródok méréshatárát, a mikromolárisról a pikomoláris tartományba.

– Megvilágítható ez röviden és egyszerűen?

– Visszatekintve triviálisnak tűnik a dolog, mert az elektródák tradicionális felépítése okozta azt, hogy az elektróddal érintkező minta az elektródból kiáramló ionok által szennyeződött. Ezt a zavaró hatást úgy redukáltuk, hogy a membrán belső oldalán levő referencia fémoldat koncentrációját megfelelő fémkomplex oldatával pufferelтük, másrészről kemény membránokat készítettünk a belső referencia ionszivárgása, illetőleg a membrán két oldala közötti ionáramlás minimálisra csökkentése érdekében.

Az egész effektus alapvető megértése nemcsak a méréshatár és az elérhető szelektivitások drasztikus javítását tette lehetővé, hanem több újszerű mérésmód kifejlesztését is.

Annak ellenére, hogy ezeknek a munkáknak az idézettsége nagyon jó, igen kritikus vagyok a tudományos munka minőségének mennyiségben való kifejezésével szemben, és a szcientometria létrejöttét egyenesen katasztrófának tartom. Ha saját munkámat nézem, akkor annak egy lényeges és szerintem nem gyengébb részének sokkal kisebb az idézettsége, míg a szenzormunkáké nagyon magas.

– Mindannyian tisztában vagyunk azzal, hogy egy jó módszert kell összehozni, és ezerszámra jön a hivatkozás. Különösen igaz ez az élettudományok területén, talán még jobban, mint az analitikai kémiában.

– Ráadásul ha megnézem, hogy kiknek köszönhetem e jó idézettség egy jelentős részét, akkor még inkább szembetűnik a számok értelmetlensége. Nem értem, hogy a tudományban dolgozók közül is annyian bedőlnek ezeknek az értelmetlen számadatoknak.

– Egyet is érthetnék azzal, amit mondasz, de azok a szcientometriai mérőszámok, amelyeket például Rólad megadtunk bemutatásod kapcsán, mégiscsak jellemzik azt a nemzetközileg elismert és ismert analitikus tudóst, akit Pretsch Ernő személyében tisztelünk.

– Nem titkolom, hogy valahol büszke is vagyok ezekre a számokra és beismerem, hogy a jó idézettségből előnyöm is van. Például ezek a számok megengedik nekem, hogy az idézetek fontosságát és az

„impaktomániát” kritizálhatom. Amit értelmetlennek látok, az az, hogy a minőséget mennyiségben próbálják kifejezni. Így például abszurdum, hogy 2000 idézetet fele olyan jónak tartanak, mint 4000-et (talán okosabb volna az idézettséget logaritmikus skálán mérni). Az idézettség sokszor véletlenen múlik, és a magas mutatók egyfajta pozitív visszacsatolás eredményei. Ha van egy elismert áttekintő cikked (ami inkább szorgalmi, mint tudományos teljesítmény), azt sokkal többet idézik, mint egy eredeti munkát (és sokkal többen, mint akik valaha a kezükbe vették).

– Az ionszelektív elektródák, de az ionofórok kutatásának is nagy hagyományai vannak a BME-n. A korai időktől sikerült eredményes szakmai együttműködést kialakítanod Pungor Ernő hajdani iskolájával?

– Pungor Ernő a terület egyik úttörője. Nem kis mértékben neki köszönhettem, hogy Svájcba kerültem. Egy rövid beszélgetésen kívül nem ismert engem, és mégis támogatta 1962–63-ban a kiutazási kérvényemet. Őt igazán akkor ismertem meg, amikor már Zürichben éltem, mert jó barátja és rendszeres vendége volt Wilhelm Simonnak, akinél doktoráltam és aki mellett évekig dolgoztam. Amint hazajöhettem Magyarországra, a hetvenes évek második felében három hónapot töltöttem a Műegyetemen Pungor Ernő csoportjában, ahol később is rendszeres vendég voltam és többször tartottam kurzusokat. Szoros kapcsolatban állok utódaival, Tóth Klárával, Horvai Györggyel és az utóbbi időben főleg Gyurcsányi Róberttel, akivel sok közös munkánk volt; ő is, több diákja is dolgozott velem Zürichben. Ha Magyarországra jövök, minden alkalommal találkozom vele.

A Pungor Ernő által 1972-ben először szervezett Mátrafüredi Konferencia az ionszenzorok egyetlen nemzetközi konferenciája. Ezeknek a kiváló minőségű konferenciáknak a szervezésében Gyurcsányi Róberttel már több mint 10 éve én is részt veszek. Nagy siker, hogy a terület legjobbjai rendszeresen több mint 20 országból és négy kontinensről vesznek részt rajta. A múlt héten elkezdtük a következő, 14. Mátrafüredi Konferencia szervezését.

– Az NMR szerkezetkutatásban való alkalmazásáról közösen könyvet is írtatok Tóth Gáborral. Gondolom, nagyon szoros kapcsolat alakult ki a két laboratórium között. Milyen eredményeket hozott ez az együttműködés?

– Nagyon fontosnak tartom az együttműködéseket. Azon az elven, hogy a megosztott kolbász fél kolbász, de a megosztott dicsőség dupla dicsőség, ez sosem vezet rivalizáláshoz, hanem kölcsönös előnyökhöz.

Tóth Gábor az NMR-spektroszkópia nemzetközileg elismert specialistája. Ő is és én is több hasonló tárgyú könyvnek voltunk társszerzői, mielőtt a közös művet elkezdtük. Éppen nemrég vettem kezembe ezt a könyvet, ami annak ellenére, hogy már tíz éve jelent meg, még mindig nagyon aktuális. A könyv nem terjedt el annyira, mint megérdemelné; egyik területe, a számítógépes szerkezetfelderítés nem lett annyira népszerű, mint vártam. Az utóbbi időben gondoltam rá, hogy más szempont szerint átírva kellene új kiadást készíteni ebből a könyvből. Gáborral éppen ma beszéltünk erről.

– A miniatürizálás nagy kihívás ma az analitikai kémiában, mind a szenzorok területén, mind a szerkezetvizsgálatban. Milyen fejlődési irányokat, lehetőségeket látsz ezen a területen?

– A szenzorokkal már a múlt század hetvenes évei óta nagyon kis térfogatban lehet mérni, sejtekben, sőt nagyobb sejtmagokban is. Nekünk is sikerült évekkel ezelőtt néhány mikroliter térfogatban 0,1 nanomoláris koncentrációkat, azaz femtomol alatti mennyiségeket mérnünk. Ezek a szenzorok viszont még csak két dimenzióban voltak igazán kicsik. Azóta sokkal tovább jutott a tudomány. Manapság nanométer nagyságrendű dimenziós szenzorok is léteznek – egyébként ennek a területnek egyik úttörője Gyurcsányi Róbert.

A szerkezetvizsgálat területén a készülékek nagyok maradtak vagy még nagyobbak lettek, de a szükséges mintamennyiség állandóan csökken. A szerkezetfelderítés mikrogramm mennyiségű mintákkal is rutinmunka az erre specializált laboratóriumokban.

– Azért a hordozható készülékek a mozgó laboratóriumok elterjedésével egyre fontosabbá válnak, ami a készülékek méretének csökkentését is megkívánhatja.

– Igaz, de ezeknek a készülékeknek a teljesítőképessége általában a méretcsökkentés érdekében nagyon kicsi, messze elmarad a kutató-, sőt a jobb rutinműszerekétől is. Egy-egy célfeladatra lettek csak kialakítva.

– Magyarország hosszú évek óta a nemzeti összтermékének kevesebb mint 1%-át fordítja kutatás-fejlesztésre, a valamivel kisebb lakosságú Finnország évek óta 3–4%-át, a hasonló méretű, kiemelkedő fejlettségű Svájc a finnhez hasonló K+F adatokkal büszkélkedhet. Az ország vezetői által évtizedek óta hangoztatott társadalmi-technológiai-gazdasági felzárkózás hogyan érhető el a kutatás-fejlesztés ilyen alacsony szintű támogatása mellett?

– Ahogy a kérdést feltetted, szinte provokálod a választ, hogy a kutatás-fejlesztésre fordított több pénz a társadalmi-technológiai-gazdasági felzárkózás előfeltétele lenne. Bár vitathatatlan a pénz szerepe, ezt az összefüggést nem látom ilyen egyszerűnek.

Először is meg kell vizsgálni azt, hogy hogyan használjuk fel a kutatásra szánt pénzt. Az Európai Unió 4. Keretprogramja 1997-ben 16 milliárd eurót adott a „kutatásra”. Ennek nem kevesebb mint 40 százalékát, azaz több mint 6 milliárd eurót a kutatási bürokráciára költöttek és csak 60 százalékot adtak a kutatásra (újabb számokat nem ismerek, de fogadni mernék arra, hogy ez az arány nem lett jobb). A bürokrácia a mai társadalmak rákfenéje, és a kutatási bürokrácia duplán destruktív. Nemcsak azért, mert értelmesebb dolgokra fordítható pénzt használ el, hanem azért is, mert a tudományokkal foglalkozók idejét és energiáját a bürokrácia miatt sok értelmetlen dologra kell pazarolni. Több kiváló fiatal kutatóról tudok, aki a kibírhatatlanul fokozódó bürokratizmus miatt hagyja el Magyarországot és nem a túl alacsony támogatás miatt.

– Nincs közöttünk egyet nem értés.

– Ami a diákokat illeti, a minőség fontosabb, mint a mennyiség. Ezzel kapcsolatban az, hogy az egyetemek támogatása a diákok számával arányos, rendkívül káros politika, mert arra ösztönöz, hogy tartsák meg a gyenge diákokat, ami a minőség rovására megy.

– Az egyetemek sokszor hangoztatják ezt a véleményüket (és szenvednek a következményeitől), csak nincs, aki meghallja.

– Egy másik szempontot is szeretnék megemlíteni. Bár egy korreláció sosem jelent oksági összefüggést, érdekes tény, hogy azokban az európai országokban, ahol a fiatalok nagyobb százaléka végez egyetemet (pl. Spanyolországban, de Németországban is), a fiatalok nagyobb százaléka munkanélküli. Svájcban sokkal több fiatal megy el szakmát tanulni, mint a környező országokban. Sokak szerint ez a jó gazdasági helyzet egyik fő forrása, és nem a kutatás-fejlesztésre kiadott pénz mennyisége.

– De a jó szakmunkás sem Svájcban, sem Magyarországon nem egyenlő a betanított munkással.

– Így van. A szakmunkások képzése és megbecsülése rendkívül fontos.

– Magyarországon évek óta vita az egyetemi tandíj. Ebből évekkel ezelőtt politikai kérdés lett ahelyett, hogy józan gazdasági megfontolások alapján döntenének a szakemberek. Az ország fejlettségi szintje nem teszi lehetővé az ingyenes felsőoktatást. Így különböző néven költségtérítést szed be az állam (nem az egyetemek). Igaz, az állam hitelrendszerrel támogatja a felsőoktatásban résztvevők tanulmányait, megélhetését. A rendszer tisztázatlansága, zavarossága elégedetlenséget vált ki az érintettek körében. Mi a helyzet a svájci egyetemi fiatalsággal?

– A tandíj Svájcban is téma. Most tervezi például az ETH, hogy az elkövetkező években fokozatosan a duplájára emeli a tandíjat, szemeszterenként 625-ről 1250 svájci frankra. A tandíjakkal természetesen az egyetemi oktatás költségének csak kis részét tudjuk fedezni (az ETH büdzséjének a megemelt tandíj körülbelül 2 százalékát fogja kitenni). Kivételek talán az amerikai elit egyetemek, ahol egy aránylag jómódú családnak is komoly megterhelést jelent, ha egy gyermeke ott tanul.

A méltányos tandíjnak pozitív szerepe van, ha olyan ösztöndíjrendszer kíséri, ami gondoskodik arról, hogy anyagi okokból senki ne legyen kizárva az egyetemről. Például az ETH a tervezett többletbevétel egyharmadát az arra rászorulók támogatására szánja majd.

A tandíjaknak más szerepük is van, mint az egyetemek költségeinek részleges fedezése. Gondoskodhat arról, hogy ne tanuljon valaki értelmetlenül hosszú ideig, vagy ne iratkozzon be az egyetemre csak azért, mert mint „diák” anyagi előnyei vannak (konkrét példákat ismerek erre Zürichben).

– Egyesületünk, az MKE igyekszik szakosztályai, szakcsoportjai, területi szervezetei révén eljutni minden érdeklődő és kevésbé érdeklődő kémikushoz is. Nem mondhatjuk, hogy teljes sikerrel járunk. A kb. 20–30 ezer kémikus közül 10% lehet a tagunk. Különösen kiábrándító, hogy az oktatásban, elsősorban a közoktatásban dolgozó tanároknak alig 1–2%-át érjük el, pedig jelentős mértékben rajtuk múlik, hogy ebben a természettudományokból negatívan motivált társadalmunkban a felnövekvő generáció mennyire kap pozitív élményeket a tanárától, milyen képet alakít ki a kémiáról, mennyire tud a negatív előítéleteken felülemelkedni. Van ezzel kapcsolatosan valamilyen svájci tapasztalatod?

– Ezt a problémát arról az oldalról közelíteném meg, hogy mit tudunk nyújtani a tagoknak. A svájci kémiai társaság évi közgyűlésén rendszeresen rengetegen vesznek részt, a legtöbb kutatócsoport doktoranduszai posztereken mutatják be eredményeiket, a plenáris üléseken osztják ki a társaság díjait és a díjazottak kiváló előadásokat tartanak. Így a fiatalok már korán megismerik a társaság által nyújtott lehetőségeket.

Egy másik példa: az analitikai kémiai szakosztályban kurzusokat szervezünk. Évente több százan vesznek részt ezeken a kurzusokon, amelyek a társaság tagjainak olcsóbbak, mint a kívülállóknak.

Nagyon is egyetértek azzal, hogy a középiskolai oktatásnak döntő szerepe van. Személyesen kiváló gimnáziumi tanáraimnak köszönhetem a tudományos érdeklődésemet, és ami talán a legfontosabb, a tudomány iránti lelkesedést. Nagyon fontos feladat tehát, hogy az MKE kapcsolatot tudjon teremteni a középiskolákkal. Erre jó lehetőségek vannak. Például egyetemi kutatók/tanárok tarthatnának gimnáziumokban népszerűsítő előadást a kutatásukról, vagy segíthetnek középiskolai diákoknak egy tudományos munkában (Svájcban az érettségi munka egy tantárgy).

– Ezt megvilágítanád kicsit pontosabban? Van kötelező érettségi Svájcban természettudományos tárgyból?

– Svájcban ma a fiataloknak kb. 20%-a érettségizik (ezeknek 1/3 része fiú és 2/3 része lány). Az érettségi feljogosít az egyetemi tanulmányokra minden felvételi vizsga nélkül (kivétel az orvosi egyetem). Az 1990-es évek közepén volt egy nagy reform, ami sajnos a „MINT” tárgyak (matematika, informatika, természettudományok és technika) súlyát csökkentette. A fizika, kémia és biológia együttesen egy jegyet adott az érettségi bizonyítványban.

Ezt a káros reformot 5 évvel ezelőtt kicsit korrigálták, úgyhogy ma ezek a tárgyak külön-külön érettségi tárgyak lettek. Ennek ellenére nálunk is van még mit tenni a természettudományok megbecsülésének javítása érdekében.

A középiskolásoknak egy féléves tudományos projektet kell készíteniük, amit az érettségi keretében védenek meg. Ezeket a munkákat lehet egyetemi tanszékeken is készíteni.

– Ez a fajta egyetem-középiskola kapcsolat nálunk a középiskolás fiatalok tehetséggondozási programja keretében létezik a KutDiák mozgalomban.

– Ezt rendkívül hasznosnak tartom.

– Könnyítsünk a beszélgetésen. Gyakran jártok Magyarországra? A szakmai tapasztalatcserén, közös kutatáson túl – gondolom – turistáskodásra is jut idő. Mely részeit szeretitek legjobban az országnak? Járatok már Szegeden, Debrecenben? Én ebben a két nagyvárosban töltöttem életem javát.

– Rendszeresen járok Magyarországra: néha két-háromszor évenként, de néha akár hat-nyolcszor is. Budapesten éltem 21 éves koromig, és akkor nem igazán ismertem az országot. Voltam gyermekként két nyáron egy kisalföldi faluban (Cirákon), ahol mint városi fiú nagyon büszke voltam arra, hogy teheneket őrizhettem vagy szántottam (egy ló húzta az ekét). Sokat voltam Visegrádon, ahol rokonaim éltek, a Balatonon és mindenfelé a hegyekben. A városokat tulajdonképpen csak azóta ismertem meg, mióta Svájcban élek. Egy-két éve, ha Magyarországra jövök, egy barátommal el-elmegyek egy napra egy kisvárosba. Az utóbbi években megnéztünk Jászberényben egy kiállítást, voltunk Pápán (és utána kirándultunk a Bakonyban), a múlt héten Békéscsabára látogattunk. Debrecent ismerem, de Szegeden eddig csak futólag voltam egyszer-kétszer.

– Ha szabad ajánlanom, a Szegedi Szabadtéri Játékokra feltétlenül érdemes egyszer ellátogatni.

– Fiatal koromban, úgy a 60-es évek elején voltam a szabadtéri játékokon, de már nem emlékszem, mit láttam.

– Van valami kellemes élményed, emléked, amely Magyarországhoz fűződik, és szívesen megosztanád olvasóinkkal?

– Itt nőttem fel, Budapesten, és rengeteg élményem van, de nem tudnék egyszerűen egyet kiválasztani. Meggyőződésem, hogy ha valaki, mint én, évtizedekig másik országban él, mint ahol felnő, az részben az egyik helyen van otthon, részben a másikon, de sehol sem 100 százalékosan. Ezt pszichológusként (diplomám van a zürichi C. G. Jung-intézetből, és évekig dolgoztam a kémia mellett pszichoterapeutaként is) nagyon világosan látom. Találkoztam zürichi magyarokkal, akik svájciabbak voltak a svájciaknál, és olyanokkal is, akik magyarabbak voltak a magyaroknál. Ezzel az előbb említett bizonytalanságot kompenzálták, vagy így, vagy úgy. A feleségemmel, aki szintén Magyarországon nőtt fel, ezt úgy fogalmazzuk meg, hogy ha Magyarországra jövünk, akkor hazajövünk, és ha visszamegyünk Svájcba, akkor hazamegyünk.

– Sokszor-sokszor várunk Benneteket kedves feleségeddel, hogy hazagyertek. Köszönöm a beszélgetést.

Kiss Tamás

Oláh Julianna[1] – Krámos Balázs[2]

[1] MTA-BME Anyagszerkezeti és Modellezési Kutatócsoport, BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék | julianna.olah@mail.bme.hu

[2] BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék | kramosbalazs@ch.bme.hu

Számításos enzimológia

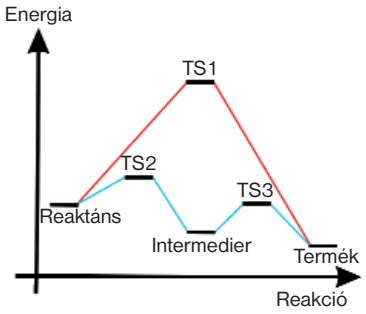
Számítógépes modellezés alkalmazása az enzimek működésének felderítésében

Bevezetés

Az enzimek, receptorok és egyéb fehérjestruktúrák rendkívül fontos szerepet játszanak az élő szervezetekben végbemenő bonyolult biokémiai folyamatok katalízisében és szabályozásában. A gyógyszerek jelentős része azáltal fejti ki hatását, hogy képes blokkolni vagy serkenteni az enzimek által katalizált folyamatokat, vagy befolyásolni a megfelelő receptorok érzékenységét. Az atomi méretskálán mérve a fehérjék rendkívül nagyok és összetettek, így kísérleti vizsgálatuk igen izgalmas, de sok kihívást jelentő terület. Számos speciális spektroszkópiai technika létezik, amelyek alkalmasak a fehérjék szerkezetének meghatározására és a konformációs változások nyomon követésére. Tanulmányozhatók a kémiai átalakulások köztitermékei, valamint a reakciók kinetikai és termodinamikai jellemzői is. A legtöbb esetben azonban ezek a módszerek nem alkalmasak arra, hogy teljes képet kaphassunk az enzim működéséről, amely pedig igen hasznos lenne a gyógyszerkémiában. Különösen nehéz dolgunk van akkor, ha például egy enzim katalitikus ciklusának leírására törekszünk, és azt szeretnénk megállapítani, hogy milyen térszerkezeti és elektronszerkezeti átalakulások mennek végbe, miközben az enzim aktív helyére kötődő szubsztrát átalakul termékké. A kiindulási állapotot és a terméket összekötő reakcióút gyakran rövid élettartamú intermedierek és az azokat összekötő aktiválási energiagátak sorozatából áll. A reaktív köztitermékeket kísérletileg megfigyelni nagyon nehéz vagy éppenséggel lehetetlen. Még ha olyan látszólag egyszerű folyamatokról van is szó, mint például egy oxigénatom beékelése egy szerves ligandum C–H kötésébe, amelyet a citokróm P450 enzimek katalizálnak, legalább 5 állapotról kell beszélnünk. A kvantummechanikai alapokon nyugvó különböző kvantumkémiai (QM), a klasszikus mechanikai gyökerekkel rendelkező molekulamechanikai (MM) módszerek, valamint ezek kombinálása (QM/MM módszerek) lehetővé teszik számunkra, hogy elméleti úton, számítógépes szimulációk segítségével töltsük ki a réseket.

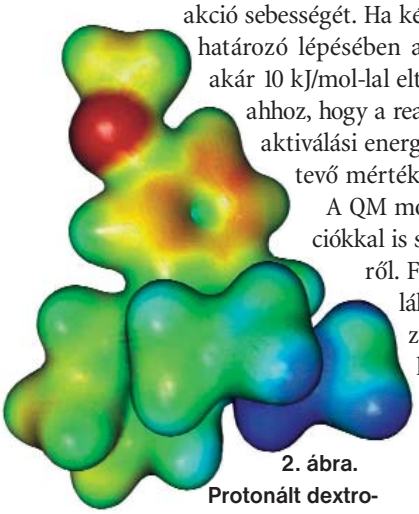
Kvantumkémiai (QM) számítások

A kvantumkémiai számítások [1,2] legfontosabb eleme az, hogy pusztán fizikai törvényszerűségeket felhasználva meghatározzuk az atommagokból és elektronokból álló mikrorendszer hullámfüggvényét vagy elektronsűrűségét, amely magában hordozza a rendszer tulajdonságait. Meghatározhatjuk a kiindulási anyagok, termékek, köztitermékek, valamint az átmeneti állapotok térszerkezetét és energiáját, s a lehetséges reakcióutakat: így következtetéseket vonhatunk le a reakció mechanizmusára vonatkozóan. Előfordulhat, hogy több reakcióút is létezik **(1. ábra)**, ám ezek közül csak néhánynak van valós szerepe a folyamatban, hiszen minél magasabb egy adott folyamat aktiválási energiája, annál valószínűtlenebb, hogy le fog játszódni. A teljes reakciót gyakran felbonthatjuk elemi lépések sorozatára, amelyek közül kitüntetett szerepe van a sebességmeghatározó lépésnek. Ennek a lépésnek a gátja a legmagasabb, és ezért ezt tekinthetjük a teljes reakció szűk keresztmetszetének, amely döntően befolyásolja a teljes reakció sebességét. Ha két reakcióút sebességmeghatározó lépésében az energiagát magassága akár 10 kJ/mol-lal eltér, az már elegendő lehet ahhoz, hogy a reakció csak az alacsonyabb aktiválási energiájú utat kövesse számottevő mértékben.



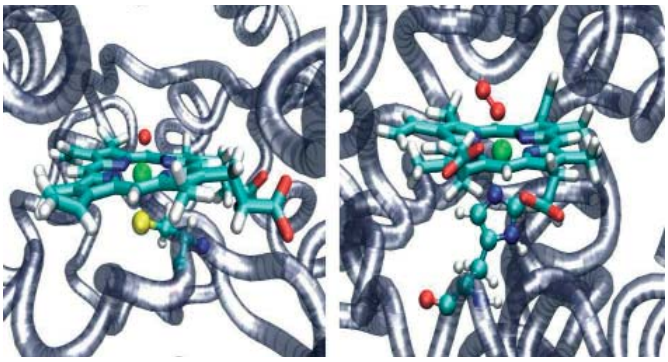
1. ábra. Lehetséges reakcióutak sematikus ábrázolása. Több reakcióút is elképzelhető, amelyek különböző átmeneti állapotokon (TS) és köztitermékeken keresztül vezethetnek

A QM módszerek további információkkal is szolgálnak a rendszerünkről. Felhasználhatók a molekulák spektrumainak értelmezésében, megjósolhatjuk, hogy a molekula mely része lesz érzékeny elektrofil/nukleofil támadásra **(2. ábra)**, megmagyarázhatjuk, hogyan befolyásolják a helyettesítők egy adott vegyületcsoport reaktivitását és stabilitását. Segítségükkel megérthetjük például, hogy milyen szerepe van a hemcsoportot tartalmazó hemoproteinekben annak, hogy a vas-



2. ábra. Protonált dextrometorphan elektrosztatikus potenciáltérképe (MEP). A MEP megadja a molekula körül elhelyezett pozitív teszt-töltésre ható erőt. Vonzerő: piros, taszítóerő: kék. A térkép alapján megjósolhatjuk, hogy a molekula mely része lehet érzékeny elektrofil vagy nukleofil támadásra

ionhoz a protein hisztidin (például a hemoglobinban) vagy cisztein (citokróm P450 enzimekben) aminosav oldalláncával kapcsolódik-e **(3. ábra)**. Az utóbbi esetben az is kimutatható, hogy a cisztein kénatomjával hidrogénkötést kialakító egyéb aminosav-oldalláncoknak is jelentős hatása van a vasion elektronszerkezetére, és ezáltal az enzim finomhangolását végzik.



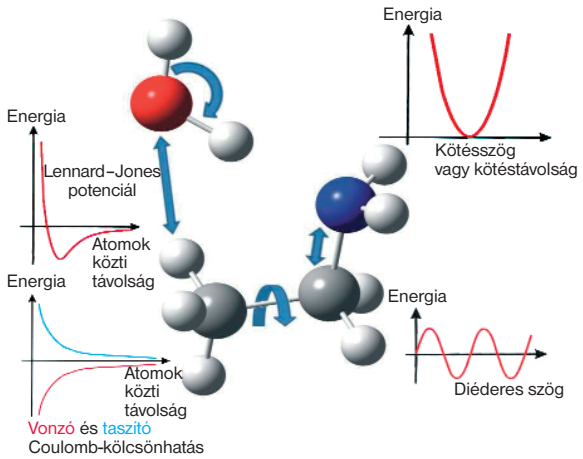
3. ábra. Hemgyűrűk tipikus koordinációja hemoproteinekben. A citokróm P450 enzimekben előforduló ciszteinhez kötődő (bal), valamint a hemoglobinban lévő imidazolgyűrűhöz kapcsolódó hemcsoport (jobb)

A QM módszerek nagy előnye, hogy nem tartalmaznak paramétert, vagy csak néhány tapasztalati alapon illesztett paramétert tartalmaznak. A számítások megkezdéséhez csupán a rendszert alkotó atommagokat és a rendszer töltését kell ismernünk, valamint egy alkalmas kiindulási geometriát kell kiválasztanunk. Az elhanyagolások csökkentésével a kapott eredmények is egyre megbízhatóbbak lesznek. Maguk a számítások természetesen meglehetősen bonyolultakká is válhatnak, de nem kell feltétlenül nagy mennyiségű előzetes információval rendelkeznünk a munka megkezdéséhez. Eddig nem vizsgált rendszerekkel is foglalkozhatunk, és fontos, hogy ismerjük azt az irányt, amely felé haladva egyre pontosabb eredményeket kaphatunk. Az atommagok mennyisége, minősége, az elektronok száma és a Schrödinger-egyenlet (a kvantummechanika alapegyenlete) minden olyan információt tartalmaz, amire szükségünk van, s így atomi szinten nyerhetünk betekintést a kémiai reakciók sajátosságaiba. Mindez sajnos hatalmas számítási kapacitást igényel. Manapság jó minőségű számításokat elfogadható számítási idő mellett maximum 200 atomos rendszereken lehet végezni, de igazán nagy pontossággal csak néhány atomos rendszerek vizsgálhatók. Számos módszer létezik, amelyekben közelítések segítségével ezt az akadályt próbálták meg leküzdeni. A gyakorlatban tehát gyakran kell kompromisszumokat kötnünk, és sok múlik azon, hogy megfelelő módszert választunk-e ki a vizsgálandó problémához.

Több ezer atomos fehérjerendszereket azonban nem lehet kvantumkémiai szinten vizsgálni, legalábbis nem az egészet. Tisztán QM módszerekkel legfeljebb az enzim aktív centrumát alkotó legfontosabb részeket vizsgálhatjuk. Ekkor azonban sajnos nem érvényesül a fehérjekörnyezet két legfontosabb hatása, amely egyfelől sztérikus kényszert jelent, tehát megfelelő módon orientálja a reagáló csoportokat, másfelől elektrosztatikusan kölcsönhatva az aktív centrum atomjaival elősegíti a katalízist. Noha a kvantumkémiai módszerek lényeges információkkal járulhatnak hozzá az enzimek vizsgálatához, érdemes lehet olyan módszereket is felhasználni, amelyekkel az egész enzimet figyelembe tudjuk venni.

Molekulamechanikai (MM) számítások

A molekulamechanikai módszereket [3] kifejezetten nagyméretű rendszerek vizsgálatára fejlesztették ki. Ellentétben a QM módszerekkel, használatukhoz mindenképpen ismernünk kell a rendszer konstitúcióját, vagyis az atomok kapcsolódási sorrendjét. Itt az atomokat egyszerű ponttöltésként kezelik, amelyek között kö-



4. ábra. A molekulamechanikai erőterek kötő és nemkötő kölcsönhatásai

tő és nemkötő kölcsönhatások léphetnek fel **(4. ábra)**. A kovalensen nem kötődő atomok között elektrosztatikus Coulomb-kölcsönhatás és van der Waals-kölcsönhatás hat (Lennard–Jones-potenciál). A kovalensen kötődő atomok közötti kölcsönhatásokat egy arányossági tényezőből és a megfelelő geometriai paraméter (kötéshossz, kötésszög, torziós szög) egyensúlyi értékétől való eltéréséből álló energiatagokkal írhatjuk le **(4. ábra, I egyenlet)**.

$$E_{kötés} = \Sigma_{i=1}^{N} K_i (r - r_0)^2 \qquad \text{(I)}$$

Ebben a képletben a kötéshosszak egyensúlyi értékétől való eltéréseinek energiajárulékait írtuk fel, amelyeket minden kötésre kiszámolunk és összegzünk. A képletben r a tényleges kötéshossz, r_0 az egyensúlyi (vagy ideális) kötéshossz, a K_i pedig az arányossági tényező. A potenciális energia e formája megegyezik az ideális rugó potenciális energiájának képletével, ezért eltúlozva ugyan, de azt is mondhatnánk, hogy a molekulamechanika olyan, mintha az egyes atomokat rugókkal kötnénk össze.

Mivel a potenciális energia meglehetősen egyszerű energiatagok összegeként írható fel, ha ismerjük a rendszer térszerkezetét, akkor a megfelelő szögeket és távolságokat behelyettesítve a képletekbe pillanatok alatt megkaphatjuk a rendszer energiáját, és nincs szükség egy másodrendű parciális differenciálegyenlet numerikus megoldására, szemben a QM leírással. Ennek a módszernek az a hátránya, hogy a számítások során kötések nem szakadhatnak fel vagy alakulhatnak ki, tehát kémiai reakciókat és átmeneti állapotokat egyáltalán nem vizsgálhatunk. Az elektronszerkezetről sem mondhatunk semmit, mivel ebben a megközelítésben nem is léteznek elektronok. Kiválóan felhasználhatjuk azonban őket például fehérjék vagy nukleinsavak konformációs átalakulásainak, vagy a fehérje és a szubsztrátmolekula között kialakuló másodrendű kölcsönhatásoknak a vizsgálatára. Ez különösen fontos lehet a gyógyszeriparban, amikor ismert térszerkezetű receptorfehérjéhez kötődő molekulákat terveznek. A dokkolásos módszerek lehetővé teszik, hogy számítógépes programok segítségével kismolekulákat helyezzünk el a receptor kö-

tőhelyén és megjósoljuk a kötődés erősségét. Így hatékonyan, pénzt és energiát megspórolva választhatunk ki olyan molekulákat, amelyek ígéretesek lehetnek a további gyógyszerfejlesztés szempontjából. A dokkolási vizsgálatok segítségünkre lehetnek a gyógyszerjelölt molekula hatásmechanizmusának tisztázásában is, ami jelenleg a gyógyszer-szabadalmaztatás fontos eleme.

Az MM módszerek hátránya, hogy a számításokhoz hatalmas empirikus paraméterkészletre van szükség a valóság minél hűbb leírásához. Ezért a különböző kémiai környezetben lévő atomokat más-más atomtípussal jellemezzük, például a peptidkötésben lévő szénatom más típusú, mint az alkánokban vagy aromás gyűrűben lévő szénatom. Minden egyes atomtípusra és lehetséges kölcsönhatási módra külön meg kell adnunk a megfelelő paramétereket, például a K_i és r_0 értékeket az I egyenletben. A potenciális energiára vonatkozó összefüggéseket és a paraméterkészletet együtt molekulamechanikai erőtérnek nevezzük. Szerencsére ezeket az erőtereket nem magának a felhasználónak kell fejlesztenie, de az erőtér jósága alapvetően befolyásolja az eredmények megbízhatóságát. A fehérjék leírására megfelelő minőségű, sokat tesztelt erőterek [4] állnak már rendelkezésünkre.

Kombinált kvantumkémiai és molekulamechanikai (QM/MM) számítások

Az előbb említett két technika hatékonyan ötvözhető. Így jutunk el a kombinált kvantumkémiai és molekulamechanikai számítások világába [5], amelyek lehetővé teszik, hogy kémiai átalakulásokat fehérjekörnyezetben vizsgáljunk. Első lépésként azt kell eldöntenünk, hogy a molekula mely részei vesznek részt aktívan a kémiai reakcióban, amelyeket feltétlenül magas kvantumkémiai szinten kívánunk figyelembe venni (QM régió, **5. ábra**), és melyek azok, amelyek inkább csak a sztérikus kényszert és az elektrosztatikusan polarizáló környezetet jelentik (MM régió). Ez utóbbi leírása alacsonyabb szinten is elegendő, mert az MM erőterek is jó térszerkezetet képesek adni. A QM/MM számítások akkor használhatók a legjobban, ha a QM és MM régiók kijelölésekor nem kell kovalens kötéseket elhasítani. Ha mindenképpen el kell vágnunk kötéseket, akkor arra törekszünk, hogy ez viszonylag távol essen a reakció centrumától, és lehetőleg apoláris C–C egyszeres kötés legyen. Mivel QM módszerekkel nem lehet csonka molekulákat vizsgálni, ahhoz, hogy lezárjuk a molekula elektronszerkezetét, általában hidrogénatomokat helyezünk el a QM régióban szereplő atomok elvágott kötései mentén.

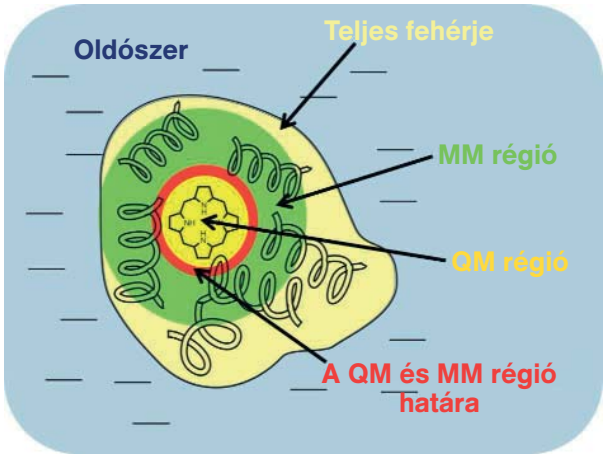
Reakcióutakat QM/MM módszerrel legegyszerűbben az úgynevezett adiabatikus térképezéssel vizsgálhatunk. Ilyenkor mi választjuk ki azt a reakciókoordinátát, amely várakozásunk szerint a lehető legjobban alkalmas a reakció leírására, például egy felszakadó kötés mentén a két atom közti távolságot növeljük. A reakciókoordinátát szisztematikusan változtatva minden egyes reakciókoordináta-értéknél minimalizáljuk és meghatározzuk a rendszer energiáját. Így egy olyan reakcióprofilhoz jutunk, amely az adott reakciókoordináta mentén a legalacsonyabb energiagátú úton vezet a reaktánstól a termékhez. A kapott szerkezeteket és energiájukat vizsgálva következtethetünk a reakció mechanizmusára, s azonosíthatjuk a katalízisért felelős másodlagos kölcsönhatásokat.

Molekuladinamikai (MD) szimulációk

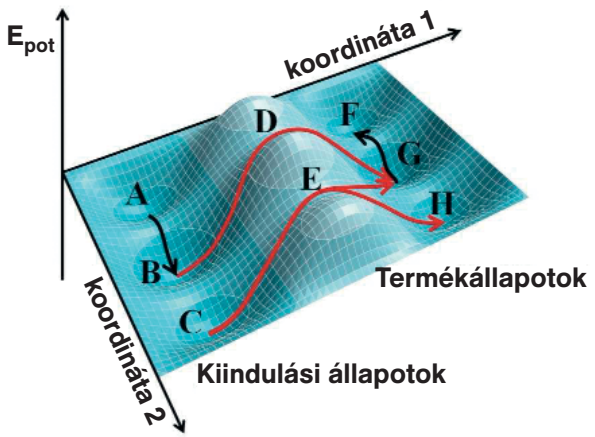
A fehérjék nem egyetlen jól definiált konformációs állapotba fagyva léteznek, hanem folyamatosan rezegnek, forognak, mozognak a benne lévő atomok. Amikor tehát egy enzim aktív konformációjáról beszélünk, akkor számos olyan konformációs állapot együttesét értjük, amelyek energiája közel esik egymáshoz és alacsony energiagátak kötik össze őket, így szobahőmérsékleten dinamikusan egymásba alakulnak. Ahhoz, hogy a QM/MM számításból kapott eredményeink megbízhatóak legyenek, figyelembe kell vennünk az enzimszerkezetek sokféleségét, hiszen az eltérő kiindulási konformációból kiindulva más-más gáton át vezethet a reakció, amelyek közül a legalacsonyabb energiájú fogja döntő mértékben meghatározni az enzimreakció mechanizmusát **(6. ábra).** Az enzim lehetséges konformációinak tanulmányozásához leggyakrabban a molekuladinamikai (MD) szimulációkat alkalmazzák.

MD számítások során a molekula mozgását szimuláljuk az idő függvényében. Ehhez a kiindulási szerkezetben az atomoknak véletlenszerű nagyságú és irányú kezdősebességet adunk úgy, hogy

5. ábra. A rendszer felosztása QM/MM számításokban. A valódi (a fehérjét, az oldószert (vizet), az ionokat és a lehetséges egyéb összetevőket tartalmazó) rendszert egy gömb alakú modellel közelítjük, amelyben a kémiai reakcióban közvetlenül részt vevő csoportokat kvantumkémiai módszerrel írjuk le (QM régió), míg a rendszer többi részét (MM régió) molekulamechanikai erőtérrel modellezzük



6. ábra. QM/MM számításokból kapható eredmények sematikus ábrázolása. A fehérjerendszerek összetettsége és konformációinak sokfélesége miatt számos reaktív kiindulási állapot létezik, amelyekből különböző reakcióutak vezethetnek a termékállapothoz. A koordináták minden rendszer és folyamat esetében különbözőek. A piros nyilak a kémiai reakciót, a feketék pedig a konformációváltozást jelölik

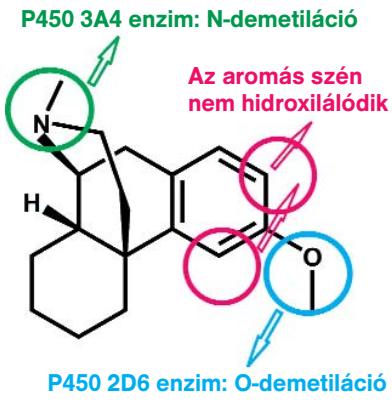


a rendszer teljes kinetikus energiája megfeleljen a szimuláció hőmérsékletének. Ezután az egyes atomok pályáját Newton mozgásegyenleteinek megoldásával határozzuk meg. Ismerve az egyes atomok lendületét egy adott időpillanatban, valamint kiszámítva a rájuk ható erőt, meghatározhatjuk azt a pozíciót, ahol Δt idő múlva (tipikusan 1 fs) az atom tartózkodni fog. Ezekből a lépésekből több ns-os vagy akár μs-os szimulációkat is fel lehet építeni. MD szimulációkat MM vagy QM módszerrel számolt erőkomponensekkel is végezhetünk, de nagyméretű rendszerek esetében csak az előbbiek elérhetők a jelenlegi számítási erőforrásokkal. Az így kapott szerkezetek sokaságát megvizsgálva kiválaszthatjuk közülük azokat, amelyeket kiindulási állapotként használunk fel a QM/MM számításokban.

QM/MM számítások a gyakorlatban: dextromethorphan metabolizmusa a citokróm P450 2D6 enzimben

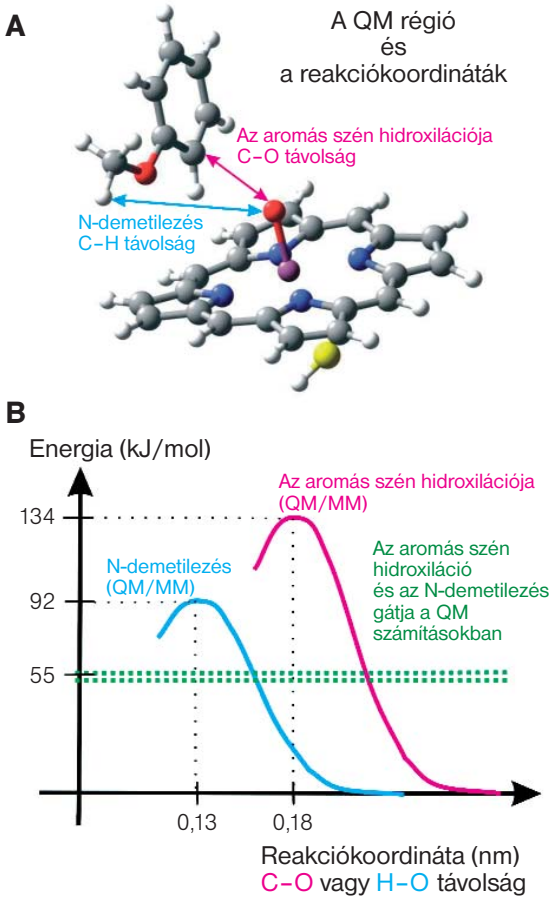
Az elméleti áttekintés után lássunk egy példát is! Milyen kérdéseket válaszolhatunk meg QM/MM számítások segítségével? A citokróm P450 enzimek (P450 enzimek) egy több mint tízezer tagot számláló enzimcsaládot alkotnak. Közös tulajdonságuk, hogy a bennük található hemcsoporthoz axiálisan egy cisztein kötődik. Igen ősi eredetűek, ezt jelzi az is, hogy szinte minden élőlényben előfordulnak. Baktériumokban és ősbaktériumokban, gombákban, növényekben, állatokban és az emberekben is számos változatuk létezik. Sokféleségük egyik oka, hogy fő feladatuk a xenobiotikumok (testidegen anyagok) metabolízise, melynek során a molekulát oxidálják, így növelve annak polaritását és megkönnyítve kiürülését.

A gyógyszeripar élénk érdeklődést mutat a P450 enzimek iránt, hiszen ezek felelősek a gyógyszerek (ezek is testidegen anyagok!) 90%-nak lebontásáért is. Jelentős szerepük van abban, hogy egy gyógyszer mennyi ideig tartózkodik a szervezetben, hol és hogyan bomlik le, és milyen formában ürül ki. Ezáltal befolyásolják az alkalmazandó dózist és a vegyületek toxicitását is. A P450 2D6 enzim (2D6 enzim) különösen fontos ebből a szempontból, mivel ez a második legfontosabb gyógyszer-metabolizáló enzim (a gyógyszerek 30%-át bontja le), és az emberi szervezetben több mint 60 féle allélje, vagyis változata ismert, amelyek aktivitása nagyon széles skálán mozog. Emiatt azok a gyógyszerek, amelyek a 2D6 enzim segítségével bomlanak le, máshogy hatnak olyan emberekre, akikben ez az enzim működésképtelen, vagy akikben jelentős túlműködést mutat.



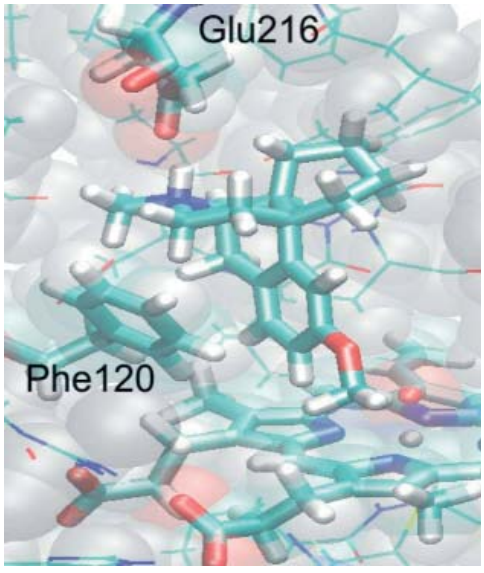
7. ábra. A dextromethorphan P450 enzim által katalizált metabolizmusának módjai (N-demetilezés és O-demetilezés) az emberi szervezetben. Az aromás szénatomok nem hidroxilálódnak annak ellenére, hogy más aromás éterek esetében ez a folyamat is ismert

Ennek az enzimnek a működését vizsgáltuk egy gyakran használt köhögéscsillapító vegyület, a dextromethorphan **(7. ábra)** metabolizmusának modellezésén keresztül [6]. Arra a kérdésre kerestük a választ, hogy a



8. ábra. A dextromethorphan molekulán és 2D6 enzimen végzett QM és QM/MM számítások eredményeinek sematikus ábrázolása

2D6 enzim miért csak a vegyület O-demetilezését katalizálja, amikor más aromás éterek esetében aromás hidroxiláció is bekövetkezik. Munkánk során QM és QM/MM számításokat, és MD szimulációkat is felhasználtunk. A QM számítások alapján a két reakció energiagátja hasonló, az MD szimulációk szerint pedig mind a molekula aromás gyűrűje, mind pedig a metoxicsoportja igen közel helyezkedik el a hemcsoport reaktív vasionjához. Ezek alapján – hamisan – azt valószínűsíthetnénk, hogy mindkét reakció le fog játszódni. A QM/MM számítások **(8. ábra)** azon-



9. ábra. A dextromethorphan mozgását a 2D6 enzim aktív helyén gátolják a nagy térkitöltésű oldalláncok, valamint a 216-os glutaminsavval kialakuló erős sóhíd. Ezek a kölcsönhatások megakadályozzák a dextromethorphan aromás gyűrűjének hidroxilációját az enzimben

ban megmutatták, hogy a valóságban miért csak O-demetiláció következik be. A **9. ábrá**n láthatjuk, hogy a dextromethorphan-molekula szinte be van ékelve az enzim aktív helyére, erős sóhidat alakít ki a 216-os glutaminsavval, és számos apoláris oldallánc sztérikusan gátolja a mozgását. Emiatt, bár az aromás gyűrű közel helyezkedik el az enzimben a hemgyűrű vasionjához, mégsem tud kialakulni az aromás hidroxilációhoz vezető kedvező átmeneti állapot, amelyet a QM számítások alapján vártunk, s így ennek a reakciónak a gátja jóval magasabbá válik, mint az O-demetilezésé *(8. ábra)*.

Azt a következtetést vonhatjuk le tehát, hogy a P450 enzim által katalizált metabolikus utak megjóslásához nem elegendő kismolekulás QM számításokat végezni, vagy a szubsztrát elhelyezkedését vizsgálni az aktív helyen. Fontos tanulmányoznunk azt is, hogy kialakulhat-e az adott metabolikus úthoz tartozó kedvező térszerkezetű átmeneti állapot, hiszen ez jelentősen befolyásolhatja a reakció végbemenetelét.

Összefoglalás

Ebben a munkánkban áttekintettük az enzimek modellezéséhez leggyakrabban használt módszereket és felhasználási területüket. Megmutattuk, hogy kémiai reakciók elméleti vizsgálatához kvantumkémiai módszerekre van szükség, amelyek képesek leírni a molekulák elektronszerkezetét, a kötések felbomlásának és kialakulásának folyamatát. A molekulamechanikai módszerek elsősorban biopolimerek, például fehérjék és nukleinsavak vizsgálatára használhatóak olyan folyamatokban, amelyek nem járnak kémiai kötések átalakulásával. E két módszer ötvözetei, a kombinált kvantumkémiai és molekulamechanikai eljárások pedig igen hatékony eszközök lehetnek az enzimek katalitikus ciklusának felderítésében, hiszen egyszerre képesek leírni a kémiai változásokat és figyelembe venni az enzimet. Végezetül egy példán, a dextromethorphan metabolízisén keresztül szemléltettük az elméleti módszerekkel nyerhető eredményeket.

KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

A szerzők köszönik az Új Széchenyi (TÁMOP-4.2.2/B-10/1-2010-0009) és az EU Marie Curie Ösztöndíjak (Oestrometab projekt) támogatását, valamint J. H. Harvey és A. J. Mulholland tanácsait.

IRODALOM

[1] T. Veszprémi, M. Fehér, A kvantumkémia alapjai és alkalmazása, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 2002.
[2] I. N. Levine, Quantum Chemistry, Prentice Hall College Div, New Jersey, 1991.
[3] Gy. M. Keserű, I. Kolossváry, Bevezetés a számítógépes gyógyszertervezésbe, Akadémiai Kiadó, Budapest, 2006.
[4] A. D. MacKerell Jr., N. Banavali,N. Foloppe, Biopol. (2000) 56, 257.
[5] K. E. Ranaghan, A. J. Mulholland, Int. Rev. Phys. Chem. (2010) 29, 65.
[6] J. Oláh, A. J. Mulholland, J. N. Harvey, Proc. Nat. Acad. Sci. (2011) 108, 6050.

Zákányiné Mészáros Renáta

Miskolci Egyetem, Kémiai Intézeti Tanszék | fkmmr@uni-miskolc.hu

Élőlények hormonrendszerét befolyásoló anyagok eltávolítása hagyományos vízkezelési eljárásokkal

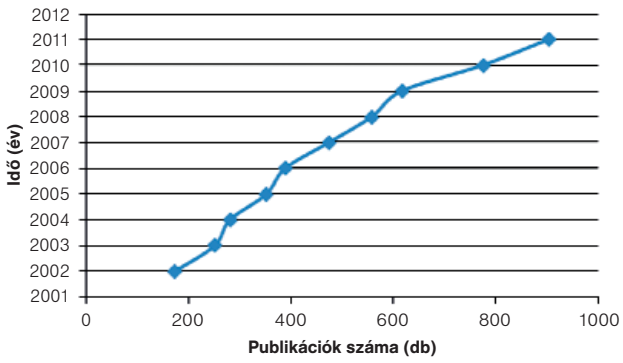
Bevezetés

Már az 1930-as évektől ismert, hogy némely mesterséges, illetve természetes vegyület az élőlények hormonrendszerében szerepet játszó anyagokhoz hasonló tulajdonsággal bír [1,2]. A hormonháztartást befolyásoló anyagok (EDC – Endocrine Disrupting Compounds) és az élőlényekben megjelenő reprodukciós hibák kialakulása közötti kapcsolatra azonban csak a nyolcvanas évek során derült fény, amikor Fry és társa [3] olyan DDT-vel (diklór-difenil-triklóretán) szennyezett területen élő sirályokról írt, melyek nemi szervei deformálódtak, illetve a csoportban a nemek aránya erősen eltolódott (a nőnemű egyedek születési aránya növekedett). Ezek a hormonokhoz hasonló tulajdonságú anyagok az emberi szervezet működését jellemzően befolyásolhatják az egyes molekulák specifikus hatása (pl. a hormonháztartás befolyásolása, immunrendszer károsodása) által. Mára ezek az anyagok főként a kozmetikai és gyógyszeriparnak köszönhetően jelentős mennyiségben fordulnak elő a különböző talaj- és felszíni vizekben. Ilyen EDC típusú szennyezőknek tekinthetők például a természetes hormonok (fitoösztrogének), a természetes hormonhatású anyagok (3-omega-zsírsavak), a hormonkészítmények (fogamzásgátló, pajzsmirigy- és egyéb gyógyszerek), iparban használt anyagok (detergensek, ftalátok, élelmiszer-ipari adalékok, PCB, PAH, dioxin), gyógyszerek, növényvédő szerek (verapamil, naproxén, lindán, DDT, atrazin). Ezen anyagokon túl több ezer olyan létezik, amelyről egyelőre nem bizonyított, hogy ebbe a csoportba tartozik, azonban a további kutatások eredményeként a későbbiekben felkerülhet e listára. Az EDC anyagok felismerésének nehézségei között kiemelhető például, hogy egyes anyagok csak bizonyos fajokra hatnak, vagy csak bizonyos élet-

korban, vagy hatásuk több generáción keresztül jelentkezik. Az előbb felsorolt EDC-k környezetbe kerülésének lehetséges módjait az **1. ábra** foglalja össze.

1. ábra. EDC (hormonháztartást befolyásoló) anyagok környezetbe kerülésének lehetséges módjai

Az EDC-k jelentősége tehát, ahogyan azt már korábban is megjósolták, jóval nagyobb, mint a hagyományos értelemben vett szennyezőknek. Napjainkban mind a detektálásuk, mind az eltávolításuk igen nagy gondot okoz a kutatók számára [4]. A fent említett anyagok hatásának nagy horderejét bizonyítja az is, hogy számos tudományos cikk irányul a vizekből való eltávolításukkal kapcsolatos módszerek tanulmányozására. Például a Science Direct által figyelt cikkek száma 2002–2011-ben folyamatosan növekszik, a növekedés üteme állandósulni látszik **(2. ábra)**.



2. ábra. A Science Directen megjelent publikációk száma évenként. Keresési kifejezés: EDC, water treatment (saját szerkesztés)

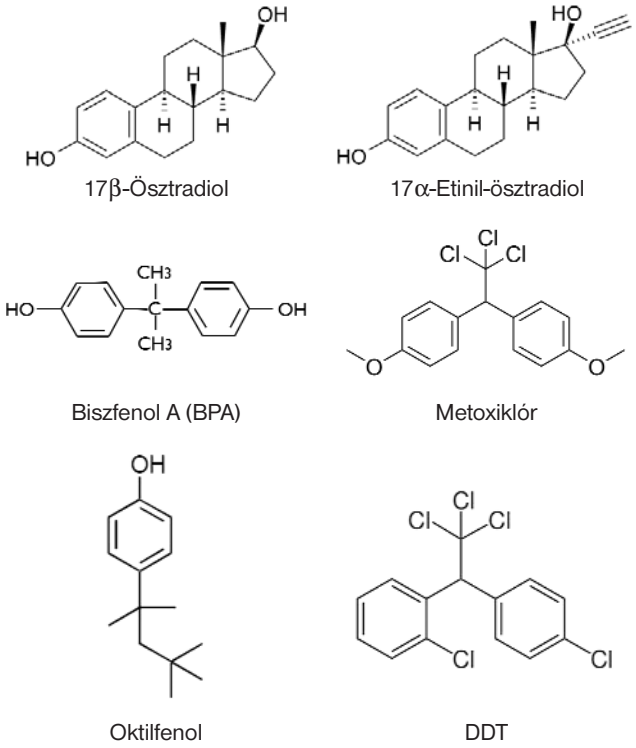
Az EDC szennyezők eltávolítására több módszert alkalmaznak, de a technológiai, gazdasági és hatékonysági tényezőket együttesen figyelembe véve rengeteg nehézség merül fel. Az anyagtranszport, az analitikai detektálás, a lebomlási mechanizmus, a különböző eltávolítási technikák és az anyagok toxikológiai hatásainak feltárása további kutatásokat igényel. Az aktív vegyületek több fajtájának egyidejű jelenléte miatt nem ismert pontosan, hogy az emberi szervezetben ezek az anyagok milyen reakciókat váltanak ki [21], ezért jelenleg a legfontosabb feladat az EDC anyagok tulajdonságainak áttekintése és összegzése, kémiai tulajdonságaik alapján való osztályozásuk. További feladat az élőlényekre vonatkozó biztonságos határértékek magállapítása, azaz ezeknek a szennyezőknek az emberi szervezetre, az élőlényekre gyakorolt hatásának tisztázása, illetve feltárása azoknak a mechanizmusoknak, amelyeken keresztül az EDC-k és PPCP-k (Pharmaceuticals and Personal Care Products – gyógyszerészeti és kozmetikai termékek) hatnak a környezetükre.

Az EDC-k csoportosítása

Általában ezeket az anyagokat három fő csoportba sorolják be, lehetnek

- ösztrogén típusúak – olyan anyagok, melyek a természetes ösztrogénhez hasonlóan viselkednek vagy blokkolják azt,
- androgén típusúak – olyan anyagok, melyek a természetes tesztoszteronhoz hasonlóan viselkednek, vagy blokkolják annak működését,
- thyroidal – azaz pajzsmirigy típusú anyagok, melyek direkt vagy indirekt módon hatnak a pajzsmirigy működésére) [4].

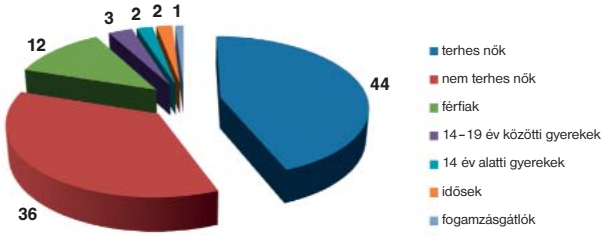
A továbbiakban az ösztrogén típusú anyagokkal foglalkozom **(3. ábra),** ezek képviselői ugyanis a legnagyobb mennyiségben jelennek meg a vizekben. Azonban mind a tesztoszteron, mind a pajzsmirigy hormon típusú anyagok biológiai jelentősége megegyezik az előzővel.



3. ábra. Jelentősebb ösztrogén típusú szennyezők szerkezete (szerkezeti képletek: www.wikipedia.org)

A **4. ábra** a természetes ösztrogén típusú EDC anyagok megoszlását mutatja vizekben, 2001-es hollandiai adatok alapján. Érdekes eredmény, hogy az ilyen típusú anyagok nagy része a terhes nőktől származik, míg a fogamzásgátló szerek hatásának mértéke mindössze 1%.

4. ábra. Ösztrogén típusú anyagok megjelenési aránya természetes vizekben, Hollandiában 2001-ben [23]



Detektálási nehézségek

Az EDC-k, a fentiek alapján, szerkezetüket tekintve igen széles tartományt felölelő szennyező csoportot jelentenek, ennek kö-

vetkeztében a detektálás megkezdése előtti legfontosabb teendő a vizsgálni kívánt anyag pontos definiálása. A „klasszikus" szennyezőkre vonatkozóan, úgymint a hormonháztartást befolyásoló fémek (ilyen például az arzén és a kadmium) esetében is az ivóvíz- és szennyvízkezelésben meghatározott standard szerint történik az azonosítás. Az analitikai munkák jelentős része napjainkban a kevésbé karakterizált szennyezők felé irányul. Az EDC-k és PPCP-k közül némelyeknek savas vagy bázikus csoportjai vannak, esetleg nagy molekulatömeggel rendelkeznek és/vagy poláros funkciós csoportokat tartalmaznak. Az ilyen típusú anyagok analitikai meghatározására esetlegesen néhány speciális módszer ismert, standardizált analitikai megoldás azonban nem. További nehézséget jelent, hogy ezeknek az anyagoknak a meghatározása alacsony kimutatási határok mellett történik (sub-ppt vagy sub-ppb).

Annak ellenére, hogy direkt analitikai módszerek is ismeretesek [5], mégis a legtöbb megoldás első lépése a szilárd fázisú extrakció, majd ezt valamely műszeres analitikai módszer alkalmazása követi [22]. A módszer kiválasztását alapvetően a detektálni kívánt molekula típusa határozza meg.

EDC anyagok eltávolításának lehetőségei különböző, víztisztításban alkalmazott módszerekkel

Az ösztrogén hormonok jelenlétét már a 90-es években detektálták néhány szennyvíztisztító üzem bemenő, illetve kimenő vizében, több országban is [6,7]. A felszíni és ivóvizekben csak 2000 után figyeltek fel ezeknek az anyagoknak a jelenlétére [8,9].

Az EDC típusú szennyezők bizonyos mértékben eltávolíthatók a hagyományos víztisztítási módszerek segítségével, azonban teljes mértékű, 100%-os hatékonyságú módszer jelenleg nem ismeretes. Az **1. táblázat**ban a Snyder és társai [4] által összegzett adatok láthatók néhány EDC anyagcsoportra vonatkozóan.

Bizonyos üzemi adatok azt mutatják, hogy a víztisztító művekben az egyes részfolyamatok során különböző hatékonysággal távolíthatók el a fent említett szennyezők. Összehasonlítva a bemenő és kimenő vizekben mérhető szennyezőkoncentrációkat [10], kimutatható, hogy például az ösztron (E1) és 17-béta-ösztradiol (E2) esetében az eltávolítási hatékonyság 61–87% között változott. Éppen ezért nagyon fontos, hogy a hagyományos víztisztítási részfolyamatokat további lépésekkel egészítsük ki, vagy a másodlagos víztisztítási műveletek után iktassunk be kiegészítő műveleteket – ezzel is javítva az EDC anyagok vizekből való eltávolításának hatékonyságát.

Hagyományos szennyvízkezelési folyamatok

Általában a felszíni víztisztító művek (SWTP – Surface Water Treatment Plant) az ülepítési folyamatok során alumínium- vagy vaskloridos koaguláltatást alkalmaznak (bizonyos esetekben szintetikus polimerekkel történik a flokkuláltatás), majd ülepítés, szűrés és végül csírátlanítás következik. A fenti módszert kiegészítve oldott szerves szén alkalmazásával (DOC – Dissolved Organic Carbon, 1–10 mg/l) jó hatékonysággal a patogén biológiai szennyezők nagy része is eltávolítható. Csírátlanításra az Egyesült Államokban sokkal inkább a kloridok, illetve klór-aminok terjedtek el, Európában inkább az ózonizációs technikák. A hagyományos szennyvízkezelési technológiákat a **2. táblázat** foglalja össze.

A fenti tisztítási műveletek gyakran tartalmaznak a kezelni kívánt víz minőségétől függően további lépéseket, ilyen lehet például a bioszűrés, membránok alkalmazása, kilevegőztetés, lágyítás, UV-besugárzás.

Adszorpciós technikák

A különböző koaguláló fémsók és lágyítószerek (CaO, Na_2CO_3) általánosan alkalmazottak a vízkezelés során a részecskék desta-

1. táblázat. Általános vízkezelési eljárások során néhány EDC anyagcsoportra jellemző eltávolítás hatékonysági mutatója (%) [4]

EDC alcsoport	O_3	UV	Cl_2	Koaguláció/ flokkuláció	Nano-szűrés	Reverz ozmózis	Lebontás (biodegradáció, fotodegradáció, aktivált iszap)
Peszticidek	20–100	>90	0–100	<20	70–100	>90	>90
Ipari szennyezők	40–70	>90	<20	0–40	>90	>90	70–100
Szteroidok	>90	>90	>90	<20	70–100	>90	20–100
Fémek	<20	<20	<20	40–70	70–100	>90	0–100

2. táblázat. Hagyományos víztisztítási módszerek összefoglalása (saját szerkesztés)

	Elsődleges tisztítás tisztítás		Másodlagos tisztítás	Harmadlagos tisztítás				
Technológiai cél	durva szennyezések eltávolítása	ülepíthető és finom lebegőanyag eltávolítása	szerves anyag eltávolítása, nitrifikáció	finom lebegő-anyag eltávolítása	kolloidok eltávolítása, kivonása	nitrogén-kivonás	oldott szerves anyagok eltávolítása	sótalanítás
Alkalmazott eljárás	szűrés durva és finom rácson	homokfogás, ülepítés, centrifugálás, olaj és zsír lefölözése	csepegtetőtestes rendszer, eleveniszapos rendszer, anaerob rothasztó	homokszűrés, mikroszűrés	derítés, kicsapatás	denitrifikáció, ioncsere	aktív szenes adszorpció, kémiai oxidáció	fordított ozmózis, elektrodialízis, desztilláció

bilizálása céljából, továbbá azok kicsapatással történő koagulációját, illetve flokkulálószerekkel történő aggregáltatását megelőzően. Az EDC-k úgy, ahogyan a többi vízszennyező általában, a fém-hidroxidok koagulációja során mechanikusan (ún. sepregető koaguláció révén) eltávolíthatók.

Hidrofób anyagok adagolásával a szerves szennyezők megkötődhetnek a poláros funkciós csoportok kölcsönhatása következtében, továbbá töltéssel rendelkező részecskéken vagy agyagásványok felületén komplexképzéssel vagy ioncsere révén.

A különböző kapcsolódási mechanizmusok rendkívül fontos szerepet játszanak például az ivóvízkezelésben, ahol az ásványok oxidjai nagymértékben képesek megkötni felületi funkciós csoportjaik által a poláros gyógyszermaradványokat [11,12].

A hagyományos víztisztítási műveleteken belül alkalmazott koagulánsok és flokkulánsok általi ülepítéses technikák alkalmazását vizsgálták Keun és társai [13]. Vizsgálataik során elemezték polialumínium-klorid (PACl), polialumínium-szilikát-szulfát (PASS), polialumínium-klorid-szilikát (PACS) és $Fe_2(SO_4)_3$ koagulálószerek ösztrogén típusú anyagok eltávolítására gyakorolt hatását. Munkájuk során bizonyítást nyert, hogy ezek a hagyományos vízkezelésben alkalmazott szerek a fent említett szennyezők eltávolítására csak kis hatékonysággal alkalmazhatók (0–7%). Továbbá, a PACl hatására végbemenő adszorpció jóval kisebb hatékonyságú, mint az oxidációs módszerekkel történő roncsolásos műveletek. Több mint 10 mg/l kezdeti koncentrációjú BPA és nonilfenol alkalmazása esetén 15 perces érintkeztetési idő mellett a folyamat hatékonysága elfogadhatónak bizonyult (25–40%). Azokban a kis koncentrációtartományokban, melyekben az EDC-k hatást gyakorolnak az élő szervezetekre, tehát eltávolításuk indokolt, a PACl nem képes ezen anyagok megkötésére, így a gyakorlatban felmerülő problémák esetében ez a módszer nem alkalmazható.

Aktív szenes adszorpció

Bizonyos típusú gyógyszermaradványok megkötésére alkalmazhatók az aktív szenek is. Ezeknek a hatékonysága a tulajdonságaik (felület nagysága, pórusméret-eloszlás, felületi töltés, hidrofobitás) függvényében eltérő lehet. A domináns mechanizmus a szerves anyagok eltávolítása során a részecskék között fellépő hidrofób kölcsönhatás; továbbá az ioncsere is (bizonyos mértékben) szerepet játszhat [14,15]. Az előzők következtében az aktív szenek a nem poláros szerves szennyezők eltávolítására alkalmasak. Ez a módszer az EDC-k tekintetében az általános víztisztítási módszerekhez viszonyítva jóval hatékonyabb megoldást jelent. A poláros alkotók eltávolítása során az aktív szenes adszorpció erősségét döntően a poláros kölcsönhatások mértéke határozza meg.

Keun és társai [13] hét különböző tulajdonsággal bíró aktív szén hatását tesztelték vizsgálataik során. Az aktív szenekkel végzett adszorpció hatékonyságát 15 perces kontaktidő esetén vizsgálták. Az ilyen típusú eltávolítási módszer hatékonynak bizonyult, azonban figyelembe veendő, hogy a tisztítóüzemekben alkalmazott valós tartózkodási idő jóval kevesebb, mint a vizsgálatokban alkalmazott kontaktidő. Mindezeken túl az aktív szenek regenerálása is drága folyamatnak bizonyul.

Zhang és társa [16] az adszorbensek adszorpciós kapacitására E2 és EE2 szennyezők (17β-ösztradiol, 17α-etinil-ösztradiol) eltávolítására vonatkozóan a következő sorrendet állították fel: elszenesített adszorbens > granulált aktív szén > ioncserélő rendszer > citozin > citozán.

Kimutatták továbbá, hogy a természetes körülmények között a rendszerben jelen lévő felületaktív anyagok és huminsavak, valamint ezekben a rendszerekben szinte mindig jelen lévő kolloidok nagymértékben befolyásolják az adszorpciós folyamatok hatékonyságát. Ezek az anyagok ugyanis az aktív szenek adszorpciós állandóját növelik. A különböző felületaktív anyagok jelenléte a szennyezők oldhatóságát megváltoztatja, míg a huminsavak komplexeket képezhetnek a szennyezőkkel.

Az E2 és EE2 anyagok aktív szenes adszorpciós módszerrel történő eltávolítása során a valós szennyvizekből történő megkötés mértéke jelentősebb lehet annál, mint amire a laboratóriumi modellrendszereken megfigyelt tesztek eredményei utalnak. A valós rendszerekben a szükséges tartózkodási idő is csökkenhet a laboratóriumi körülmények között alkalmazotthoz viszonyítva. Fenti szerzők kimutatták továbbá, hogy az aktív szenes adszorpció hatékonyságát a pH is nagymértékben befolyásolja. Ennek oka, hogy a pH-változás hatására a részecskék felületi töltése megváltozik. EE2 szennyező vizsgálata során 8 feletti pH-értékeknél az aktív szenes adszorpció mértéke jobb eredményeket mutatott, mint ami a pH-megváltoztatás előtti esetben megfigyelhető volt. Kouras és társai [17] dodin (n-dodecilguanidin-acetát) porított aktív szeneken történő adszorpcióját vizsgálva hasonló eredményekhez jutottak. E2 esetében Zhang és társa [16] kimutatták, hogy 8 feletti pH alkalmazása esetében az adszorpció kevésbé hatékony, mint 8 alatti tartományban vizsgált folyamat esetében.

Roncsolásos technikák

A Zhang és társa [18] által végzett vizsgálatok során kimutatták, hogy ezeknek az anyagoknak az UV-val történő roncsolása lényegesen hatékonyabb, mint a napfény általi lebontása, mivel az UV-abszorbanciájuk nagy. Ez a folyamat azonban hatékonyságát tekintve erősen függ az eltávolítandó anyag kezdeti koncentrációjától. Biszfenol-A (BPA) és nonilfenol eltávolításának vizsgálata során az oxidációs módszerek 60–89%-ban mutatkoztak hatékonynak. Keun és társai [13] 7 perces kontaktidő esetén vizsgálták az ózonos és a klóros oxidáció hatását a szennyezők (kezdeti koncentráció: 500 ng/L) eltávolítására **(3. táblázat)**.

3. táblázat. Ózonos és klóros oxidációs technikák BPA és nonilfenol vizekből való eltávolítására kifejtett hatása Keun és társai [13] adatai alapján (saját szerkesztés)

	Ózonos oxidáció (%)		Klóros oxidáció (%)	
	Ózon kezdeti koncentráció: 1 mg/L	Ózon kezdeti koncentráció: >4 mg/L	Klór kezdeti koncentráció: 1 mg/L	Klór kezdeti koncentráció: >5mg/L
BPA	60	100	5	100
Nonilfenol	89	100	58	100

A kutatók megfigyelték, hogy az ózonos oxidáció nagyobb kezdeti ózon- és klórkoncentrációknál hatékonyabb, mint alacsonyabb kezdeti koncentrációk alkalmazása esetében. A táblázat adatai alapján megfigyelhető továbbá, hogy az ózonos oxidáció ugyanolyan feltételek mellett hatékonyabb megoldást nyújt a fenti szennyezők vizekből való eltávolítása során, mint a klóros oxidáció alkalmazása.

Az EDC-k oxidációja a funkciós csoportjaik szempontjából szelektív módszer. A reaktivitásuk általános sorrendje aromás és

alifás vegyületek esetében a következő: tiolok> aminok> hidroxilcsoport> karboxilcsoport. Az aromás vegyületek jóval reaktívabbak, mint az alifásak. Általánosan elterjedt az 5–30 MJ/cm^2 UV-dózis alkalmazása az EDC vegyületek roncsolása során, az egyéb mikroszennyezők roncsolásához ennél jóval kisebb mennyiség elegendő. Az EDC szennyezőkre nézve a rendkívül nagy energiaszükséglet miatt azonban ennek a módszernek az alkalmazása gazdaságossági szempontból nem indokolt. Az UV és a fent említett roncsolási módszerek együttes alkalmazása a hormonszerű anyagok vizekből történő eltávolítása során azonban bizonyos esetekben célravezető lehet.

Biotranszformáció/biodegradáció

Jelenleg az EDC anyagok lebomlásának tanulmányozására az egyik legelterjedtebb módszer a szennyvízkezelő üzemek aktív iszapjának vizsgálata. Egy általános szennyvízkezelő üzemben az aktivált iszapban eltöltött idő vagy biológiai szűrők hatására a kezdeti 300 mg/l-es BOI érték néhány óra alatt akár 10 mg/l-es értékre lecsökkenhet. Ezen anyagok lebontásával kapcsolatban egyre nagyobb mennyiségű adathoz férhetünk hozzá, azonban a köztük lévő kompatibilitás csak nehezen található meg. Egy víztisztító rendszer hatékonyságának vizsgálatakor ugyanis a körülmények sosem tisztázhatók 100%-ban, így például az aktivált iszapban történő tartózkodás pontos ideje, a hőmérséklet, a nitrifikációs, a denitrifikációs és a foszfateliminációs folyamatok nem ismertek pontosan annak ellenére, hogy kísérleti szempontból ezek igen fontos tényezők. Mindezen túl a detektálási módszerek is eltérhetnek. Egy nagyobb város szennyvízkezelése során az EU-ban a biológiai tisztítás szakaszában eltöltött idő 4–14 óra között változhat, kisebb városok, falvak üzemeiben ez az idő mindössze 0,5 óra.

A módszer alapját a szennyezőanyagok baktériumok általi lebontása adja [19], továbbá fontos szerepet játszik az iszap megkötőképessége is, ugyanis a víztelenítés során az EDC anyagok vizes fázisba jutása ezáltal is csökken. A kezdeti tanulmányok ebben a témában főként a biodegradáció kérdéskörére korlátozódtak. A szerzők egyértelműen kimutatták, hogy a vizsgált szennyező típust hatékonyan eltávolították az adott rendszerből az aktivált iszappal történő kezelés során. A degradációval keletkező bomlástermékek változataival és azok környezetre gyakorolt hatásával sokáig nem számoltak a kutatások. Gyakran ugyanis az „anya”-komponens sikeres lebontásával keletkező bomlástermékek nagyobb veszélyt jelentenek a környezetre, mint maga a kiindulási anyag.

A lebontási módszer hatékonyságát igazolják az alább bemutatott kutatási eredmények is. Johnson és társai [19] kimutatták, hogy E1 és E2 szennyezők aktivált iszapban történő kezelés hatására (E1) 88% és (E2) 74%-ban távolíthatók el. A Baronti és társai [10] által közölt cikkben a római szennyvízkezelők hatékonyságára vonatkozóan találhatók adatok **(4. táblázat)**.

4. táblázat. Római szennyvízkezelő üzemek aktív iszapjának E1 és E2 anyagok eltávolítására gyakorolt hatása [10]

Tisztítóüzem	E1 anyag (%)	E2 anyag (%)
Roma Sud	76	19
Roma Est	92	84
Roma Nord	92	65

A bemutatott adatokból következik, hogy mind a vizekből, mind a talajokból történő eltávolítás során a jövőben igen hatékony és olcsó eljárás lehet ez a módszer, azonban a fentebb leírt probléma (köztes termékek keletkezése) kapcsán célszerű egy másik eljárással (pl. ózonos kezelés) kombinálva alkalmazni.

Membránszeparációs technikák

Az ultra- (UF) és nanoszűrés (NF) a hagyományos ivó- és szennyvízkezelési eljárások során a mikroszennyezők és természetes szerves anyagok (NOM – Natural Organic Matter) eltávolítása során széles körben elterjedt módszerek.

A Kiso és társai [24] által végzett kutatások erősen hidrofób szennyezők (például aromás peszticidek, alkil-ftalátok) NF membránok általi eltávolíthatóságának vizsgálatára irányultak. Megállapították, hogy a szennyezők eltávolíthatóságának mértéke erős összefüggést mutat a molekulatömeggel, annak méretével és hidrofobicitásával.

Az EDC anyagok legtöbbjének mérete 150–500 dalton között változik. Ennek következtében csak azok a szennyezők távolíthatók el mikro- vagy ultraszűréssel, melyek más részecskével valamely fentebb említett mechanizmus (flokkuláció, koaguláció) szerint kontaktusban állnak. A legtöbb EDC és PPCP vegyület reverz ozmózis (RO) vagy nanoszűrés által (így például RO alkalmazása esetén a szteroid hormonok 90%-a) távolítható el [20].

Yoon és társai [25] 27 féle EDC anyag membránokkal való eltávolíthatóságát vizsgálták vizes modellrendszerből és három eltérő felszíni vízből. Megállapították, hogy egy szennyező minél polárosabb, minél kevésbé illékony és kevésbé hidrofób, annál alacsonyabb tartózkodási idő elegendő az eltávolításához, azaz az NF (600 ± 200 dalton) és UF (8000 ± 1000 dalton) szűrési technikák esetén a tartózkodási idő a hidrofób adszorpció mértékével áll közvetlen összefüggésben. Kimutatták továbbá, hogy a vizsgált EDC szennyezők esetében a tesztelt NF és UF membránok által átlagosan megkötött tömeg 0 és 2,5 ng/cm^2, ahol a hatékony membránfelület 16,9 cm^2. Az NF membrán esetében a tartózkodási idő hosszabbnak bizonyult, mint az UF membránok esetében, ennek okát a szerzők a pórusméretek eltérésére vezették vissza, továbbá összefüggést véltek felfedezni a vizsgált vizek kémiai tulajdonságaival is.

Összegzés

Összegezve a fentieket:

- A kis koncentrációban jelen lévő EDC szennyezők eltávolítására a hagyományos víztisztítási módszerek közül a leghatékonyabbnak az ózonos roncsolás és az aktív szenes megkötés mutatkozott.
- Abban az esetben, ha biológiailag aktív szenet használva a módszert kiegészítjük ózonos oxidálással, azaz a két módszer kombinációját alkalmazzuk, a szükséges üzemi tartózkodási idő csökken, így a gyakorlatban is célravezető módszerhez jutunk.
- A koagulációs/flokkulációs technikák főként a hidrofób szennyezők eltávolítására alkalmasak, ezek a folyamatok hatékonyabbá tehetők aktív szén vagy egyéb kolloidális méretű segédanyag adagolásával.
- Az aktív szenes adszorpció a hidrofób anyagok eltávolítására igen alkalmas technika, de a folyamat poláros vagy nagy molekulatömegű anyagok esetében csak részben dokumentált az irodalomban. Miután a tisztítási folyamatok során jelentős mennyiség felhasználása indokolt, és a regeneráció is drága, így ez viszonylag költséges megoldásnak számít.

- Az oxidációs folyamatok preferenciálisan az elektronaktivált funkciós csoporttal rendelkező alkotókat támadják (tiol, amin, hidroxilcsoportok), melyek C=C kettős kötések mellett foglalnak helyet. A gyógyszermaradványok jóval gyorsabban reagálnak e technológiák alkalmazása során, mint a többi módszer esetében. Előnye tehát, hogy gyors és hatékony az ilyen jellegű eljárás.
- Membrántechnikák esetén az eltávolításnak fizikai korlátot szab a molekulák mérete, így tehát a különböző módszerek alkalmazása az EDC anyagok mérete, polaritása, továbbá a membrán tulajdonsága függvényében eltérő hatékonyságú lehet.

KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

A tanulmány a TÁMOP-4.2.1.B-10/2/KONV-2010-0001 jelű projekt részeként – az Új Magyarország Fejlesztési Terv keretében – az Európai Unió támogatásával, az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával valósul meg.

IRODALOM

[1] J.W. Cook, E.C. Dods, C.L. Hewett, W. Lawson, Proceed. R. Soc. Lond. (1934) B114, 272.
[2] B.S. Walker, J. C. Jenney, Endocrinology (1930) 14, 389.
[3] D.M. Fry, C.K. Toone, S.M. Speich, R.J. Peard, Stud. Avian Biol. (1987) 10, 26.
[4] S.A. Snyder, P. Westershoff, Y. Yoon, D.L. Sedlak, Env. Eng. Sci. (2003) 20, 449.
[5] Y. Yoon, P. Westerhoff, S. Snyder, M. Esparza, Water Res. (2003) 37, 3530.
[6] C. Desbrow, E.J. Routledge, G.C. Brighty, J.P. Sumpter, M.J. Waldock, Environ Sci Technol. (1998) 32, 1549.
[7] T.A. Ternes, M. Stumpf, J. Mueller, K. Haberer, R.D. Wilken, M. Servos, Sci Toal Environ. (1999) 225, 81.
[8] R. Liu, A. Wilding, J. Zhou, Chromatogr. (2004) 1022, 179.
[9] H.M. Kuch, K. Ballschmitter, Environ Sci Tenchnol (2001) 35, 3201.
[10] C. Baronti, R. Curini, G. D'Ascenzo, A. Di Corcia, A. Gentili, R. Samperi, Environ Sci Technol. (2000) 35, 5059.
[11] J. Tolls, Environ. Sci. Technol. (2001) 35, 3397.
[12] M. Fielding, L. Harding, C. James, N. Mole (1998) UK WIR Report 98/TX/01/5.
[13] J.C. Keun, G.K. Sang, W.K. Chang, P.K. Jae, Korean J. Chem Eng. (2006) 23, 399.
[14] Y. Matsumara, K. Yamabe, H. Takahashi, Carbon (1985) 23, 263.
[15] J. C. Crittenden, S. Sanongraj, J.L. Bulloch, D.W. Hand, T.N. Rogers, T.F. Speth, M. Ulmer, Environ. Sci. Technol. (1999) 33, 2926.
[16] Y. Zhang, J.L. Zhou, Water Res. (2005) 39, 3991.
[17] A. Kouras, A. Zoubulis, C. Samara, T. Kouimtzia, Chemosphere (1995) 30, 2307.
[18] Y. Zhang, J. L. Zhou, Chemosphere (2008) 73, 848.
[19] A.C. JohnsonA.C. Belfroid, A. Di Corcia, Sci. Total Environ. (2000) 256, 163.
[20] C.H. Huang, D.L. Sedlak, Environ. Toxicol. Chem. (2001) 20, 133.
[21] O.A. Jones, J. N. Lester, N. Voulvoulis, Trends in Biotechnology (2005) 23, 163.
[22] Á. Sebők, A. Vasanits-Zsigrai, A. Helenkár, Gy. Záray, I. Molnár-Perl, Journ. of Chr. A. (2009) 1216, 2288.
[23] A. Wise et al, Environ. Sci.Technol. (2011) 45, 51.
[24] Y. Kiso, A. Mizuno, R. Othman, Y. J. Jung, A. Kumano, A. Ariji, Desalination (2002) 143, 147.
[25] Y. Yoon, P. Westerhoff, S. A. Snyder, E. C. Wert, J. Yoon, Desalination. (2006) 202, 16.

Kémikus a kávézóban – miniopera öt felvonásban

A kiemelkedően mulatságos tudományos eredményeket elismerő Ig Nobel-díjakat tavaly szeptemberben 21. alkalommal adták át a Harvard Egyetemen. 2011 a kémia éve volt, ezért az ünnepségen is a kémia játszotta a főszerepet. A díjátadáson 1996 óta szokás, hogy bemutatnak egy minioperát: tavaly ennek a címe *Kémikus a kávézóban* volt. Az Interneten a teljes esemény, így a miniopera mind az öt felvonásának videófelvétele is megtekinthető. A beharangozóból meg lehet tudni például azt is, hogy az operát előadó művészek mindannyian vegyi anyagokból vannak.

Az első felvonásban („A Chemist Comes into a Coffee Shop", 29:30) egy megfáradt kémikus a felfrissülés reményében tér be egy kávézóba. Közben azért egy dalt is elénekel a kávézó két felszolgáló hölgyének segítségével Johannes Brahms V. Magyar táncának dallamára, ez magyar fülnek ugyancsak kellemesen hangzik. A második felvonás („Something About Coffee", 43:20) a miniopera leghosszabb önálló része Georges Bizet Carmen című operájának két áriájára alapozva (Habanera és Torreádor-dal). Az átírt szöveg a kávé hatóanyagairól szól, az eredeti Habanerában sokszor elhangzó „l'amour" helyett például mindig a „caffeine" szó szerepel, s a valóban kémikus hallgatók még a vegyület molekulaképletét is megtudhatják ($C_8H_{10}N_4O_2$).

A harmadik felvonás („The Coffee Diet...", 1:04:20) Jacques Offenbach Kánkánjának (Orfeusz az alvilágban) dallamára a kávé élettani hatásait ismerteti, külön is kiemelve a koffein vízhajtó tulajdonságát. A zenéhez illő táncmozdulatok elvégzésében a színpadon lévők egy részét a laborköpeny bizony meglehetősen akadályozza. A negyedik felvonás („In the Coffe", 1:18:15) a szénhidrátkémia alapjaiba vezeti be a nézőket Luigi Denza olasz zeneszerző híres Funiculì Funiculà című dalának zenéjére. Hogy teljes legyen a kávéba tett ízesítőkről alkotott kép, a tejszínről is megemlékezik egy versszak.

Az ötödik felvonás („The Ingredients", 1:36:40) a finálé; az ünnepségen részt vevő minden (valódi) Nobel-díjasnak munkát adott. A zene eredetileg Arthur Sullivan angol zeneszerző Penzance kalózai című zenés vígjátékából származik, de kémikuskörökben sokkal híresebbé vált Tom Lehrer matematikus-zenész feldolgozásában, aki erre a dallamra az összes kémiai elem nevét sorolta fel szűk másfél percben. Tom Lehrer személyesen is részt vett a legelső Ig Nobel-díj átadásán, és azóta igen büszke arra, hogy ezt a tettet soha nem ismételte meg. Az Elemek dalt a díjátadás során egyébként a minioperán kívül is előadják (02:00), mi több, Arisztotelész ízlésének megfelelően átfogalmazott változatban is elhangzik (23:30).

Az utókor a *Kémikus a kávézóban* ősbemutatójának napját minden bizonnyal az egyetlen bemutató napjaként fogja megőrizni emlékezetében. 2012. szeptember 20-án vadonatúj tudományos minioperát hallgathat meg majd a világ az idei Ig Nobel-díjak átadásán.

Lente Gábor

INTERNETELÉRÉS:

http://sprudge.com/ig-nobel-prize-chemist-in-a-coffee-shop-mini-opera.html (videó),
http://improbable.com/airchives/paperair/volume17/v17i6/AIR_17-6_screen.pdf (librettó)

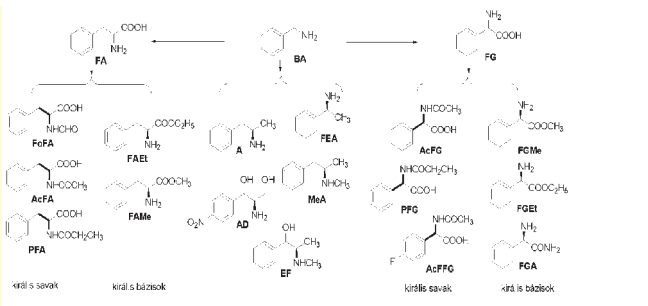
Bruckner-termi előadások

Pálovics Emese
MTA–BME SZKT Kutatócsoport | epalo@mail.bme.hu

Rokon molekulaszerkezet hatása az enantiomerkeverékek elválasztására

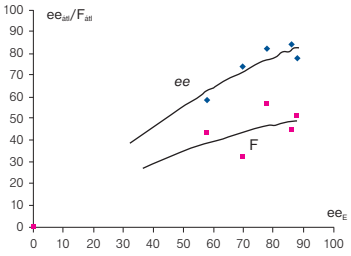
Az aszimmetrikus vegyületek, az enantiomerek az élet minden területén megtalálhatók és nélkülözhetetlenek. Idesorolható a gyógyszerek, a vitaminok, a katalizátorok egy meghatározó része is. Ugyanakkor a gazdaságos szerves kémiai szintézisek során ezeknek az enantiomereknek a racém vegyülete keletkezik és különösen a gyógyszeripar esetében csak az egyik, a kívánt hatást előidéző enantiomert állítják elő, túlnyomórészt reszolválással. Ilyenkor az intermediereket, ritkábban a végtermékeket a legtöbb esetben diasztereomer sóképzéses reszolválással bontják enantiomerjeire. Eredményeink [1] alapján úgy tűnik, hogy a racém vegyületek (1:1 arányú enantiomerek keverékei) eredményes elválasztásakor nemcsak a kiindulási racém vegyületek „diasztereomer" stabilitásával kell számolnunk, hanem a racém összetétel elbontása során kialakuló enantiomerkeverékek viselkedésével, például a keletkezett eutektikus összetételével is. Az enantiomerkeverékek szilárd és folyadék fázis közötti megoszlása az 50%-os enantiomertisztaságnál a legnagyobb, amikor a keverék fele az egyik enantiomer, a másik fele pedig racém vegyület, melyek egymással egyensúlyt tartanak. Úgy véljük, hogy ha az enantiomert és a racém vegyületet egymással sóképzésre alkalmas származékká alakítjuk, akkor ezek 1:1 arányú reakciója során a szerkezetüknek megfelelő maximális diasztereomer elválasztást érhetünk el. Tehát ha a racém vegyületet (vagy származékát) egy rokon molekulaszerkezetű (például az egyik enantiomerjének megfelelő – ellentétes kémiai karakterű – származékával, mint) reszolválóágenssel reagáltatjuk, akkor 50%-os enantiomertisztaságú kvázi-enantiomerkeverék szilárd-folyadék fázisok közötti megoszlása jön létre. Ezért a benzilaminból önkényesen leszármaztatott savakat és bázisokat használtunk **(1. ábra)**.

1. ábra. A vizsgált vegyületek és a közöttük fennálló szerkezeti rokonság



Miután a kvázi-enantiomerkeverékek reakcióit vizsgáltuk, előzőleg tanulmányoztuk a racém vegyületek enantiomerkeverékeinek a reakcióit. Ezek során a vegyületek enantiomerkeverékeit frakcionált kicsapással választottuk el, és az alapváz szubsztituensei szerint a konglomerátum- és a racemát-viselkedés mellett, kinetikus kontroll hatására fellépő konglomerátszerű viselkedést is tapasztaltunk.

Az elvégzett reszolválások eredményei alapján egy racém vegyületnél **(FoFA)** minden diasztereomer homokirális összetételű volt, tehát kvázi-konglomerátumok és öt racém vegyület reszolválásai során a diasztereomerek heterokirális összetételűek voltak, tehát kvázi-racemátok. [2]

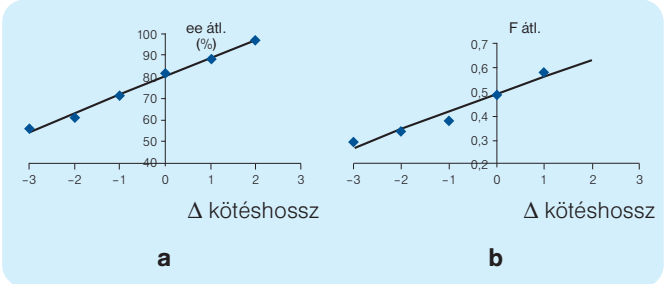


2. ábra. A diasztereomereket alkotó enantiomerek enantiomertisztasága és reszolválhatósága a racém vegyület eutektikus pontjához tartozó *ee* függvényében

A reszolválások eredménye a racém vegyület enantiomerkeverékeinek a függvénye, és az enantiomer eutektikus összetétele jelenik meg a diasztereomerekben **(2. ábra)**. [3]

A Sakai-féle felismerés, [4] hogy a diasztereomereket alkotó rokon szerkezetű molekulák hosszainak a különbsége befolyásolja az enantiomerelválasztást, a vegyületeinkre is érvényes. A diasztereomert alkotó molekulák hosszának azonos különbségeihez tartozó átlagos *ee* és F értékek egyenest adnak **(3. ábra)**.

3. ábra. A reszolválás során kapott átlagos tisztaság (a) és reszolválhatóság (b) a diasztereomereket alkotó átlagos kötéshosszak különbségeinek függvényében



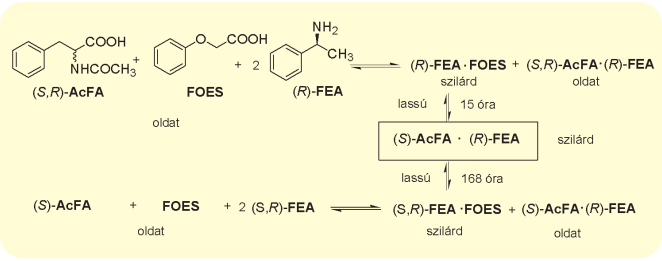
Fordított reszolválás esetében a reszolválóágensek racém vegyületeinek az elválasztása mindegyik sav-enantiomerrel megoldható, de a legkedvezőbbek itt is a racémként legjobban reszolválható *N*-acetil-származékok.

A származék-származék reszolválás alkalmazásával a legkevesebb kísérleti munkával találhatunk biztos reszolválóágenst, míg a hagyományos reszolválóágensek kiválasztása igen sok munkát igényel, de eredmény esetén ez akár kedvezőbb is lehet (pl. az ára miatt).

Ugyancsak kedvezőbb reszolválás érhető el, ha a reszolválóágens, vagy a racém vegyület egy részét rokon szerkezetű, de akirális vegyülettel helyettesítjük. Erre példa az **AcFA/FEA** reszolválás, ami csak **FOES** közvetítésével lehetséges. Ekkor a királis **FEA-FOES** só gyorsan kiválik és ez a királis kristály reagál a racém **AcFA** oldattal (a termodinamikai egyensúly beálltáig). A fordított reszolválásnál a szintén gyorsan kiváló racém **FEA-FOES** sóval reagál az oldott **AcFA** enantiomer, tehát a termodinamikai kontroll beállásához még hosszabb kristályosodási idő szükséges. [5]

Az eredeti és fordított reszolválások időbeli lefutása megfigyelhető nemcsak a termodinamikus, hanem a kinetikus kontroll érvényesülésekor is.

A reszolválások időfüggése termodinamikus kontroll esetén



Az enantiomerkeverékek reakcióit és -időfüggéseit a diasztereomer viszonyú homo- és heterokirális asszociátumok tulajdonságai határozzák meg, rokon molekulaszerkezetű reszolválóágensek alkalmazásakor a diasztereomerek is kvázi enantiomerkeverékeket alkotnak, az időfüggéseik (kinetikus, termodinamikus kontroll) hasonlóak, és mindez érvényes a fordított reszolválásokra is.

Megfigyeléseinket több esetben eredményesen alkalmaztuk az ipari kutatás vagy az adott technológia kialakításánál. [6–10]

Feltételezzük, hogy ezek a megállapításaink érvényesek lehetnek akkor is, ha a racém vegyülettel nem rokon molekulaszerkezetű a reszolválóágens.

KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS.
Kutatásainkat az OTKA (T 75236) valamint a TÁMOP-4.2.1/B-09/1/KMR-2010-0002 támogatták.

IRODALOM

[1] Faigl F., Fogassy E., Nógrádi M., Pálovics E., Schindler J., Org. Biomol. Chem. (2010) 8, 347–359.
[2] Pálovics E., Schindler J., Borsodi J., Bereczki L., Marthi K., Faigl F., Fogassy E., Műszaki Szemle (2007) 39–40., 48–51.
[3] Pálovics, E., Faigl, F., Fogassy, E., 4th Symposium on „New Trends and Strategies in the Chemistry of Advanced Materials" Timisoara, 2010.
[4] Sakai K., Sakurai R., Nohira H., in Topics in Current Chemistry (ed. Sakai, K), Springer Verlag, Berlin–Heidelberg, 2006. pp. 199–231.
[5] Pálovics E., Schindler J., Faigl F., Fogassy E., Műszaki Szemle (2009) 49, 14–18.
[6] Schindler J., Faigl F., Hegedűs L., Pálovics E., Fogassy E., Tetrahedron: Asymm (2008) 19, 773.
[7] Kálai T., Schindler J., Balog M., Fogassy E., Hideg K., Tetrahedron (2008) 64,1094.
[8] Bodi J., Szőke K., Éles J., Fogassy E., Schindler J., Farago J., Temesvári K., Gáti T., P0600946 2006.
[9] Gizur T., Fogassy E., Balint J., Egri G., Törley J., Demeter A., Greiner I., Chirality (2008) 2, 6, 790.
[10] Fogassy E., Schindler J., Pálovics E., Neu J., Szalma N., Kálvin P., Jakab G., Garadnay S., P10 00186 2010

Székely Edit
■ Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

Szuperkritikus szén-dioxid: új lehetőségek az optikailag aktív vegyületek előállításában

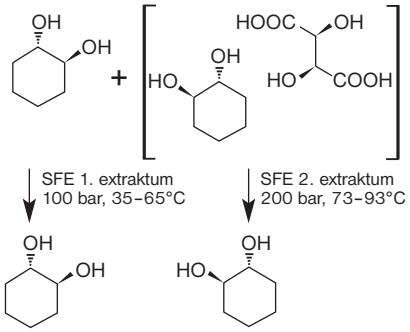
A hagyományos oldószerek mellett mind gyakrabban alkalmaznak alternatív, kis környezetterhelésű oldószereket a kémiai kutatásokban és a vegyipari, élelmiszer-ipari és a kapcsolódó ágazatok gyártófolyamataiban is. Ezek közül az alternatív oldószerek közül az egyik a szén-dioxid, ami a kritikus hőmérséklete (31 °C) és nyomása (7,38 MPa) felett viszonylag jól szabályozható oldóképességű apoláris oldószer. Sűrűsége a gyakorlati alkalmazások szempontjából releváns tartományban 500–800 kg/m^3. A nyomással és hőmérséklettel szabályozható folyadékszerű sűrűsége alkalmassá teszi reakcióközegként a szelektivitás és a reakciósebesség optimálására, valamint a reakció lejátszódása után a feldolgozó folyamatok leegyszerűsítésére.

Simándi Béla és Fogassy Elemér professzorok (BME) a világon elsőként alkalmazták a szuperkritikus szén-dioxidot optikailag aktív vegyületek preparatív léptékű extrakciós elválasztására 1994-ben. [1] Az elindított kutatási téma folytatásaként mára már a *szuperkritikus fluidum extrakció (SFE)* mellett a szén-dioxidban történő *in situ sóképzés*, az *antiszolvens kristályosítás* és a szén-dioxid oldószerben végrehajtott enzimkatalizált *kinetikus reszolválás* megvalósítási módját is kidolgoztuk, és bemutattuk ezek hatékonyságát enantiomertiszta vegyületek előállítására. Az előadásban és az alábbiakban az egyes módszerek kvalitatív ismertetése mellett egy-egy példán mutatom be az eljárások előnyeit.

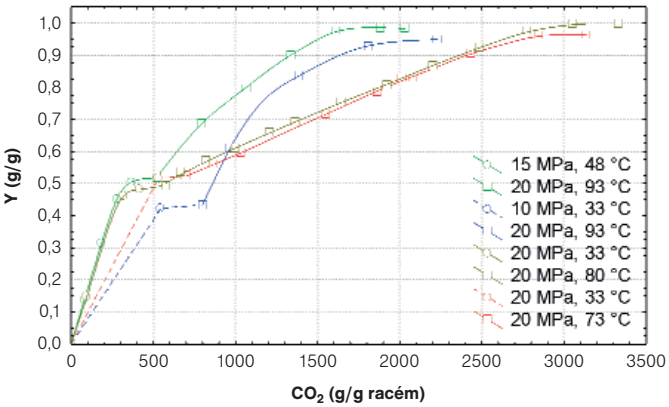
Szuperkritikus fluidum extrakció

A szén-dioxid szelektíven oldja az apoláris komponenseket, míg a poláris komponensek, például sók gyakorlatilag oldhatatlannak tekinthetőek. A módosított Pope–Peachy-reszolválás során félék-

vivalens mennyiségben adagoljuk a reszolválószert a racém vegyülethez, oldható akirális segédanyag hozzáadása nélkül, alkalmasan választott oldószerben, atmoszférikus nyomáson, majd az oldószert vákuumban elpárologtatjuk. A kapott szilárd mintából *SFE*-vel az enantiomereket kioldjuk, a diasztereomer só az extraktorban visszamarad. Az elérhető enantiomertisztaság és reszolválhatóság az extrakciós nyomással és hőmérséklettel (valamint a sóképzés körülményeivel) optimalizálható. Abban az esetben, ha a racém vegyület vagy a reszolválószer olvadékként is elérhető, a diasztereomerképzés oldószer nélkül is szelektív lehet. Egyes diaszteromerek esetében (*transz*-2-szubsztituált-ciklohexanolok és a mentol borkősav-származékokkal képzett komplexei, vagy a *cisz*-krizantémsav 2-benzilamino-1-butanollal képzett sója) az elreagálatlan enantiomer kíméletes extrakciója után nyomás- és hőmérséklet-emeléssel a diasztereomer *in situ* megbontható, és egy második extrakciós lépésben a másik enantiomer is kinyerhető. A *frakcionált szuperkritikus extrakciós eljárás* raffinátuma a reszolválószer, ami közvetlenül újrafelhasználható **(1. ábra)**. [2,3]



1. ábra. *Transz*-1,2-ciklohexándiol reszolválása frakcionált szuperkritikus extrakcióval (ee: enantiomer tisztaság, Y: racémre vonatkoztatott kitermelés)



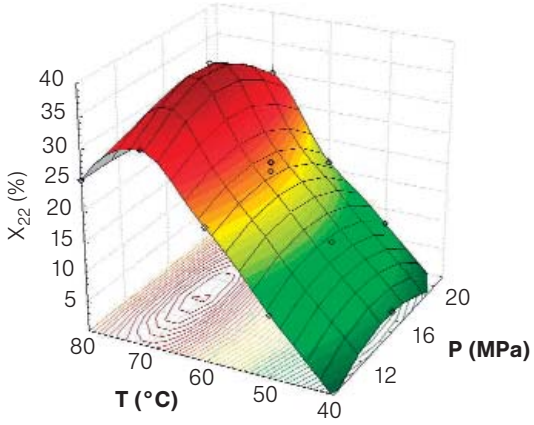
Szén-dioxidban végzett *in situ* diasztereomer sóképzési kísérletekkel kimutattuk, hogy ibuprofen–*R*-feniletil-amin diasztereomer só képződése esetén, a reakció negatív aktiválási térfogatának megfelelően, a nyomás növelése növeli a reakciósebességet, a hőmérséklet emelése szintén, azonban ezen felül még a képződő diasztereomer só enantiomertisztasága is nő mind a hőmérséklettel, mind a nyomással, akár 80%-os enantiomertisztaságot is el lehet érni a sóban és az extraktumban is.

Diasztereomer só kritályosítása szuperkritikus antiszolvens technikával

Szén-dioxidot, mint *antiszolvens*t használó kristályosítási módszerek érdeklődésre tartanak számot a szemcseméret, szemcseméret-eloszlás és morfológia szabályozásában. [4] Ezek a módszerek akkor alkalmazhatóak enantiomerek elválasztására, ha a diasztereomer nemcsak a szén-dioxidban oldhatatlan, hanem a szén-dioxid–oldószer elegyben (ún. expandáltatott oldószer) is rosszul oldódik. A racém vegyület és a reszolválószer oldatából a diasztereomer só a szén-dioxid-hozzáadás hatására pillanatszerűen válik ki, a kinetikus hatások érvényesülnek. Laboratóriumi méretű autoklávban 90% feletti enantiomertisztaságú ibuprofen–*R*-feniletil-amin, illetve cisz-permetrinsav–*R*-feniletil-amin sókat kristályosítottunk ki 30 perces kristályosítási idővel metanolból.

Kinetikus reszolválás szén-dioxidban

A lipáz enzimek megőrzik katalitikus aktivitásukat szén-dioxidban. [5] Maguk az enzimek nem oldódnak a szuperkritikus közegben, de mivel a szubsztrát diffúziós állandója akár több nagyságrenddel nagyobb szuperkritikus fluidumban, mint folyadékban, az anyagátadási ellenállás jelentősen lecsökken, és így a bruttó reakciósebesség lényegesen megnőhet. Az enzimreakció sebessége, és bizonyos esetekben enantioszelektivitása, függ az alkalmazott hőmérséklettől és nyomástól **(2. ábra)**, valamint a víztartalomtól is.



2. ábra. A nyomás és hőmérséklet hatása a 22 óra alatt elért konverzióra (X_{22}). 4-fenilazetidin-2-on reszolválása gyűrűnyitással szén-dioxidban *Candida antarctica* B lipázzal

Ha a reagens és a termék oldhatósága jelentősen eltér, a reakció után a termék–szubsztrát elválasztás szén-dioxidos extrakcióval hatékonyan megoldható. [6] Ha minden komponens oldható szén-dioxidban, folyamatos üzemű reaktor is kialakítható. A folyamatos reaktorban az immobilizált enzim megőrzi aktivitását (szakaszos reakciók esetén leeresztéskor végzett nyomáscsökkentés az enzimaktivitás-vesztés legfőbb oka) és a produktivitás a többszörösére növelhető. [7]

A kutatómunkát az OTKA (K72961) támogatja.

IRODALOM
[1] E. Fogassy, M. Ács, T. Szili, B. Simándi, J. Sawinsky, Tetrahedron Letters (1994) 35, 257.
[2] E. Székely, B. Simándi, R. Illés, P. Molnár, I. Gebefügi, I. Kmecz, E. Fogassy, J. Supercrit. Fluids (2004) 31, 33.
[3] E. Székely, G. Bánsághi, P. Thorey, P. Molnár, J. Madarász, L. Vida, B. Simándi, Ind. Eng. Chem. Res. (2010) 49, 9349.
[4] E. Reverchon, I. De Marco, Chem. Eng. J. (2011) 169, 358.
[5] Ž. Knez, M. Habulin, V. Krmelj , The Journal of Supercritical Fluids (1998) 14, 17.
[6] M. Utczás, E. Székely, G. Tasnádi, E. Monek, L. Vida, E. Forró, F. Fülöp, B. Simándi, J. Supercrit. Fluids (2011) 55, 1019.
[7] E. Székely, M. Utczás, B. Simándi: 10th International Symp. on Supercritical Fluids 2012, San Francisco, USA.

Baranyiné C Veres Anna

A Petrik Lajos Két Tanítási Nyelvű Vegyipari, Környezetvédelmi és Informatikai Szakközépiskola

Bemutatkozás

Az 1879-ben alapított iskola fővárosi és országos szinten is jelentős helyet foglal el *vegyipari, környezetvédelmi és informatikai* területen a középfokú oktatásban, a technikusképzésben és a felsőfokú szakképzésben egyaránt. A magas színvonalú szakmai felkészítés mellett az általános műveltség fejlesztésére is nagy hangsúlyt fektetünk. A tanulók az iskola két épületében található korszerű, jól felszerelt tantermekben, laboratóriumokban sajátíthatják el a szakmák elméleti és gyakorlati ismereteit magyarul és idegen nyelven.

FOTÓ: IMAGE FACTORY

2010 szeptemberében már az általunk megálmodott impozáns laborok várták tanulóinkat

Petrik Térségi Integrált Szakképző Központ

2008 óta a főváros egyik szakképzési központjaként iskolánk ad helyet a PETRIK TISZK szakképzési feladatokat ellátó intézetének is.

Beruházás

A 2010. szeptember 30-ig tartó beruházásos EU-projekt végére egy korszerűen felújított, felszerelt és akadálymentesített iskola született, mely a felnövekvő és a szakképzés társadalmi elfogadottságát, fontosságát felismerő korosztály számára bizonyosan örömet fog okozni hosszú időn keresztül.

Korszerűsítés 1 milliárdból

Az iskola korszerűsítésére az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával megvalósuló KMOP 4.1.1. projekt adott lehetőséget. A projekt összköltsége a Fővárosi önrésszel együtt közel *1 milliárd forintot* tett ki, amiből *625 millió forintot a felújításra, 271 millió forintot pedig az eszközfejlesztésre* szánt.

Módszertani fejlesztés több mint 200 millióból

A Petrik TISZK infrastrukturális fejlesztése mellett tartalmi fejlesztés is történt egy másik uniós támogatással megvalósuló projekt keretén belül (TÁMOP 2.2.3.). Az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával több mint *210 millió forintot* fordított az intézmény *szakmai, módszertani fejlesztésekre*, kiemelt szerepet szánva a hátrányos helyzetű tanulók támogatásának.

Természettudományi tárgyak iskolánkban

Iskolánkban nagy hangsúlyt fektetünk a természettudományos műveltség átadására. A választható szakképesítések megalapozásához, a szakmai kompetencia fejlesztéséhez elengedhetetlen a kémia, biológia, fizika és földrajz tantárgyak magasabb óraszámú, gyakorlatorientált oktatása. Szükség lenne a projekt adta lehetőségek kiaknázásával mindezen tantárgyak ismereteinek összekapcsolására, önállóságuk meghagyásával komplex módon való megközelítésükre.

Kémia

A Petrikben a vegyipari képzés hagyományaihoz híven kiemelt fontosságú a kémia

tanítása, ez mind magas óraszámban, mind tartalomban jelentkezik. Az általános, szervetlen, szerves, fizikai és környezeti kémiát a négy év alatt összesen 10 órában tanulják diákjaink magyarul, illetve a két tannyelvű osztályban angolul. Sok-sok tanári és tanulói kísérlettel fűszerezve és laboratóriumi gyakorlattal kiegészítve készítünk fel közép- és emelt szintű magyar és angol nyelvű érettségi vizsgára, továbbtanulásra és a szakképzésre.

Biológia

A biológia oktatás magas színvonalát mutatja, hogy a közép- és emelt szintű magyar és angol nyelvű érettségi vizsgára való felkészítésen túl a környezetvédelemi, a drog- és toxikológusképzések alapjait adja. A négy év alatt heti nyolc órában oktatjuk a biológiát. Új tanítási-tanulási módszerek alkalmazásával, biológiai laboratóriumi gyakorlatokkal segítjük a tudás megszerzését.

Fizika

A fizika a természettudományos tantárgyak sorában fontos szerepet tölt be, szoros kapcsolatban van a kémiával, a fizikai kémiával és a földrajzzal. A leendő vegyészek a négy év alatt átlag hat órában, a környezetvédők négy órában tanulják a fizikát, amely remélhetőleg segít a racionális természettudományos gondolkodás kialakításában. A szertár jól felszerelt. Az előadóban először valósult meg a videó-, a DVD- és projektorkivetítési lehetőség. Az internet segítségével a diákok közvetlenül tanulmányozhatják akár a csillagos eget is. Mód nyílik saját munkájuk bemutatására akár órán, akár a Petrik Napon. Tanáraink a hagyományos módszereket érdekes fizikai kísérletekkel egészítik ki.

Földrajz

Célunk, hogy tanulóinkban legyen igény a földrajzi környezeti tudás megszerzése, fejlődjön ki a tanulókban a környezettudatos gondolkodás. A földrajzórákon szerzett ismereteiket fel tudják használni a környezetvédelem, a természetvédelem, a geodézia tantárgyaknál tudásuk bővítésére, a környezeti problémák komplex megközelítésére. Az iskolában összességében heti négy órában tanulják a földrajzot.

A biológiaoktatás magas színvonalát mutatja, hogy a közép- és emelt szintű magyar és angol nyelvű érettségi vizsgára való felkészítésen túl a környezetvédelemi, a drog- és toxikológusképzések alapjait adja. A négy év alatt heti nyolc órában oktatjuk a biológiát. Új tanítási-tanulási módszerek alkalmazásával, biológiai laboratóriumi gyakorlatokkal segítjük a tudás megszerzését.

Minden egyéb, amit érdemes tudni rólunk…

Szakmai munka

- Emelt szintű érettségi vizsgaközpont vagyunk kémiából és biológiából.
- Az Irinyi János középiskolai kémiaverseny fővárosi 2. fordulója rendszeresen iskolánkban kerül megrendezésre.
- A DELTA TV KÉMIA vetélkedő első napját a Petrikben töltötték a versenyzők az iskolánk tanárai által összeállított szikrázó, színes feladatok megoldásával.
- A Vidékfejlesztési Minisztérium által meghirdetett Környezetvédelmi Országos Szakmai Tanulmányi Versenyt iskolánk rendezi.
- Tanulóink eredményesen szerepelnek országos versenyeken.

Vegyipari laboratóriumok

- *Korszerű* kísérleti és mérőeszközökkel felszerelt, látványos laboratóriumok szerves, szervetlen kémiai és természettudományos gyakorlatokhoz.
- Két szinten, 200 m^2-en 21. századi színvonalú műszeres analitikai laboratórium, ahol az iparban és a kutatólaboratóriumokban is megtalálható HPLC, GC, AS spektrofotométerek, elektroanalitikai műszerek, titrátorok állnak rendelkezésre a technikusképzésben résztvevőknek.
- Műveleti laboratórium, ahol modellberendezések segítik a vegyipari tudományokban való elmélyülést.

Környezetvédelmi laboratórium

- Integrált komplett természettudományi kísérleti eszközrendszer tantermi és terepi kísérletekhez, mérésekhez.
- Mérésadatgyűjtőre épülő meteorológiai állomás: a tanulók folyamatos mérésekkel követhetik a környezeti változásokat.
- Hidrológiai és talajtani vizsgálatok elvégzésére alkalmas gyorstesztek.
- Geodéziai vizsgálatokra alkalmas eszközök, korszerű szintezők, GPS-készülékek.
- Méréstechnikai berendezések, áramlásmérő.

Drog- és toxikológiai, valamint biológiai laboratórium

- 20 korszerű, ezerszeres nagyításra is képes fénymikroszkóp, melyek 3D képalkotásra is képesek.
- Baktériumok vizsgálatára is alkalmas sterilizáló.
- Makro- és mikroszkópos drogvizsgálatokra is alkalmas berendezések, eszközök és vegyszerek.
- Makettek és modellek a szemléltetés érdekében.

Vegyipar

- Diákjaink választhatnak a négyéves – a 12. tanév után érettségivel záruló – és az ötéves, két tannyelvű vegyipari alapozó képzés közül. A két tannyelvű képzés során a 9. évfolyamon heti 16 óra angol nyelvi képzést kapnak a tanulók, majd két tantárgyból angolul érettségiznek.

Érettségi után az alábbi szakképesítések szerezhetők meg a Petrik TISZK-ben:

- általános vegyipari laboratóriumi technikus
- drog- és toxikológiai laboratóriumi technikus
- vegyipari technikus

Környezetvédelem

A környezetvédelem terén folyamatosan igényelt szaktudással vértezzük fel a diákjainkat, akik területük szakembereiként helyezkedhetnek el az iskola elvégzése után.

A környezetvédelem-vízgazdálkodás alapozást választó diákok az érettségivel záruló 12. év után az alábbi szakképesítések közül választhatnak:

- környezetvédelmi méréstechnikus
- természet- és környezetvédelmi technikus
- hulladékgazdálkodó
- települési környezetvédelmi technikus

Informatika

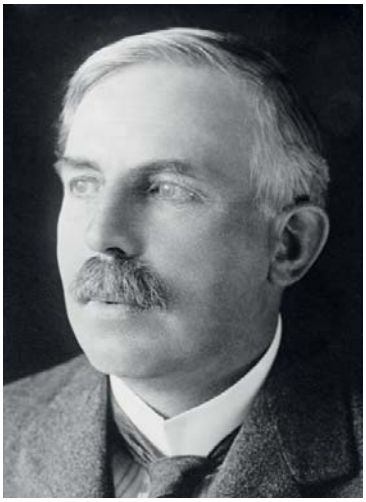
Az informatikai alapozást választó diákok az érettségivel záruló 12. év után kiválóan felszerelt informatikai laboratóriumainkban, Microsoft és Cisco Akadémiai tagként különböző szakképzések közül választhatnak:

- internetes alkalmazásfejlesztő
- szoftverfejlesztő
- informatikai hálózattelepítő és üzemeltető

Vegyészkalendárium

Pap József Sándor rovata

ERNEST RUTHERFORD (1871. AUGUSZTUS 30.), „AZ ELSŐ ALKIMISTA”. Új-Zélandon, Spring Grove-ban születik, vidéki környezetben, James Rutherford és Martha Thompson negyedik gyermekeként (még nyolcan követik). Apja szerelő, anyja a helyi iskola tanítónője, aki gyermekeit alaposan felkészíti az iskolára, mivel a tanulásban látja az egyetlen lehetőséget a felemelkedésre. Ösztöndíjjal kerül a Nelson College-ba, ahol az iskola rögbicsapatának is tagja, majd ismét ösztöndíjasként a Canterbury College hallgatója lesz Christchurchben. BA-fokozatát matematikából és fizikából szerzi 1893-ban. Matematikai képességei révén elnyeri az egyetlen elérhető szenior ösztöndíjat, így további egy évet tölthet az egyetemen. A fizikakurzus követelménye egy önálló kutatási téma kidolgozása. Rutherford úgy dönt, hogy megvizsgálja, vajon mágnesezhető-e a vas nagy frekvenciájú áram hatására. Ennek kapcsán két eszközt is kifejleszt: az egyik áramkörök közötti gyors, a másodperc százezred része alatti kapcsolást teszi lehetővé, a másik egy gyors áramimpulzusokat érzékelő detektor. Huszonkét évesen tehát már igazi kutató, immár MA-fokozattal. 1895-ben újabb diplomát szerez, ezúttal geológiából és kémiából. Első tudományos közleménye 1894-ben jelenik meg, ebben a mágnesezhetőséget még nagyobb frekvenciájú áramokkal vizsgálja.



Mivel tanárként nem igazán boldogul, más lehetőség után néz. Megpályáz egy kutatási ösztöndíjat, szerencsére a nyertes pályázó lemondja a lehetőséget, így ő utazhat Angliába. J. J. Thomson professzor munkatársa lesz a cambridge-i Cavendish Laboratóriumban. Felfedezi, hogy nagy frekvenciájú készüléke elektromágneses hullámok detektoraként is alkalmazható; addig fejleszti, amíg több száz méteres távolságot is elér a hatótávja (erre a munkára az sarkallta, hogy a hajók ködös időben nehezen érzékelték a világítótornyokat, más megoldás után kellett nézni). A sikeres kutatás ellenére a vezeték nélküli távírót végül Marconi valósítja meg, mivel Thomson, aki akkoriban fedezi fel az első szubatomi részecskét, az elektront, inkább más területen kívánja kamatoztatni munkatársa képességeit. Így aztán a gázok elektromos nagyfeszültség és röntgensugárzás hatására kialakuló elektromos vezetőképességét vizsgálja. Végül radioaktív elemeket is bevet, miután 1896-ban a jelenséget felfedezik. Figyelme ekkor fordul a radioaktív sugárzás megértésére. 1898-ban két, jól elkülönülő sugárzást azonosít: ezeket alfa- és a béta-sugárzásnak nevezi el. A béta-sugárzásról rövidesen kiderül, hogy nagy sebességű elektronok képezik. 1898-ban elfogadja a McGill University ajánlatát Montrealból. Itt szerez nemzetközi hírnevet, amikor munkatársaival felfedezik, hogy a radioaktív sugárzás akkor keletkezik, amikor bizonyos atomok spontán bomlanak kisebb tömegű elemek atomjaivá. A századforduló környékén már a Kanadai és az Angol Királyi Akadémia is tagjai között tudhatja, 1900-ban Új-Zélandra utazik, hogy feleségül vegye korábbi szállásadója lányát, Mary Georgina Newtont, akitől egyetlen lánya születik, Eileen. Ebben az időszakban még egyszer ellátogat hazájába, majd 1907-ben úgy dönt, hogy Angliába teszi át székhelyét, a manchesteri Victoria University munkatársaként. A radioaktív elemek természetes bomlása terén tett felfedezéseit 1908-ban kémiai Nobel-díjjal ismerik el.

Rutherford javasolja először, hogy a radioaktív elemek és bomlástermékeik relatív aránya alkalmas lehet kőzetek kormeghatározására, ezt a módszert a mai napig alkalmazzák a geológiában. Sikerül igazolnia, hogy az alfa-részecske a hélium atommagja, egyik asszisztensével, Hans Geigerrel elektronikai eszközt készít a részecskék detektálásához, később ebből fejlődik ki a Geiger–Müller-cső. További felfedezések sora következik: Marsdennel megfigyelik, ahogy az alfa-részecskék nemcsak, hogy szóródnak, de akár teljesen vissza is verődnek aranyfilmről. Ebből azt a következtetést vonja le, hogy az atomok szinte teljes tömege egy méretükhöz képest nagyon kis térrészben összpontosul – megszületik az atommag gondolata. Ez immár elévülhetetlen hírnevet szerez neki. Nagyszerű munkatársak kerülnek csoportjához, többek között Niels Bohr, aki Rutherford felfedezéseire és saját kvantumelméletére alapozva felállítja pontosabb atommodelljét. A háború alatt hangradart szabadalmaztat tengeralattjárók észlelésére, amelyet az Egyesült Államok haditengerészete is átvesz. Felemeli hangját a tehetséges fiatal kutatók frontszolgálata ellen. A háború után újabb óriási felfedezést tesz, tulajdonképpen a világ első sikeres alkimistája lesz: alfa-részecskékkel oxigénatomokat alakít nitrogénatomokká.

1919-ben a Cavendish Laboratórium igazgatójává nevezik ki, ahol a következő évtizedben nagyszerű kutatógárdát sorakoztat fel, igyekszik további kísérletekkel kiteljesíteni életművét. 1925-ben utoljára utazik hazájába, hogy meglátogassa beteg szüleit. Ekkor már ünnepelt híresség, mindenütt rendezvényekkel várják; ahol csak előadást tart, színültig telt termek fogadják. Nem kis részben az ő befolyásának köszönhető a New Zealand’s Department of Scientific and Industrial Research megalapítása. Öröm és tragédia egyszerre éri a családot a 30/31-es évek fordulóján: lánya röviddel negyedik gyermeke megszületése után meghal, épp mielőtt Rutherfordot nemesi rangra emelik, Baron Rutherford of Nelson néven (címerén kiwi, maori harcos és Hermész Triszmegisztosz látható). A következő év rendkívül gyümölcsöző, Chadwickkel felfedezik a neutront.

Cambridge-ben éri a halál, 1937. október 19-én, egy túl későn műtött köldöksérv szövődményeinek következtében. Hamvai a londoni Westminster-katedrálisban nyugszanak (felesége visszatért Christchurchbe, itt halt meg 1954-ben).

Rutherford nemcsak mint felfedező volt óriás, jelleme is azzá tette. Sosem tett különbséget híres és kezdő kutató között, képes volt másokra is átragasztani lelkesedését, nehéz helyzetű kollégáin gyakran segített. Nagylelkű volt, hagyta, hogy fiatal munkatársai önállóan tegyenek közzé általa kezdeményezett kutatásból született cikkeket. Emlékét többek között a periódusos rendszer 104. eleme őrzi, amelyet rutherfordiumnak neveztek el.

(Forrás: J. Campbell, „Rutherford, Ernest – Biography”, from the Dictionary of New Zealand Biography. Te Ara – the Encyclopedia of New Zealand, updated 1-Sep-10. http://www.TeAra.govt.nz/en/biographies/3r37/1)

FRIEDERICH WILHELM OSTWALD (1853. SZEPTEMBER 2.), FILOZÓFIA ÉS TUDOMÁNY MEZSGYÉJÉN. Gottfried Ostwald rigai kádármester és Elisabeth Leuckel második fia. Az iskolai tanulmányaival sokat szenved, főleg a humán tárgyakból, ugyanakkor a fizika és a kémia nagyon is érdekli. A Dorpati Egyetemen (ma Tartui Állami Egyetem, Észtországban) Carl Schmidttől sajátítja el a kémia tudományának fortélyait, főleg a laborokban, mivel előadásokra csak ritkán jár be. 1875-ben kandidátusi, ’76-ban mester-, ’78-ban pedig doktori fokozatot szerez. A Rigai Fizikai Intézetben kap asszisztensi állást, ahol az akkor még gyerekcipőben járó fizikai kémia tárgyát oktatja. Huszonhét évesen nősül, feleségétől, Helene von Reihertől két lánya és három fia születik. 1881-ben a Rigai Politechnikum tanárává nevezik ki, kiváló előadásai népszerűvé teszik a kémiát a hallgatók körében. (Az ekkoriban írt általános kémiai tankönyve a fizikai kémia egyik alapművének számít.)

A 19. század második felében a kémia fő irányvonalát a szerves szintézisek jelentik. A kutatókat főleg az foglalkoztatja, hogy miből milyen terméket lehet létrehozni. Ostwald felismeri a kémia általános alapelveinek, például a szelektivitásért felelős tényezőknek a tisztázatlanságát. Arra törekszik, hogy az általa vizsgált rendszereket megzavarásuk nélkül, pusztán fizikai mérésekkel, és azok matematikai értelmezésével írja le. Éppen ezért különösebb beavatkozást nem igénylő módon, a térfogat, a törésmutató és az elektromos vezetőképesség mérésével tanulmányozza savak és bázisok reakcióit, melynek során számos fizikai módszert honosít meg a kémiában. Ezzel tulajdonképpen a három nagy egyikeként (van’t Hoff, Arrhenius és Ostwald) lefekteti egy új, modern tudományág, a fizikai kémia alapjait. 1884-ben bírálatra kapja Svante Arrhenius doktori téziseit, aki a savak, bázisok és sók oldódását ionos disszociációjukkal írja le. Ostwald felismeri az elmélet jelentőségét, Arrheniust Rigába hívja, hogy itt dolgozzák ki az elektrolitok disszociációs elméletét, vagyis a ma ismert Arrhenius–Ostwald-féle sav-bázis elméletet (és később az Otwald-féle hígítási törvényt).

A Lipcsei Egyetem 1887-ben meghívja a fizikai kémia professzorának. Itt alapítja meg a Zeitschrift für physikalische Chemie című folyóiratot, amely évtizedekig a tudományág mérvadó nemzetközi fóruma. 1906-os nyugdíjba vonulásáig itt tanít, ír, szervez és kutat. A világ minden tájáról vonzza a posztdoktori munkatársakat, akik közül később legalább 60 lesz maga is a fizikai kémia professzora. Legfontosabb felismeréseit az elektrokémia és a katalízis területén teszi. Utóbbiak jóval korábbi munkáira vezethetők vissza, amikor még (termodinamikai szempontból tévesen) a reakciók sebességét a kémiai aktivitás mércéjeként tekinti. Ennek kapcsán a reakciók időbeliségét vizsgálja. Felismeri, hogy a reakciók meggyorsítására képes anyagoknak (vagyis a katalizátoroknak) nincs hatása a kémiai egyensúlyokra. A katalízist megkülönbözteti az iniciációtól és az autokatalízistől; 1894-ben elsőként írja le a katalizátor korszerű definícióját. Az alkalmazott kémia területén elért legjelentősebb eredménye is a katalízishez köthető: eljárást szabadalmaztat ammónia salétromsavvá történő oxidációjára, amely a műtrágyagyártás egyik alapvető eljárása lesz.

Az 1880-as évek végére Ostwald érdeklődése kiterjed a tudomány kulturális és filozófiai vonatkozásaira, 1889-től kezdi kiadni „Az egzakt tudományok klasszikusai” című kötetsorozatot, amelyben összefoglalja és elemzi a fizika és a kémia addigi legfontosabb eredményeit. Főként azt boncolgatja, hogy melyek a tudományos haladás törvényszerűségei, a tudományos kreativitás feltételei és milyen a nagy tudósok pszichikuma. Az 1904/05-ös tanévben erről a Harvardon tart előadás-sorozatot, az első meghívott külföldi vendégprofesszorként. Viszonylag korán, 1906-ban nyugdíjba vonul, így már nem a Lipcsei Egyetem professzora, amikor átveszi az 1909-es kémiai Nobel-díjat, amelyet a katalízis, a kémiai egyensúly és a reakciósebességek terén végzett kutatásaival érdemel ki. Nyugdíjas éveiben aktivitása nem csökken, vidéki birtokára visszavonulva önálló labort és könyvtárat épít fel.

Élete során sajátos tudományos filozófiát alakít ki. Ennek lényege az „energizmus”, vagyis az energia elsőbbsége az anyaggal szemben. Szerinte az anyag csupán az energia egyfajta materializálódása. Ennek megfelelően élesen támadja az atomelméletet Boltzmann-nal szemben; majd’ 15 évbe telik, mire belátja annak helyességét. Filozófiájának másik pillére a pozitivizmus: minden olyan elméletet tagad, amely nem áll szilárd empirikus alapokon. Az energizmust az élet minden területére kiterjeszti. Alapelve: „Ne pazarold az energiát – használd!” Mivel a háborút és a vallást az energia pazarlásának tekinti, szervezett formában is fellép ellenük: a nemzetközi békemozgalom tagja, a Monista Szövetség (német egyházellenes intézmény) harcos antiklerikális egyénisége. Síkra száll az oktatás és a tudományos intézmények megreformálásért, részt vesz az ido műnyelv, az eszperantó továbbfejlesztett változatának kidolgozásában.

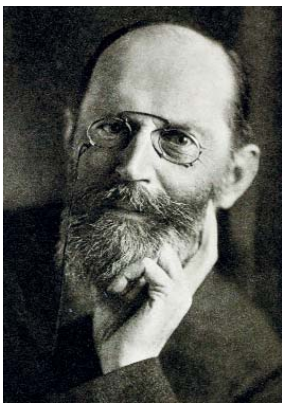
Élete alkonyán érdeklődése a színelmélet, és régi kedvtelése, a festészet irányába fordul. Célja a színek mérésére szolgáló eszközök kifejlesztése, a színharmónia matematikai leírása.

Rövid betegség után, 78 évesen távozik az élők sorából. 45 könyv, 500 tudományos cikk, 5000 bírálat, 6 folyóirat szerkesztése és 10000 levél tanúskodik rendkívüli zsenijéről.

(Forrás: J. Schummer, *Biography of Wilhelm Ostwald* 2001, http://www.joachimschummer.net/publications.html)

Periódusos kalendárium

A 114-es és 116-os rendszámú elemekkel júniusban hivatalosan is bővült a periódusos rendszer. A 114-es flerovium a dubnai Flerov-laboratóriumról kapta a nevét. Georgij Nyikolajevics Flerov (1913–1990) neves fizikus, az urán spontán maghasadásának egyik felfedezője volt; 1957-ben ő alapította a később róla elnevezett laboratóriumot. A 116-os livermórium az 1952 óta működő kaliforniai Lawrence Livermore Nemzeti Laboratórium nevét őrzi ezentúl.



Ménes András
Szent István Egyetem

Százhatvan éve született Emil Fischer

Emil Hermann Fischer 1852. október 9-én született a poroszországi Euskirchenben. Laurenz Fischernek, egy jómódú kereskedőnek és Julie Poensgennek a fia. Rendkívül tehetséges diák volt, 1869-ben kitüntetéssel érettségizett a bonni gimnáziumban. Apja azt remélte, hogy fia üzletember lesz, Emil azonban másként döntött, beiratkozott a Bonni Egyetemre. Ott August Kekulé előadásait hallgatta, de elbizonytalanította a nagy kémikus laboratóriumi munkával szembeni közömbössége. 1872-ben átment a Strasbourgi Egyetemre, ahol a neves Adolf Baeyer ismét felébresztette benne az érdeklődést a kémia iránt. 1874-ben doktorált, disszertációja a festékek kémiájával foglalkozott. Megírása után Strasbourgban maradt Baeyer tanársegédjeként.

Fischer aktív résztvevője a németországi kémiai kutatás nagymértékű fejlődésének. Ez a kutatás hajtotta a gyorsan felvirágzó gazdaság robbanásszerű ipari fejlődését. Fischer legfontosabb felfedezése a fenil-hidrazin, amely híressé tette még doktorátusának megszerzése előtt. Később rájött, hogy ez hasznos vegyszer: el lehet vele választani azokat a cukrokat, amelyeknek ugyanolyan a képletük, de más a szerkezetük.

Fischert 1879-ben meghívták a müncheni egyetemre, majd három év múlva átment az erlangeni egyetemre, ahol fontos, hosszú távú kutatásokat végzett a húgysavval és a vele összefüggő vegyületekkel. A húgysav széles elterjedése a természetben valamilyen addig ismeretlen jelentőségre utalt. 1882-ben Fischer nekilátott, hogy létrehozza a vegyületek családját. Munkája eleinte csak még nagyobb zavart keltett, de 1897-ben rájött, hogy a húgysav és számos más vegyi anyag alapját egy egyszerű molekula képezi. Ezt a bázist purinnak nevezte el, a nevet a latin purum és uricum szavakból rakta össze. A purinok közé tartozik a guanin és az adenin, a két nitrogénalapú nukleinsav. Foszfátos cukrokba burkoltan ezek a molekulák alkotják két másik nukleinsavval együtt a DNS gerincét.

Fischer egyes szintetikus vegyületeinek fontossága nem kerülte el a német gyógyszeripar figyelmét. A koffeint először Fischer laboratóriumában szintetizálták, majd nagy mennyiségben gyártani kezdték. Még fontosabb volt a születő gyógyszeripar szempontjából, hogy Fischer szintetizálta a barbiturátokat. Erre gyorsan felfigyeltek az orvosok és a pszichiáterek, akik arra használták a vegyületeket, hogy szorongó pácienseiket megnyugtassák, mivel hatékonyabbak voltak a klór-hidrátnál vagy a brómvegyületeknél. A barbiturátokat az állatkísérletekben is felhasználták érzéstelenítőnek. A fenilből, amelyet Fischer 1912-ben fedezett fel, állították elő a fenobarbitalt, azt a vegyszert, amelynek a szívroham kezelésében van nagy jelentősége, és még ma is alkalmazzák epilepszia ellen. Nem meglepő, hogy Fischert körüludvarolta az ipar, de ő mindig visszautasította a felkéréseket.

Az 1890-es években hosszú távú kutatásba kezdett az enzimekkel kapcsolatban. Ezek a fehérjék katalizátorként viselkednek a biokémiai reakciókban. Felismerve, hogy a különböző enzimeknek különböző feladataik vannak, azt állította, és ebben tulajdonképpen nem tévedett, hogy aszimmetrikus molekulák, amelyek csupán bizonyos anyagokkal lépnek kapcsolatba. Ez a kulcs-zár megközelítés lett az enzimkémia alapja.

Enzimekkel folytatott munkásságának egyik következményeként Fischer tanulmányozni kezdte a szénhidrátokat. Legnagyobb sikereit egyik bomlástermékükkel, a cukrokkal kapcsolatban érte el. Noha egy ideje számos cukor összetevőit ismerték, a különböző formák rejtélyesek maradtak, nem lehetett szétválasztani őket szirupos állagukból. Fischer helyesen feltételezte, hogy a glükóz, fruktóz, mannóz különbsége – ezek az anyagok szerkezetükben azonosak, de tulajdonságaik eltérőek – aszimmetrikus szénatomjaikból következik. 1897-re mindhárom cukrot létre tudta hozni laboratóriumában. A cukrok és purinvázas vegyületek szintézise terén végzett munkásságáért Fischer 1902-ben megkapta a kémiai Nobel-díjat.

Noha alapjában nem volt elméleti szakember, pontos fogalmai voltak arról, milyen lehetőségek rejlenek a biokémiában. „A fátyol, amely mögött a Természet elrejtette titkait, ott emelkedett fel, ahol a szénhidrátok vannak” – mondta a Nobel-díj átvételekor tartott beszédében, és hozzátette: „Mindazonáltal az élet kémiai rejtélyét nem oldhatja meg a szerves vegyipar, amíg nem lesz úr egy másik, sokkal bonyolultabb anyag, a fehérje fölött.”

Fischer utolsó felfedezései csakugyan a fehérjekémiához fűződnek. Azt addig is tudták, hogy a fehérjék aminosavakból állnak, és hidrolízissel lehet lebontani őket. Fischer nem is remélhette, hogy egy olyan bonyolult anyagot szintetizálhat, mint a fehérje, de sikerült felépítenie egy peptidet. 1914-ben létrehozta az első szintetikus nukleotidot. A peptidkémiáról két évvel később írt összegzése azzal biztatja az olvasókat, hogy az egész terület megismerhető. Ennek a munkának az eredményeként rájött, hogy a fehérjék különböző alakja határozza meg funkciójukat, a formát pedig az aminosav-szekvenciák szabják meg. Csakugyan, a DNS legfontosabb feladata, hogy fehérjéket építsen fel az aminosavak segítségével. Fischer munkásságának előremutató jellege világosan kitűnik abból, hogy 1953-ban sikerült először Frederick Sangernek meghatároznia egy fehérje, az inzulin nevű hormon teljes aminosav-szekvenciáját.

Fischer legidősebb fia, Hermann Fischer maga is neves szerves kémikus lett. Emil Fischer felesége, Agnes Gerlach még két fiúnak adott életet, mindkettő elesett az első világháborúban. Fischer munkáját továbbfejlesztve találták fel a vajpótló margarint. Mivel sok éven át dolgozott higannyal és maró fenil-hidrazinnal, bőrbetegség és emésztési rendellenességek kínozták. 1919. július 15-én önkezével vetett véget életének.

TÚL A KÉMIÁN

Ötzi-szekvencia

Az Ötzauer-Alpokban 1991-ben talált nevezetes természetes múmia, Ötzi már sok-sok tudományos vizsgálat tárgya volt. Az egyik legújabb kísérletsorozatban az 5300 éve élt férfi genomját sikerült szekvenálni. Ebből kiderült, hogy Ötzi a 0+ vércsoportba tartozott, barna szeme volt, hajlamos volt a keringési megbetegedésekre és valószínűleg a Lyme-kórt is hordozta. Nem utolsósorban: valószínűleg laktóz-intoleranciában szenvedett. Az emlősök többségétől eltérően a modern emberek jelentős részének a szervezete termel laktáz enzimet, amelynek génje mintegy 7000 éve jelenhetett meg, minden bizonnyal az állatok háziasításával összefüggésben, de úgy tűnik, a kissé fiatalabb hegyi ősemberben ennek a génnek még nincs nyoma. Arra is fény derült az elemzésből, hogy Ötzinek közös ősei lehettek a Tirrén-tenger környékének mai lakóival.

Nature Commun. 3, 698. (2012)

Időzített immunitás

Az élő szervezetek belső órája többek között a kórokozókkal szembeni ellenálló képességet is befolyásolja. Ezt bizonyították be amerikai tudósok, akik a jelenség molekuláris szintű magyarázatát is megtalálták: a TLR–9 (Toll-like receptor 9) az emlősök immunrendszerének első vonalában teljesít szolgálatot a fertőzések detektálásában; az ehhez kötődő gén kifejeződésének vizsgálata azt igazolta, hogy az ébrenlét óráiban a folyamat sokkal intenzívebb, mint alvás közben, ezért aztán alvás közben a fertőzések könnyebben találnak utat a szervezetbe, sőt még a védőoltások is hatékonyabbak a nap bizonyos szakában.

Immunity 36, 251. (2012)

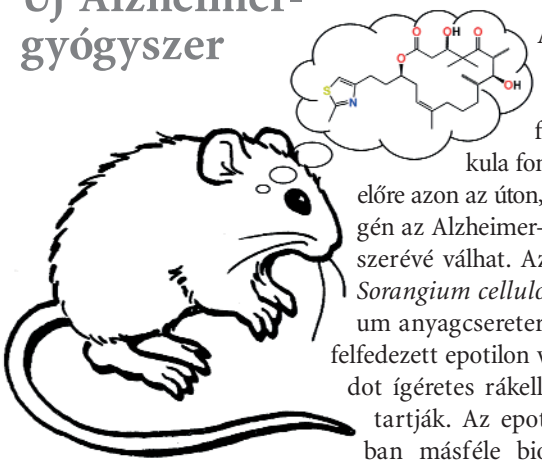
Ha észrevétele vagy ötlete van ehhez a rovathoz, írjon e-mailt Lente Gábor rovatszerkesztőnek: lenteg@dragon.klte.hu.

CENTENÁRIUM

Wilder D. Bancroft: The Electrochemistry of Light, X
Journal of Physical Chemistry, Vol. 17, pp. 596–602 (1912. szeptember)

Wilder Dwight Bancroft (1867–1953) amerikai fizikai kémikus volt. Doktori fokozatát Lipcsében szerezte, Ostwalddal és van't Hoff-fal dolgozott együtt, majd Amerikába visszatérve a Cornell Egyetemen lett professzor. Nevét az emulziók stabilitására vonatkozó Bancroft-szabály és a Holdon lévő Bancroft-kráter őrzi.

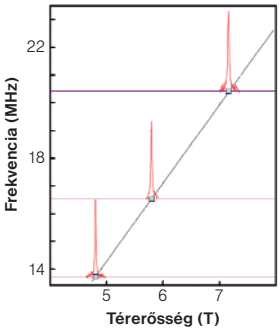
Új Alzheimer-gyógyszer



Az epotilon-D nevű, természetben előforduló molekula fontos lépést tett előre azon az úton, amelynek végén az Alzheimer-kór új gyógyszerévé válhat. Az eredetileg a *Sorangium cellulosum* baktérium anyagcseretermékei között felfedezett epotilon vegyületcsaládot ígéretes rákellenes szernek tartják. Az epotilon-D azonban másféle bioaktivitást is mutat. Egy kísérletsorozatban három hónapig kezeltek vele olyan egereket, amelyek agyában a tau-protein aggregációja már előrehaladott stádiumban volt. A hatás rendkívül látványos: a beteg egerek agyfunkciói jelentősen javultak, sőt, az agyban felhalmozódó tau-aggregátumok mennyisége is csökkent. Ezért reményteljes, hogy a szer beteg embereken is hasonló hatást fejt majd ki.

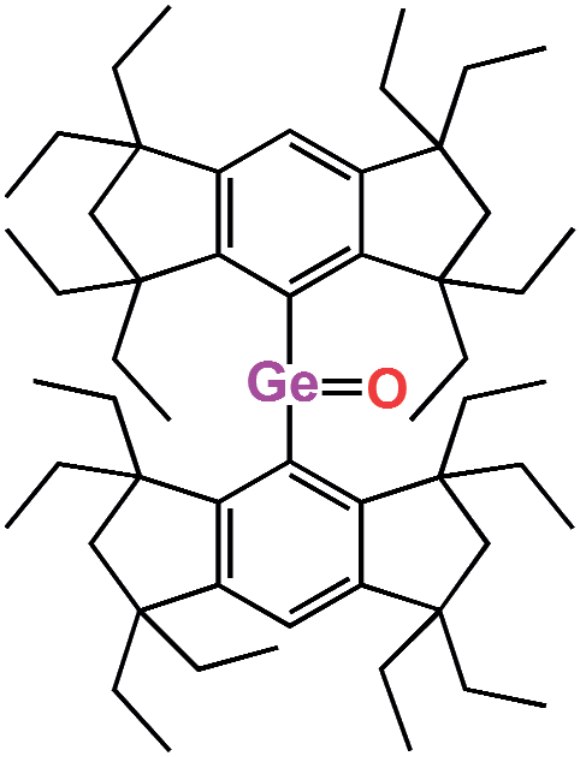
J. Neurosci. 32, 3601. (2012)

Plutónium-NMR



A plutónium–239 viszonylag gyakori radioaktív izotópnak számít. Azt már régóta tudják, hogy magspinje 1/2, így feltehetően alkalmas NMR-mérések elvégzésére. Fáradságos, fél évszázada kezdett kutatás eredményeként Los Alamosban dolgozó kutatóknak végre sikerült is megtalálniuk a rezonanciajelet. A fő nehézséget a párosítatlan elektronok és az atommag spinjének csatolása révén létrejövő gyors relaxáció okozta. A közelmúltban nagyon alacsony hőmérsékleten, 4 K-re hűtött $^{239}PuO_2$ mintákban szilárdtest-NMR-rel végre sikerült a jelet detektálni; a giromágneses együtthatóra 2,856 MHz/T értéket mértek. A sikeres kísérletek ellenére sem valószínű, hogy a plutónium–239 NMR elterjed, mert a relaxáció a legtöbb kémiai környezetben még 4 K-en is igen gyors.

Science 336, 901. (2012)



A HÓNAP MOLEKULÁJA

Az ábrán lévő stabil germanon ($C_{56}H_{90}GeO$) a széncsoport nehezebb elemeit tartalmazó ketonanalógok csoportjának első tagja. Ilyen molekulákat már egy évszázada próbálnak szintetizálni. A vegyületben az elméletileg becsült Ge–O kötésrend mindössze 1,25. A jelentős sztérikus gátlás ellenére a molekula elég reaktív: vízzel diolt, szén-dioxiddal pedig ciklikus karbonátot képez.

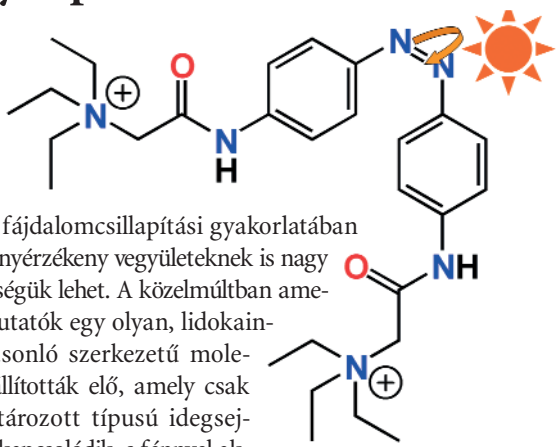
Nat. Chem. 4, 361. (2012)

Ugató tallium-toxikológiai kísérlet

Pénelopé, egy kaliforniai állatorvos egyéves németjuhász kutyája egy balszerencsés torkoskodás után maga is kísérleti alannyá vált. Az eb titokban körülbelül 20 darab agaralapú *Mycoplasma*-tenyésztő lemezt fogyasztott el, amelyek talliumot is jelentős mennyiségben tartalmaztak (a kutyára számítva kb. 5 mg tallium-acetát testsúlykilogrammonként). Pénelopén hamarosan ki is alakultak a mérgezés jelei, és egy héten belül elkezdett hullani a szőre. A betegség tünetei nagyjából egy éven keresztül jelentkeztek, 10 hónapig a kutya ugatni sem tudott. Az állatorvosok viszont a gyakori vizsgálatok révén sok újat tudtak meg a talliummérgezés lefolyásáról, amelyekből óvatosan ugyan, de emberi esetekre is lehet hasznos következtetéseket levonni. Hála a hozzáértő kezelésnek, Pénelopé a hosszú lábadozás után teljesen felépült a kalandból.

J. Veter. Diagn. Invest. 24, 227. (2012)

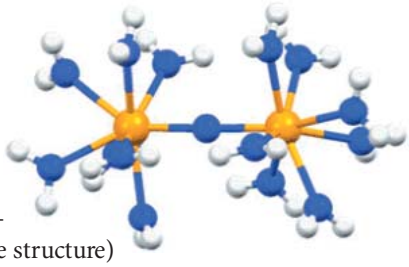
Fájdalomcsillapítás fénykapcsolással



A jövő fájdalomcsillapítási gyakorlatában akár fényérzékeny vegyületeknek is nagy jelentőségük lehet. A közelmúltban amerikai kutatók egy olyan, lidokainhoz hasonló szerkezetű molekulát állítottak elő, amely csak meghatározott típusú idegsejtekhez kapcsolódik, s fénnyel aktiválható. Az aktiválási folyamat egy N=N kettős kötés körüli *cisz-transz* izomerizáció, amely 380 nm-es hullámhosszú fénnyel a *cisz*-, 500 nm-es hullámhosszú fénnyel az élettanilag hatásos *transz*-izomer felé tolható el. Megfelelő száloptikák segítségével helyi érzéstelenítésként akár a szervezet belsejében is működhet ilyen elven a gyógyszer.

Nature Meth. 9, 396. (2012)

Cérium-dimer



Japán és német tudósok egy jól ismert oldatban mutattak ki váratlan jelenséget: EXAFS (extended X-ray absorption fine structure) méréseik szerint cérium(IV)ionokat tartalmazó vizes oldatokban a domináns fémtartalmú részecske nem a monomer, hanem az oxohidas dimer. A különböző cériumsókat manapság fotokémiai vízbontást végző rendszerekben nagyon gyakran használják, így ezen folyamatok mechanizmuskutatása szempontjából elsőrendű fontosságú az akvakomplexek összetétele. Egy Japánban lévő szinkrotron segítségével végzett mérések szerint 2 mol/dm^3 koncentrációban perklórsavat tartalmazó cérium(IV)oldatokban a kb. 180 pm-es Ce–O távolság mellett 370 pm-es Ce–Ce távolság is kimutatható. Kvantummechanikai számolások szerint ennek leginkább egy oxohidas cérium(IV)dimer felel meg, amelynek képlete $[Ce_2(m_2\text{-}O)(H_2O)_{14}]^{6+}$. Cérium(III)oldatok nem mutattak hasonló tulajdonságokat, ott a mérések jól értelmezhetők voltak csupán az egymagvú akvakomplexek feltételezésével.

Dalton Trans. 41, 7190. (2012)

APRÓSÁG

A Curiosity leszállóegység a Marson minden kémiai analízis során talál majd teflonnyomokat, mert egy kisebb tervezési hiba miatt saját alkatrészeinek anyagával szennyezi a vett mintákat.

TUDOMÁNYOS ÉLET

46. Komplexkémiai Kollokvium

2012. május 21-23. között került sor a 46. Komplexkémiai Kollokviumra, a MKE Komplexkémiai Szakcsoportjának és az MTA Koordinációs Kémiai Munkabizottságának közös rendezvényére. A rendezvénynek a Mátrafüredi Akadémiai Üdülő adott otthont, biztosítva a csendes, nyugodt, kellemes környezetet. A sokéves hagyományokkal rendelkező konferencián új színfoltot jelentett, hogy a program egyúttal magában foglalta a Debreceni Egyetem Kutatóegyetemi Program Molekulatudományi Alprogramjának értékelő konferenciáját is.

A konferencia 78 kutató részvételével zajlott le, a legnagyobb létszámmal a Debreceni Egyetem és a Szegedi Tudományegyetem képviseltette magát, de a Pannon Egyetem és az MTA TTK Molekuláris Farmakológiai Intézet kutatói is részt vettek a konferencián. Emellett három külföldi vendég, Maurizio Peruzzini, az ICCOM-CNR (Firenze, Olaszország), Bernhard Lippert, a Technical University Dortmund (Dortmund, Németország) és Mladen Biruš, a University of Zagreb (Zágráb, Horvátország) kiemelkedő tudósa is figyelemmel kísérte az előadásokat.

11 szekcióban összesen 49 előadás hangzott el magyar és angol nyelven, ezek közül 4 az MTA Koordinációs Kémiai Munkabizottsági ülésének részeként. A munkabizottsági ülés keretében Speier Gábor professzor a COST program működését, míg Kiss Tamás professzor a Szegedi Tudományegyetemen működő akadémiai kutatócsoportban – a Bioszervetlen Kémiai Kutatócsoportban – folyó kutatásokat mutatta be.

A kollokvium a hagyományokhoz híven lehetőséget adott a tudományos életbe most bekapcsolódó fiatalok bemutatkozására, eredményeik összefoglalására; emellett a tudományterületükön már sok tapasztalattal rendelkező munkatársaktól is számos előadást hallhattunk. Az előadásokban a koordinációs kémia szerteágazó területein született eredményeket ismerhettünk meg: előadások hangzottak el a különböző fém-katalizált szerves szintetikus reakciókról, a molekuláris biológia koordinációs kémiai vonatkozásairól, a neurodegeneratív betegségekben szerepet játszó fehérjék, illetve a SOD és kataláz enzimek réz-, mangán-, vas-, nikkel- és kobalttartalmú modellkomplexeinek előállításáról és vizsgálatáról, a tumorellenes szerek kifejlesztésében szerepet játszó ruténium-, irídium- és galliumkomplexek szintézisében és oldategyensúlyi vizsgálatában elért eredményekről, az orvosi diagnosztikában alkalmazott vagy alkalmazható mangán-, kalcium- és gadolíniumkomplexek egyensúlyi és kinetikai vizsgálatáról, a napenergia cériumtartalmú fotokatalizátorokkal való hasznosítási lehetőségeiről; több előadásban számoltak be a Debreceni Egyetem Homogén Katalízis és Reakciómechanizmus Kutatócsoportjának tagjai az ott folyó kutatásokról, így például a különböző ruténium-, irídium- és palládiumkomplexek katalitikus aktivitásának vizsgálatáról, valamint a lézeres villanófény-fotolízis alkalmazási lehetőségeiről a reakciómechanizmus-kutatásokban.

A 46. Komplexkémiai Kollokviumon elhangzott számos színvonalas előadás és a jelenlevők aktív részvétele az egyes szekciókon bizonyította, hogy ennek az évenként megrendezésre kerülő konferenciának fontos helye van a magyar kémiai tudományos életben, jó lehetőséget biztosít a koordinációs kémia különböző területein született eredmények bemutatására, megvitatására és a fiatal kutatóknak a tudományos vérkeringésbe való bekapcsolására.

A résztvevők véleménye azt mutatta, hogy a 46. Komplexkémiai Kollokvium mind a magyar, mind a külföldi vendégeknek színvonalas szakmai programot és esténként kellemes kikapcsolódást jelentett. Jövőre is szeretettel várunk minden régi és új résztvevőt a 47. Komplexkémiai Kollokviumra.

Várnagy Katalin, Ősz Katalin

FELHÍVÁS

2012. október 29-31.
között kerül megrendezésre Szegeden
a **XXXV. Kémiai Előadói Napok**

Az MKE hagyományos rendezvényére fiatal szakemberek, kutatók, hallgatók és **PhD-hallgatók** jelentkezését várjuk a kémia bármely területét érintő kutatási és fejlesztési munkákkal. A sokéves hagyománynak megfelelően a konferencián kerülnek átadásra a Magyar Kémikusok Egyesületének Nívódíjai is. Az előadások alapját képező anyagok a konferenciát kísérő kiadvány formájában, nyomtatásban is megjelennek.

A konferenciára történő jelentkezés és az előadás-összefoglalók leadásának határideje **2012. október 1**. A korábbi évek tapasztalatai alapján maximum 80 előadó jelentkezését tudjuk elfogadni, akik kiválasztása a jelentkezés sorrendjében történik majd. A konferencián való részvétel **ingyenes.** A rendezvénnyel és a jelentkezéssel kapcsolatos részletes információkat (jelentkezési lap, az összefoglalók elkészítéséhez szükséges útmutatók, szállásinformációk stb.) mellékelten küldjük, illetve az MKE Csongrád Megyei Csoport honlapja (www.mke-szeged.hu) tartalmazza majd. További információt kérhet e-mailben (endrodib@chem.u-szeged.hu, tárgy: KEN2012), valamint a következő postacímen: Endrődi Balázs, SZTE Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék, 6720 Szeged, Aradi Vértanúk tere 1.

Az MKE Csongrád Megyei Csoportja nevében várjuk jelentkezését.

A szervezők

Középiskolai diák vagy? Érdekel a kémia? Gondoltál már arra, hogyan hasznosíthatod további tanulmányaidban, munkád során? Ha igen, Neked szól a következő pályázati felhívás.

A Vegyész Alapítvány pályázatot hirdet középiskolai tanulók számára a kémia mint tudomány és a vegyipar mint gazdasági és társadalmi tényező elfogadottságának témakörében.

A pályázat célja egy olyan, maximum 15 A/4 oldal terjedelmű dolgozat készítése *A kémia és a vegyipar szerepe a ma és a jövő társadalmának alakításában* címmel, amely bemutatja a kémia, a vegyipar szerepét, jelentőségét a modern társadalom, életforma kialakulásában, és várható vagy elképzelhető szerepét a jövő társadalmi viszonyainak, életformájának további alakításában, az ebben rejlő lehetőségek, kihívások és veszélyek bemutatásával.

A pályázaton részt vehet minden középiskolai tanuló, függetlenül az iskola típusától, beleértve a határon túl élő diákokat is.

A pályázatot a következő címre kell beküldeni: kozpont@mavesz.hu és/vagy levélben: MAVESZ 1036 Budapest, Bécsi út 85.

A pályázaton fel kell tüntetni a pályázó nevét, lakcímét, a középiskola nevét és címét, és azt, hogy a beküldő melyik osztályba jár. Az e-mail tárgyában vagy a borítékon fel kell tüntetni: „PÁLYÁZAT”.

A pályázat díjazása: 1. díj: Samsung Galaxy 10.1 TAB, 2. díj: Acer Aspire ONE netbook, 3. díj: DPS E750 e-book olvasó.

A pályázat beküldésének határideje: **2012. november 10.**

A pályázatokat a Vegyész Alapítvány Kuratóriuma értékeli, és a nyerteseket 2012. december 11-ig írásban értesíti. A díjak átadására ezt követően, december hó folyamán kerül sor ünnepélyes keretek között.

A pályázattal kapcsolatosan felvilágosítás ad: Szikszay Gábor, e-mail: szikszay@mavesz.hu, telefon: 06 20 293 7460.

HIREK AZ IPARBÓL

Felavatták a gyógyszeripari innovációs központot Debrecenben

Az együttműködési képesség fontosságát hangsúlyozta Áder János köztársasági elnök 2012. július 25-én Debrecenben, amikor felavatta a város, a helyi iparkamara és a Richter Gedeon Nyrt. együttműködésével, 6 milliárd forintos beruházás eredményeként létrejött Pharmapolis Gyógyszeripari Tudományos Parkot.

A kooperáció képessége olyan európai érték, amiből itthon is jelentős eredmények születhetnek – mondta az államfő. Bogsch Erik, a Richter Gedeon Nyrt. vezérigazgatója hozzátette: a hatmilliárd forintból megvalósult, 50 százalékban az Új Széchenyi Terv keretében európai uniós forrásból finanszírozott beruházás a hazai gyógyszeripari kutatás-fejlesztésben érdekelt kis- és középvállalkozásoknak teremt világszínvonalú infrastrukturális hátteret.

A 10 500 négyzetméteres, korszerű kutatóbázist a bérlők előzetes igényeihez igazodva alakították ki, így olyan kutatás-fejlesztési és innovációs központ jött létre, amely megfelelő technológiával támogatja a gyógyszeripari ágazatban működő kkv-k egyedi és magas szintű igényeit, valamint technológiai inkubátor-szolgáltatások széles skáláját képes nyújtani. Az épületben a többi között 21. század követelményeinek megfelelően felszerelt kísérleti laboratóriumok, állatház, injekciós gyógyszerformákat fejlesztő laborterület, valamint irodahelyiségek és konferenciatermek kaptak helyet. A debreceni Pharmapolis Gyógyszeripari Tudományos Park 120 kutatónak biztosít munkahelyet.

A Suzuki, az Apple és a Richter példájára utalva Áder János kijelentette: a fejlődés valódi motorját nem a pénz, hanem az emberi gondolat jelenti. Az új tudományos park érdekes és izgalmas hellyé teszi Magyarországot Európa és a világ gyógyszerkutatói számára – fűzte tovább a gondolatot Áder János.

Kósa Lajos, Debrecen polgármestere közölte, hogy a város 25 százalékos tulajdonrésszel rendelkezik a Pharmapolis Gyógyszeripari Tudományos Parkban. Ugyanakkor Debrecen nem kíván gyógyszereket fejleszteni, de kötelességének érzi, hogy támogasson minden ígéretes helyi vállalkozást. Így teszi most is mindaddig, amíg a tudományos park „a Richter vezetésével a saját lábára áll".

Miklóssy Ferenc, a Hajdú-Bihar Megyei Kereskedelmi és Iparkamara elnöke „példamutató együttműködés eredményének" nevezte a beruházást, megjegyezve: a kamara támogatja, hogy egy nagyvállalat összefogja a kisebbeket és lehetőséget teremtsen a számukra.

A parkba olyan vállalkozások települnek majd, amelyek további vállalkozásokkal, felsőoktatási intézményekkel, akadémiai kutatóintézetekkel együttműködve képesek magas hozzáadott értékű, export- és piacképes új, vagy továbbfejlesztett termékek előállítására, technológiák kidolgozására, piacra való bevezetésére.

A „science park" leendő vállalatai a Richter Gedeon Nyrt. kivételével jellemzően a magyar gyógyszerkutatás területén működő kis- és középvállalkozások, amelyek tevékenységük során nem elsősorban meglévő termékeiket, eljárásaikat tervezik továbbfejleszteni, hanem teljesen új K+F+I tevékenységet végeznek, ami által új piacképes termékeket, szolgáltatásokat, technológiákat hoznak létre. *(A ProfitLine nyomán)*

Zékány András

Közzétette a Richter az I. féléves jelentését

A Csoport árbevétele 2012 első félévében 166 018 MFt-ot (562,4 M€-t) tett ki, amely 13,8%-os (euróban mérve 3,7%-os) emelkedést jelent 2011 azonos időszakához viszonyítva. A Csoport számos kiemelt régióban növekedést tudott elérni.

Magyarországon 2012 első félévében 17 114 MFt (58,0 M€) árbevételt realizáltunk, amely 10,8%-os (euróban 18,7%-os) csökkenést jelent a tavalyi év hasonló időszaka során elért forgalomhoz képest. Az elmúlt két évben bevezetett készítmények forgalma nem tudta ellensúlyozni a 2011-es év során bevezetett piacszabályozási intézkedések hatásait. A Magyarországon kívüli piacokról származó árbevétel 2012 első félévében 504,4 M€ volt, ami 33,5 M€-s, azaz 7,1%-os növekedés a bázis időszakhoz képest. A FÁK-tagállamokban 14,6%-os (dollárban kifejezve 5,6%-os) növekedés mellett 248,3 M€ (321,9 M$) árbevételt realizáltunk a vizsgált időszakban. Oroszországban 2012 első félévében rubelben számítva mérsékelt, 6,2%-os növekedést értünk el. Dollárban mérve jelentősen, 22,7%-kal (euróban 33,3%-kal) emelkedett árbevételünk Ukrajnában, jelentős részben az első negyedévben teljesített előszállítások eredményeképpen, míg az egyéb FÁK tagköztársaságokban 28,7%-os növekedést tudtunk elérni.

2012 első félévében a nagy- és kiskereskedelem árbevétele emelkedett ebben a régióban. Az Európai Unió országaiba irányuló eladások euróban kifejezve 6,3%-kal nőttek, elsősorban az EU9 régióban, de az EU15 régióban és Lengyelországban is magas egy számjegyű növekedést könyvelhettünk el. A Grünenthaltól megvásárolt fogamzásgátló portfólió jó teljesítményt nyújtott a régióban. A 2011-es év első hat hónapjával összehasonlítva a romániai nagy- és kiskereskedelmi üzleti szegmens árbevétele is tovább emelkedett. Az USA régió értékesítése dollárban számítva 34,1%-kal csökkent, az „Egyéb országok" régióban 2012 első félévében a forgalom euróban kifejezve 1,6%-kal mérséklődött.

A pénzügyi tevékenység eredménye 2012 első félévében 2390 MFt (8,6 M€) növekedés után 743 MFt (2,5 M€) nyereség volt, szemben a 2011 azonos időszakában elért 1647 MFt (6,1 M€) veszteséggel.

N. G.

Vegyipari mozaik

Hétmilliárd forintból épült a pécsi egyetem új kutatóközpontja. Befejeződött a Pécsi Tudományegyetem (PTE) új termé-

szettudományi kutatóközpontjának építése, és már folyamatban van az intézmény laboratóriumainak berendezése. A mintegy hétmilliárd forintos beruházás európai uniós támogatással valósult meg. A Dél-dunántúli Régióban évtizedes hiányt pótló, nemzetközi színvonalú műszerparkkal felszerelt kutatóközpontot korszerű nemzetközi tudományszervezési és menedzsmentnormák alapján alakították ki. Az intézmény együttműködik vállalatokkal, rugalmasan reagál a kutatási trendekre, a tudásalapú gazdaság igényeire, működésével pedig hozzájárulhat ahhoz is, hogy a PTE elnyerje a kutatóegyetemi címet. A ma még Science Buildingnek nevezett, de októbertől már Szentágothai János agykutató nevét viselő kutatóközpont alapkövét 2009. szeptember 1-jén, az egyetem alapításának évfordulóján helyezték el Pécsett az egyetemi szívcentrummal szemközti területen. A szeptemberben megnyíló mintegy 7 ezer négyzetméteres intézmény Bachman Zoltán Kossuth-díjas építész tervei szerint épült, és 200 munkahelyet, azon belül 40 kutatói állást teremt.

Az egyetem szeretné, ha a központ Európa meghatározó kutatóintézményévé válna. A magas színvonalú infrastruktúra, a nemzetközi viszonylatban is professzionális munkakörülmények lehetővé teszik a nagy nemzetközi pályázatokon való részvételt, a hallgatók elsőrangú oktatását, A központban folyó tevékenység nyomán növekedhet a kutatási megbízások volumene, az elért eredmények pedig pozitív hatással lesznek a képzés színvonalára, valamint a kutatói mobilitásra. További előny, hogy az új kutatóközpont gátolja az agyelszívást, több jövőbeni munkatársa külföldről tér vissza, vagy terveivel ellentétben Magyarországon marad, hogy itt dolgozhasson. Nemcsak az épületben folyó munka, hanem maga a központ is érdekes: a három kocka alakú iroda- és laborépületet két átjáró köti össze, a létesítményegyüttes energiaigényét nagyrészt geotermikus és napenergiából fedezik. *(MTI)*

A gyógyszerkutatás nagyjai az Akadémián. Harmincnyolc országból közel kétszázhetven résztvevő érkezett arra a nemzetközi gyógyszerkutatási konferenciára, amelynek immár harmadik alkalommal adott otthont a Magyar Tudományos Akadémia. A rangos esemény szervezésében az MTA Kémiai és Orvosi Tudományok Osztálya mellett az Akadémia Gyógyszerésztudományi Állandó Bizottsága, a Magyar Elválasztástudományi Társaság, az Európai Gyógyszerésztudományi Szövetség, az Amerikai Gyógyszerésztudományi Társaság, valamint a Nemzetközi Gyógyszerésztudományi Szövetség is részt vállalt.

Az MTA elnöke rámutatott, a gyógyszerfejlesztés az egész világon az egyik vezető iparág, amely Magyarországon is komoly hagyományokkal büszkélkedhet.

A *3rd Regulatory Workshop on A to Z on Bioequivalence, Bioanalysis, Dissolution, and Biosimilarity* címmel június 4–6. között megrendezett kongresszus egyedülálló találkozási lehetőséget teremtett a résztvevők számára az originális és generikus gyógyszerfejlesztés vezető kutatóival. Az átfogó előadások felölelték a különböző típusú bioekvivalenciai, bioanalitikai, in vitro kioldódási, étel-interakciós, továbbá biotechnológiai és „biohasonlósági" vizsgálatok lehetőségeit és előírásait, valamint a hozzájuk kapcsolódó klinikai vizsgálatok követelményeit. A workshop témái közül kiemelkedő jelentőségű volt a biotechnológia területe és a „bioszimiláris" készítmények kutatása, egészségügyi hatósági szabályozása, valamint az új gyógyszer-technológiai lehetőségek keresése.

„A magyar gyógyszerkutatás eredményeinek elismerése, hogy a szakterület legrangosabb kutatói a világ minden részéről eljöttek Budapestre" – hangsúlyozta Klebovich Imre, az Akadémia Gyógyszerészeti Állandó Bizottságának társelnöke, a Semmelweis Egyetem Gyógyszerészeti Intézetének tanszékvezető professzora. Véleménye szerint a közeljövőben drámai áttörések sorozata várható a gyógyszerkutatásban: „A bioanalitikában például olyan mértékű paradigmaváltásnak lehetünk tanúi, amely csak a röntgensugárzás orvosi felhasználásának bevezetéséhez fogható." Mint elmondta: a szelektivitás és a vizsgálati módszerek érzékenységének elképesztő növekedésével új dimenzió nyílik a gyógyszerkutatásban. A számítástechnika e területet is meghódítja, mivel a gyógyszerkutatásban is óriási mértékű számítástechnikai kapacitásra van szükség. Az informatika és a gyógyszerfejlesztés kapcsolatának szemléltetésére Klebovich Imre elmondta, ma már léteznek ún. iontoforetikus tapaszok, amelyekben egy miniszámítógép is helyet kap: „Egy gomb megnyomásával súlyos betegek maguknak adagolhatják a fájdalomcsillapítót vagy más hatóanyagot. A számítógép eközben azt is figyeli, hogy a páciens ne adagolhassa túl a gyógyszert."

A háromnapos konferencián számos itthon, illetve külföldön kutató magyar gyógyszertudós kapott lehetőséget eredményeinek bemutatására. Paál Tamásnak, a Szegedi, illetve Semmelweis Egyetem professzorának *Gondolatok a bioekvivalencia-szabályozásokról – hogyan fejleszthetők?* című előadását követően a műhelytanácskozáson a gyógyszerkinetika és gyógyszerhatástan két világszerte elismert tudósa, Endrényi László, a Torontói Egyetem és Tóthfalusi László, a Semmelweis Egyetem kutatója közös előadásban mutatta be a módosított hatóanyag-leadású gyógyszerformák bioekvivalencia szempontú értékelésének terén végzett vizsgálatait. *(MTA)*

Együtt a jövőért – műszaki értelmiségiek az Akadémián. A kutatás, az innováció nemzetgazdasági szempontból is fontos szerepére hívták fel a figyelmet az előadók a Magyar Műszaki Értelmiség Napja rendezvénysorozatának konferenciáján. A hazai mérnöktársadalom legnagyobb, hatodik alkalommal megrendezett eseményén Budapesten és több vidéki helyszínen is előadásokkal, kiállításokkal, műszaki bemutatókkal várták az érdeklődőket.

„A jövő olyan lesz, mint amilyen a ma iskolája" – idézte Szent-Györgyi Albert Nobel-díjas magyar orvost az akadémiai tanácskozást köszöntő videóüzenetében az ugyancsak Nobel-díjas kémikus, Oláh György, az MTA tiszteleti tagja. Az Egyesült Államokban élő tudós szerint a műszaki pályát választó fiataloknak nagy szerepük lesz a jövő formálásában. „A huszonegyedik században a nemzetek jövője nagymértékben azon fog múlni, milyen eredményeket képesek felmutatni a műszaki kutatásban, az innovációban, ami nem költséget jelent, hanem a jövőbe való befektetést" – mondta. Utalt rá, hogy Magyarország a műszaki tudományok terén nagy múltra tekinthet vissza, és arra biztatta a fiatalokat, hogy tanuljanak tovább ezen az érdekes és a jövőben minden bizonnyal jó megélhetést is biztosító területen.

A rendezvénysorozat harmadik napján megrendezett tudományos konferencia nyitó előadását az „Együtt a jövőért" szlogen jegyében Oláh György kutatótársa, az Egyesült Államokban dol-

gozó Ániszfeld Róbert tartotta *A metanol, a jövő energiahordozója* címmel. Bokor József akadémikus a műszaki haladás lehetséges útját vázolta *Bánkitól a XXII. századig*, Gyulai József akadémikus pedig a Nobel-díjas fizikus, az MTA egykori tiszteleti tagja, Gábor Dénes alakját idézte fel előadásában.

A Magyar Műszaki Értelmiség Napja keretében Budapesten és több vidéki városban is egyetemi nyílt napokkal, konferenciákkal, kiállításokkal várták az érdeklődőket. *(MTA)*

Szemléletváltással a környezettudatosabb gondolkodásért. Felelősségteljesebb hozzáállást, a látványos egyszeri akciók helyett pedig inkább hosszú távú, tudományosan megalapozott programokat tart szükségesnek a környezettudatos gondolkodás és a fenntartható fejlődés érdekében az MTA főtitkára. Németh Tamás a IV. Magyarországi Klímacsúcson és a Rio+20 nemzetközi konferenciára való felkészülés jegyében tartott szakmai egyeztetésen is a következetes lépések fontosságát hangsúlyozta.

„A riói egyezmény 1992-es megszületése óta eltelt két évtized jó alkalom rá, hogy áttekintsük az eddigi eredményeket. A statisztikák alapján globális méretekben a szegénység elleni küzdelemnek és a biológiai sokféleség megőrzése érdekében kifejtett erőfeszítéseknek vannak ugyan sikerei, de valódi eredményeket csak a megkezdett folyamat következetes továbbvitelétől várhatunk" – figyelmeztetett Németh Tamás. Az MTA elnöke, Pálinkás József által 2008-ban létrehozott Környezettudományi Elnöki Bizottság (KÖTEB) elnöke kiemelte: rendszerszintű változásokat kell elérni, az pedig évtizedeket vehet igénybe. A kutatóknak – közöttük a magyar tudományosság képviselőinek is – arra kell törekedniük, hogy mind több ember érezze: felelős környezete megóvásáért. A főtitkár szerint a tudomány ennek a célnak az elérését az oktatás támogatásával, új eredményekkel, valamint a korábbi, de hasznosítható tapasztalatok megőrzésével és alkalmazásával segítheti. Úgy véli, az egyik legnehezebb feladat annak megértetése és elfogadtatása: most kell tennünk azért, hogy a jövő generációja is élhető környezetben élhessen. „Véletlenszerű ötletekkel, látványos akciókkal azonban nem lehet valódi eredményt felmutatni. Időre, tudományos alapokon nyugvó, megfontolt megoldásokra és azok szisztematikus végrehajtására van szükség" – fogalmazott.

A Magyarországi Klímacsúcson pályája, kutatási eredményei és a környezettudatos gondolkodás érdekében kifejtett erőfeszítései elismeréseként életműdíjjal kitüntetett Láng István professzor, az MTA rendes tagja úgy látja, a szemléletváltozás már megkezdődött, egyre többen meghallják a kutatók és szakemberek figyelmeztetéseit. Erre nagy szükség is van, mert a folyamatosan növekvő létszámú emberiség mind nehezebben fog hozzáférni például a semmivel sem helyettesíthető ivóvízhez. A Kárpát-medencében a víz mellett az élelmiszer-termelés feltételei is adottak, de termőföldjeinket, erdeinket óvnunk kell, mert a jövőben fontos gazdasági előnyt jelenthetnek az ország számára. Láng István nagy megtiszteltetésnek nevezte a klímacsúcson kapott életműdíját. Mint elmondta, a szakmai életútja fő szakaszait eddig fémjelző három kulcsszót – környezetvédelem, fenntartható fejlődés, klímaváltozás – egy negyedikkel is ki kell egészítenie: a mind globális, mind nemzeti szinten értelmezendő túléléssel. Az akadémikus továbbra is azon fáradozik, hogy a társadalmi, gazdasági és környezeti kihívásokra megfelelő válaszok szülessenek. *(MTA)*

A MOL ismét díjjal ismerte el a kiemelkedő középiskolai tanárok munkáját. Harmadik alkalommal adta át a MOL az egykori diákjaik által jelölt kiváló természettudományos középiskolai tanároknak járó MesterM-díjakat a Szépművészeti Múzeumban, Budapesten.

A 2010-ben alapított MesterM-díj jelenleg az egyik legrangosabb hazai elismerés, amelyet a középiskolai matematika-, fizika- és kémiatanárok kaphatnak. A MOL kiemelt figyelmet fordít a műszaki szakember-utánpótlás biztosítására, és azért hozta létre ezt a díjat, mert ennek alapját azok az elkötelezett tanárok teremtik meg, akik a középiskolában példaadó munkájuk során megszerettetik tanítványaikkal a természettudományos tárgyakat. Ezért kérte fel a főiskolai és egyetemi hallgatókat a MOL, hogy jelöljék kedves tanárukat a díjra, akik megismertették őket e tantárgyak szépségeivel, és a természettudományi-mérnöki pályára irányították őket. „A magas színvonalú természettudományos oktatás alapvető pillére az erős hazai gazdaság megteremtésének, ami mindannyiunk érdeke. A díjazott tanárok lelkiismeretes munkájukkal rengeteget tettek azért, hogy minél több leendő szakember kerüljön ki a hazai iskolapadokból. Bízunk benne, hogy a pályán általuk elindított kiváló szakemberek közül sokan a MOL-csoportot választják majd munkahelyüknek" – mondta Somlyai Dóra, a MOL-csoport kommunikációs igazgatója. Az idén közel 300 jelölés érkezett közel 190 tanárra, akik közül a MOL szakembereiből álló zsűri választotta ki a legjobbakat.

Egykori tanítványaik jelölése alapján 2012-ben a következő kémiatanárok vehették át a MOL MesterM-díjat és az azzal járó pénzjutalmat: Hancsák Károly, Radnóti Miklós Kísérleti Gimnázium, Szeged; Stefanik Klára, Andrássy Gyula Gimnázium és Kollégium, Békéscsaba; Szórád Endre, Bolyai Tehetséggondozó Gimnázium és Kollégium, Zenta. *(MOL)*

Banai Endre összeállítása

NANOPAPRIKA-POSTER 2012
2nd Virtual Nanotechnology Poster Conference
10–14 September 2012
www.nanopaprika.eu/np2012
Nanotechnológiai kutatások – virtuális tudományos konferencia másodszor, hazai kezdeményezésre

MKE-HÍREK

Konferenciák, rendezvények

Őszi Radiokémiai Napok
2012. október 8-10.
Hotel Magistern, Siófok, Beszédes József sétány 72.
Online jelentkezés: www.mke.org.hu

6. Central and Eastern European Proteomic Conference
2012. október 14–17., Budapest
Online jelentkezés: http://www.chemres.hu/ms/6thceepc/index.html
Kiállítók jelentkezését szeretettel várjuk!
TOVÁBBI INFORMÁCIÓK: Schenker Beatrix, proteomics@chemres.hu

Short course on Thermal Analysis
2012. október 15-17., Budapest
Online regisztráció http://www.thermanal.mke.org.hu/

Kiállítók jelentkezését szeretettel várjuk!
TOVÁBBI INFORMÁCIÓK: thermanal@mke.org.hu

Kozmetikai Szimpózium 2012

Budapest, Bara Hotel, 2012. November 22.

A kozmetikai tudományok aktuális kérdései

Témák: új ható- és segédanyagok, természetes kozmetikumok, öregedés elleni trendek, technológiai és szerkezeti kérdések, klinikai és hatékonysági vizsgálatok
TOVÁBBI INFORMÁCIÓK: Schenker Beatrix, beatrix.schenker@mke.org.hu
Onilne jelentkezés hamarosan a www.mke.org.hu honlapon keresztül.

A Magyar Kémikusok Egyesülete Kristályosítási és Gyógyszerformulálási Szakosztálya és az MKE Richter munkahelyi szervezete „Kristályosítási technológiák méretnövelése és hatásuk a gyógyszerformulálásra" címmel Kerekasztal Konferenciát szervez.

Helyszín: Richter Gedeon Nyrt. Üdülő és Rendezvény Központ, Balatonszemes Munkácsy M. u. 1.

Időpont: 2012. október 26-27.

A konferencia kétnapos. Az első nap programja a fenti című „kerekasztal" két plenáris előadóval: Dr. Nagy Zoltán (Loughborough University) és Dr. Nagy Tibor Pilot üzemvezető (Richter Gedeon Nyrt). Ezt követi a „kerekasztal"-beszélgetés, kötetlen diszkusszió a témáról.

A második napon szakmai előadások lesznek 15 perc + 5 perc diszkusszió időtartamban gyógyszeripari hatóanyagok polimorfiája, kristályosítása, gyógyszerformulálás, továbbá az ezekhez tartozó szilárd fázisú analitikatémaköréből.

A kollégáktól elsősorban új, érdekes módszerek, tudományos és gyakorlati eredmények bemutatását várjuk.

INFORMÁCIÓ: Farkas Béla, a Kristályosítási és Gyógyszerformulálási Szakosztály titkára, bfarkas@invitel.hu, +36/20/386-7945

Az MKE Intézőbizottság ülése

(2012. június)

1. Az MKE és a közoktatás közötti kapcsolatápolás keretében az Intézőbizottság úgynevezett kihelyezett ülést tartott a budapesti *Petrik Lajos Két Tanítási Nyelvű Vegyipari, Környezetvédelmi és Informatikai Szakközépiskolában*. A helyszínválasztást az indokolta, hogy egy Európai Uniós pályázati pénzzel támogatott, 1 Mrd Ft-os beruházás keretében az iskola vegyészképzést szolgáló laboratóriuma imponáló gazdagságú felszereltséggel megújult. Az iskolát és a laboratóriumot Baranyiné C Veres Anna műszaki igazgatóhelyettes mutatta be az IB tagjainak.
2. Az IB megvitatta Pálinkó Istvánnak, az Irinyi OKK Versenybizottság elnökének a 2011–2012. évi versenyévadról szóló beszámolóját, amelyhez Szalay Luca, a Kémiatanári Szakosztály elnöke is tett írásos kiegészítést. A legfontosabb megállapítás, hogy a verseny mindhárom fordulója sikeresen lezajlott. A tapasztalatok alapján a következő évi versenykiírásban néhány újabb információt célszerű rögzíteni például a verseny „nehézségi ívét" megvalósító feladatokkal, vagy a második forduló kötelező laboratóriumi gyakorlatával kapcsolatban. A döntő harmadik fordulónak helyszínt adó Miskolci Egyetem a 2013-as döntővel zárja ötéves rendezési ciklusát, ezért a következő döntőhelyszínre vonatkozó pályázatot az MKE rövid határidőn belül kiírja.
3. Simonné Sarkadi Livia megújítandó nemzetközi együttműködési megállapodásokról tájékoztatott.

Kovács Attila

Bruckner Győző-emléktáblát avattak

2011. november 29-én felavatták Bruckner Győző akadémikus, az ELTE Szerves Kémiai Tanszéke korábbi tanszékvezető professzorának (1949–1970), az MTA–ELTE Peptidkémiai Kutatócsoport alapító vezetőjének (1961) emléktábláját Budapesten, annak a háznak a falán, ahol a professzor lakott.

Az emléktábla elhelyezése az ELTE Szerves Kémiai Tanszék kezdeményezésére, az MTA Kémiai Tudományok Osztályával közösen valósult meg. Avatóbeszédet mondott Medzihradszky Kálmán akadémikus, az ELTE professor emeritusa, az MTA Kémiai Tudományok osztálya korábbi elnöke, majd Hudecz Ferenc akadémikussal, az ELTE korábbi rektorával, az ELTE Szerves Kémiai Tanszékének vezetőjével leleplezték a márvány emléktáblát. A rendezvény a Magyar Tudomány Ünnepéhez és a Kémia Nemzetközi Évéhez is kapcsolódott.

HUNGARIAN CHEMICAL JOURNAL
LXVII. No. 9. September 2012

CONTENTS

The miracle and efforts of laboratory work. An interview with Professor **Csaba Szántay** 258
TAMÁS KISS
Shared glory doubles glory. An interview with Professor **Ernő Pretsch** 260
TAMÁS KISS
Computational enzimology 264
JULIANNA OLÁH, BALÁZS KRÁMOS
Elimination of substances effecting the hormonal system of living organisms with traditional water treatment methods 268
RENÁTA ZÁKÁNYI MÉSZÁROS
Chemist in a coffee shop – a review 273
GÁBOR LENTE
Bruckner Room Lectures
The effect of analogous molecular structures on the separation of enatiomeric mixtures 274
EMESE PÁLOVICS
Supercritical carbon dioxide: new perspectives for the synthesis of optically active compounds 275
EDIT SZÉKELY
The Lajos Petrik technical college 277
ANNA BARANYI VERES
Chemistry calendar (Edited by **JÓZSEF SÁNDOR PAP**) 279
Emil Fischer was born 160 years ago 281
ANDRÁS MÉNES
Chembits (Edited by **GÁBOR LENTE**) 282
The Society's Life 284
News of the Month 285

Még egyszer az Irinyi János Középiskolai Kémiaversenyről

Korábbi beszámolónkban nem esett szó a verseny gazdasági hátteréről, s bár a kormányzati és szponzori támogatások gyűjtése a színfalak mögött folyik, egyszerűen szólva: ha nincs pénz, akkor nincsen verseny. Felmerülhet persze a kérdés, hogy vajon honnan származnak a költségek – főként azért, mert az Egyesület a harmadik (döntő) fordulóban résztvevőktől, a versenyzők iskoláitól és a tanároktól is kér anyagi hozzájárulást. Az előző beszámolóból ismert, hogy valójában egy háromfordulós versenysorozatról van szó, és az utolsó két fordulóhoz laboratóriumi gyakorlatok is társulnak.

A versenyfeladatokat mind a három fordulóhoz az Irinyi Versenybizottság készíti, az első két fordulóban ezeket az Egyesület Titkársága továbbítja a megyei pedagógiai intézeteknek. Az első (iskolai) forduló megrendezésének költségeit (amely főleg a feladatlapok szükséges példányszámú fénymásolását és a dolgozat megírásához szükséges papír előteremtését jelenti) az iskolák viselik.

A második forduló írásbeli részéhez szükséges feladatlapokat azonban már minden versenyző esetében teljes egészében az Egyesület adja, ez kb. 2000 feladatlap-csomag. Így van ez a harmadik fordulóban is (kb. 200 feladatlap-csomag), ahol a feladatlapokon kívül az íróeszközöket, a különféle borítékokat (egy a versenyző adatainak, egy a megoldott feladatoknak), a tanárok feladatlap- és megoldás-csomagjait is az Egyesület biztosítja, emellett hozzájárul a laboratóriumi forduló költségeihez. Továbbá minden regisztrált versenyző és kísérőtanár kap egy konferenciacsomagot, amely a Magyar Kémikusok Lapja és a Kökél néhány számán kívül egy konferenciatáskát, és egy, a verseny logójával ellátott pólót tartalmaz. Természetesen a verseny költségvetéséből kerülnek ki az érmek, a helyezettek és tanáraik oklevelei, díjai, valamint a legsikeresebb tanárok és iskolák jutalmai is. Ugyancsak forrást igényelnek az apró figyelmességek a javításban részt vevő tanárok, a verseny és a helyi szervezőbizottság tagjai részére – persze tudjuk, mindez csak jelképes köszönet-kifejezés. Vendégül látjuk a határon túli diákokat és kísérőtanáraikat is. Na, de hová lettek a versenyzők iskolái és a kísérőtanárok által befizetett összegek? Ezek fedezik, sajnos csak részlegesen, a bő kétnapos verseny szállás- és ellátási költségeit. A fennmaradó rész, és még számos egyéb szervezési kiadás szintén a verseny költségvetését terheli.

Könnyű belátni, hogy ha az Egyesület tagdíjbevételéből kellene a költségeket fedezni, akkor ez igen gyorsan teljes anyagi csődhöz vezetne. A versenyzők iskolái és a tanárok által befizetett összegeket sem növelhetjük, még ha a szállás- és ellátási költségek egyre kisebb részét fedezik is. Szerencsére, akárcsak az Egyesület, a kormányzat is fontosnak tekinti a versenyrendszer fennmaradását, és pályázati keretek között támogatja. Az Egyesület sikeresen szerepelt az Emberi Erőforrások Minisztériuma által ez évben kiírt pályázaton, és a versenysorozatot, az előző évekhez hasonlóan, a MOL Nyrt. kiemelten támogatta. Évről évre számíthatunk a Richter Gedeon Nyrt. segítségére is, valamint a Miskolci Egyetem, a B.A.Z. Megyei Önkormányzat és még sok, a kémikus-utánpótlást, így a versenyt is fontosnak tartó cég adományaira:

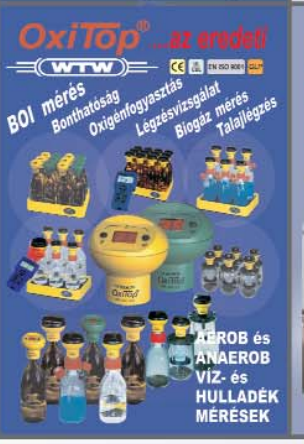
A 44. Irinyi János Középiskolai Kémiaverseny részben az Emberi Erőforrások Minisztériuma megbízásából, az Oktatáskutató és Fejlesztő Intézet és a Közigazgatási és Igazságügyi Minisztérium Wekerle Sándor Alapkezelő által meghirdetett NTP-KTTV-11-0078 kódszámú pályázati támogatásból valósult meg.

Nagyszerű megtapasztalni, hogy ilyen sokan érzik át a jövő iránti felelősséget és tartják szívügyüknek a kémikus-utánpótlás érdekében hozott kisebb-nagyobb anyagi áldozatokat. Kizárólag ezek a tiszteletre méltó támogatók tették lehetővé a verseny színvonalas megrendezését ez évben is.

Mindezekért az Egyesület, a Versenybizottság és a Rendezőbizottság, valamint a versenyző diákok és felkészítő tanáraik nevében köszönetet mond:

Sarkadi Livia, az MKE elnöke
Androsits Beáta, az MKE ügyvezető igazgatója
és **Pálinkó István,** a Versenybizottság elnöke

KÖRNYEZETVÉDELEM - VÍZANALITIKA



PROFESSZIONÁLIS MÉRÉSTECHNIKA ELÉRHETŐ ÁRON

AKTIVIT Kft.
1145 Budapest, Pétervárad u. 14.
Tel: +36-(1)-470-0125, 221-7865.
Fax: 252-9940, Mail: info@aktivit.hu, web:www.aktivit.hu
Környezetvédelmi műszerek, analitikai eszközök

MÉRÉSTECHNIKA & LABORTECHNIKA